

Bronisław Średniawa

O związku pomiędzy metodą operatorów statystycznych i równaniem Schrödingera dla układów nieodosobnionych

Wstęp

Zakładamy, że równanie Schrödingera z hamiltonianem niezależnym od czasu jest słuszne dla dowolnych układów odosobnionych. Stąd nie wynika jednak, aby było ono słuszne dla układów, dla których hamiltonian zależy od czasu. Układ A z hamiltonianem zależnym od czasu jest układem współdziałającym z innym układem B , tak że oba układy stanowią układ odosobniony mający hamiltonian niezależny od czasu. Ściśle biorąc tylko łączny układ jako całość podlega równaniu Schrödingera, ale nasz układ A , choćby nawet miał w pierwszej chwili funkcję falową, natychmiast ją traci pod wpływem współdziałania z układem B .

Postaramy się jednak wykazać, że istnieją takie przypadki, w których — ujmując zagadnienie chwilowo zupełnie ogólnikowo — można przez pewien czas opisywać zachowanie się układu A za pomocą równania Schrödingera z hamiltonianem zależnym od czasu. Jeżeli niezależny od czasu hamiltonian układu A odłączonego od układu B oznaczymy przez H_A , to hamiltonian tego „równania zastępczego“ będzie miał kształt $H_A + U(t)$, gdzie $U(t)$ będzie grało rolę hamiltonianu zaburzenia, zależnego od szczegółów struktury układów A i B i od hamiltonianu współdziałania (niezależnego od czasu).

W paragrafie 1 określimy oba układy A i B , z których jeden (A) będzie grał rolę układu badanego, a drugi (B) — układu zaburzającego. W paragrafie 2 przypomnimy pojęcia operatorów statystycznych dla stanów czystych i mieszanych. Następnie w paragrafie 3 przypomnimy związek między operatorem statystycznym układu złożonego a operatorami statystycznymi jego części oraz sposób obliczania na podstawie tych operatorów statystyki pomiarów wielkości fizycznych dla układów częściowych według Londona i Bauera [1]. W paragrafie 4 obliczymy operatory statystyczne dla układów A i B zdefiniowanych w paragrafie 1, po czym w paragrafie 5 uwzględnimy dopiero założenia, że układ B jest układem makroskopowym; następnie oszacujemy rzędy wielkości prawdopodobo-

bieństw przejścia każdego z układów od stanów początkowych do dowolnych stanów energetycznych końcowych oraz wyznaczmy czas, w którym można uważać, że układ makroskopowy B nie zmienił swojego stanu. W paragrafie 6 zajmiemy się konstrukcją funkcji $U(t)$ i wykazemy, że metoda perturbacji zależnych od czasu zastosowana do równania Schrödingera dla układu A z hamiltonianem $H_A + U(t)$ daje w dużym przybliżeniu te same prawdopodobieństwa przejścia, co ścisła (w sensie nierelatywistycznej mechaniki kwantowej) metoda operatorów statystycznych.

§ 1. Określenie układów A i B

Rozważmy układ złożony z dwóch współdziałających części A i B , odosobniony jako całość, który wobec tego posiada funkcję falową i podlega równaniu Schrödingera z hamiltonianem niezależnym od czasu. Pozostajemy w obrębie mechaniki kwantowej nierelatywistycznej. Założmy, że oba współdziałające układy są w chwili początkowej $t=0$ w stanach czystych, to znaczy, że każdy z nich posiada swoją funkcję falową. Jest rzeczą wiadomą, że wskutek współdziałania oba układy przechodzą w stany zwane stanami mieszanymi, które nie mogą być opisane przez funkcję falową, dla których jednak da się określić tzw. operator statystyczny [2]. Za pomocą operatora statystycznego możemy obliczać prawdopodobieństwa znalezienia określonych wartości przy pomiarze jakiegokolwiek wielkości fizycznej (w szczególności energii), dokonanym na układzie, który znajduje się w danym stanie (czystym lub mieszanym). Ponieważ, ściśle biorąc, żaden z układów częściowych nie posiada dla $t > 0$ funkcji falowej, nie podlega on więc równaniu Schrödingera ani żadnemu innemu równaniu różniczkowemu.

Założmy teraz, że potencjał współdziałania pomiędzy oboma układami A i B jest mały wobec energii każdego z tych układów z osobna i że jeden z układów, np. B , można uważać za „makroskopowy“ (w sensie, który bliżej wyjaśnimy w paragrafie 5) oraz, że w chwili $t=0$ układ A znajduje się w jednym ze stanów własnych energii. Wykażemy (na przykładzie dwóch współdziałających oscylatorów harmonicznych), że wtedy, mając dany potencjał współdziałania pomiędzy układami, niezależny od czasu, możemy skonstruować funkcję $U(t)$ posiadającą następującą własność: Wstawiamy funkcję $U(t)$ do równania Schrödingera dla układu A jako zależną od czasu energię zaburzającą. Do równania tego stosujemy metodę perturbacji zależnych od czasu i obliczamy prawdopodobieństwa przejścia układu A ze stanu początkowego energii do innych stanów energii; wówczas w pewnym przedziale czasowym, który oszacujemy, otrzymamy w znacznym przybliżeniu te same prawdopodobieństwa przejścia, co obliczone metodą operatorów statystycznych. Możemy

więc przy naszych założeniach uważać, że w czasie tym w dużym przybliżeniu stan układu jest stanem czystym i układ ten podlega równaniu Schrödingera z hamiltonianem zależnym od czasu, będącym sumą hamiltonianu układu A (po odłączeniu go od układu B) oraz hamiltonianu zaburzenia, które pochodzi od makroskopowego układu B .

§ 2. Operatory statystyczne dla stanu czystego i stanu mieszanego

O jakimkolwiek układzie opisanym przez funkcję falową $\Psi(x, t)$ podlegającą równaniu Schrödingera mówimy, że znajduje się w stanie czystym. Założymy, że funkcja falowa jest znormalizowana, a więc

$$(\Psi, \Psi) = \int \Psi^* \Psi dx = 1.$$

(Symbol x może oznaczać jedną lub więcej współrzędnych).

Wiadomo, że średnia wartość dowolnej wielkości dynamicznej w stanie opisanym przez funkcję Ψ dana jest wyrażeniem

$$\langle G \rangle = (\Psi, G\Psi) = \int \Psi^* G\Psi dx.$$

Funkcję Ψ można rozwinąć na szereg ortonormalnych funkcji $\psi_i(x)$ tworzących układ zupełny funkcyj, jak następuje:

$$\Psi = \sum_i c_i(t) \psi_i(x). \quad (1)$$

Wtedy wyrażenie na średnią wartość wielkości G przyjmuje postać

$$\langle G \rangle = \sum_{ik} G_{ik} c_k c_i^*, \quad (2)$$

gdzie

$$G_{ik} = \int \psi_i^* G \psi_k dx.$$

Wzór (2) można przedstawić w postaci śladu (trasy) iloczynu dwóch macierzy G_{ik} oraz

$$(P_{\psi}^{(\psi)})_{ij} = c_i c_j^*, \quad (3)$$

a mianowicie

$$\langle G \rangle = \text{Tr}(GP_{\psi}^{(\psi)}). \quad (4)$$

Macierz $P_{\psi}^{(\psi)}$ możemy uważać za macierz operatora P_{ψ} w układzie funkcyj ψ_k . Operator P_{ψ} nazywamy operatorem statystycznym układu znajdującego się w stanie czystym określonym przez funkcję falową Ψ .

Weźmy teraz pod uwagę układ, który nie może być opisany przez funkcję falową, ale o którym wiemy, że w chwili t jego stan opisany jest z prawdopodobieństwem p_1 przez funkcję falową Ψ_1 , z prawdopodobień-

stwem p_i przez funkcję falową Ψ_i itd. O układzie takim mówimy, że znajduje się w stanie mieszanym. Zachowanie się takiego układu nie może być opisane przez równanie Schrödingera ani przez żadne inne równanie różniczkowe. Można jednak uogólnić pojęcie operatora statystycznego tak, aby wzór (4) pozostał też słuszny dla stanu mieszanego.

Z definicji stanu mieszanego wynika mianowicie od razu, że średnia wartość dowolnej wielkości jest równa

$$\langle G \rangle = \sum_i p_i (\Psi_i G \Psi_i). \quad (5)$$

(Wyrażenie to można ewentualnie uważać za część definicji stanu mieszanego).

Rozwijając teraz funkcję Ψ_i na szereg zupełny ortonormalnych funkcji własnych dowolnego operatora F

$$\psi_i = \sum_k c_k^{(i)} \psi_k(x),$$

otrzymujemy z (5)

$$\langle G \rangle = \sum_i p_i \sum_{k,l} c_k^{*(i)} c_l^{(i)} G_{kl}.$$

Wprowadzając teraz operator P za pomocą wzoru

$$P = \sum_i p_i P_{v_i}, \quad (6)$$

gdzie, jak widać z (6),

$$(P_{v_i}^{(v_k)})_{lm} = c_l^{(i)} c_m^{*(i)}, \quad (7)$$

otrzymujemy na wartość średnią wielkości G wyrażenie

$$\langle G \rangle = \text{Tr}(GP). \quad (8)$$

Operator P określony wzorem (6) nazywamy operatorem statystycznym danego stanu mieszanego.

W wypadku stanu mieszanego znajomość układu jest, jak wiadomo, znacznie bardziej ograniczona niż dla stanu czystego¹⁾.

§ 3. Układ złożony z dwóch części

Dany jest układ złożony z dwóch części współdziałających ze sobą. Układy częściowe oznaczymy przez A i B , układ łączny przez $A+B$. Układy A i B są sprzężone dostatecznie słabo, tak aby można było mówić o wielkościach fizycznych (np. energii) układów A i B z osobna. Założmy, że układ łączny jest odosobniony i znajduje się w stanie czystym. Jego

¹⁾ Zob. London i Bauer [1], str. 24.

funkcję falową oznaczymy przez $\Psi(x, X, t)$, gdzie x są współrzędnymi układu A , natomiast X — współrzędnymi układu B .

Obierzmy dwa układy zupełne funkcji ortonormalnych $\varphi_m(x), \Phi_\mu(X)$. Funkcję ψ możemy zawsze jak wiadomo napisać w postaci szeregu podwójnego

$$\psi(x, X, t) = \sum_{m, \mu} f_{m\mu}(t) \varphi_m(x) \Phi_\mu(X). \quad (9)$$

Zatem, jak widać z (3), macierz operatora statystycznego dla układu $A+B$ ma w układzie funkcyj φ_m, Φ_μ postać

$$P_{m\mu, m'\mu'}(t) = f_{m\mu}(t) f_{m'\mu'}^*(t). \quad (10)$$

Aby obliczyć operatory statystyczne obu układów A i B z osobna, bierzemy najpierw pod uwagę dowolną wielkość fizyczną F odnoszącą się do układu A i oznaczamy jak zwykle

$$(\varphi_k, F\varphi_{k'}) = F_{kk'}.$$

Średnia wartość wielkości F w stanie ψ jest równa

$$\langle F \rangle = (\psi, F\psi) = \sum_{m, m', \mu} f_{m\mu} f_{m'\mu'}^* F_{mm'}.$$

Wyrażeniu temu możemy nadać postać

$$\langle F \rangle = \text{Tr}(P^A F), \quad (11)$$

gdzie

$$P_{mm'}^A = P_{mm'}^{A(\varphi_i)}(t) = \sum_{\mu} f_{m\mu}(t) f_{m'\mu}^*(t) \quad (12)$$

jest macierzą operatora statystycznego P w układzie funkcyj φ_i .

W podobny sposób otrzymuje się macierz operatora statystycznego układu B w układzie funkcyj Φ_i

$$P_{\mu\mu'}^B = P_{\mu\mu'}^{B(\Phi_i)}(t) = \sum_m f_{m\mu}^*(t) f_{m\mu'}(t). \quad (13)$$

Z wzorów (12) i (13) widać, że zarówno układ A , jak i B znajduje się w stanie mieszanym, pomimo że układ łączny pozostaje w stanie czystym.

Na podstawie wyrażenia (12) można obliczyć dla układu A prawdopodobieństwo p_m znalezienia stanu określonego funkcją falową φ_m . Ponieważ współczynniki rozwinięcia funkcji ψ na układ funkcyj φ_i są równe δ_{mi} , więc w układzie funkcyj φ_i mamy

$$(P_{\varphi_m}^A)_{ik} = \delta_{mi} \delta_{mk}.$$

Macierz operatora statystycznego dla układu A ma więc według (7) postać

$$P_{ik}^A = \sum_m \delta_{im} \delta_{im},$$

a więc

$$P_{ik}^A = p_m \quad \text{dla } i = k = m,$$

a poza tym

$$P_{ik}^A = 0.$$

Porównując ten wynik z (12) otrzymujemy na szukane prawdopodobieństwo wyrażenie

$$p_m = \sum_{\mu} f_{m\mu}^* f_{m\mu}. \quad (14)$$

Analogiczne rozumowanie dla układu B na podstawie wzoru (13) daje na prawdopodobieństwo znalezienia w mieszaninie stanu określonego przez funkcję falową Φ_{μ} wyrażenie

$$\sum_m f_{m\mu}^* f_{m\mu}. \quad (15)$$

§ 4. Obliczenie operatorów statystycznych układów A i B

Musimy najpierw rozwiązać równanie Schrödingera dla układu łącznego $A+B$. Stąd wyniknie już w prosty sposób wyrażenie na operator statystyczny układu $A+B$. Za pomocą tego operatora statystycznego obliczymy operatory statystyczne układów A i B .

Wprowadzimy teraz następujące oznaczenia:

dla układu A : współrzędne $- \chi$
 hamiltonian $- H_A$
 wartości własne operatora $H_A - \dot{w}_m$
 funkcje „ „ $H_A - \dot{\varphi}_m$

dla układu B : współrzędne $- \chi$
 hamiltonian $- H_B$
 wartości własne operatora $H_B - W_{\mu}$
 funkcje „ „ $H_B - \dot{\Phi}_{\mu}$

Zakładamy, że potencjał współdziałania ma postać

$$\lambda V(x, X)$$

i traktujemy λ jako wielkość nieskończenie małą.

W paragrafie 1 założyliśmy, że układ A znajduje się w chwili $t=0$ w jednym ze stanów własnych energii. Jego funkcję falową dla $t=0$

oznaczymy przez $\varphi_i(x)$. Natomiast co do układu B założyliśmy, że nie musi on znajdować się w chwili początkowej w jednym ze stanów własnych energii, ale jest w stanie czystym. Funkcję falową w chwili $t=0$ rozwiemy na szereg funkcji własnych energii układu B i napiszemy w postaci

$$\sum_{\mu} c_{\mu} \hat{\Phi}_{\mu}(X),$$

gdzie c_{μ} są stałymi. W ten sposób przygotowany jest grunt do tego, aby układ B był początkowo w stanie opisanym przez „pakiet stanów energetycznych”.

Funkcja falowa układu $A+B$, którą oznaczyliśmy w paragrafie 3 przez $\Psi(x, X, t)$, spełnia równanie Schrödingera z hamiltonianem niezależnym od czasu

$$(H_A + H_B + \lambda V)\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi. \quad (16)$$

Równanie to rozwiążemy w pierwszym przybliżeniu przy zadanym warunku początkowym

$$\Psi(0) \equiv \Psi(x, X, 0) = \hat{\varphi}_i \sum_{\mu} c_{\mu} \hat{\Phi}_{\mu}(X). \quad (17)$$

Wprowadźmy oznaczenia:

$$\begin{aligned} \hat{W}_{m\mu} &= \hat{w}_m + \hat{W}_{\mu}, \\ \hat{\Psi}_{m\mu}(x, X) &= \hat{\varphi}_m(x) \hat{\Phi}_{\mu}(X), \\ \hbar\omega_{mn} &= \hat{w}_m - \hat{w}_n, \quad \hbar\Omega_{\mu\nu} = \hat{W}_{\mu} - \hat{W}_{\nu}. \end{aligned}$$

Ogólne rozwiązanie równania (16) można napisać — jak wiadomo — w postaci

$$\Psi = \sum_{m,\mu} c_{m\mu} \Psi_{m\mu} e^{-\frac{i}{\hbar} W_{m\mu} t}, \quad (18)$$

gdzie $c_{m\mu}$ są stałymi, które wyznacza się z warunku początkowego; $W_{m\mu}$ i $\Psi_{m\mu}$ są wartościami własnymi i funkcjami własnymi równania

$$(H_A + H_B + V)\Psi_{m\mu} = W_{m\mu} \Psi_{m\mu}. \quad (19)$$

W celu obliczenia $W_{m\mu}$ oraz $\Psi_{m\mu}$ w pierwszym przybliżeniu zastosujemy metodę perturbacji niezależnych od czasu. Zakładamy, że układ $A+B$ oraz układy A i B są niezwyrodniałe. Wtedy z teorii perturbacji otrzymamy

$$\begin{aligned} W_{m\mu} &= \hat{W}_{m\mu} + \lambda V_{m\mu, m\mu} \\ \Psi_{m\mu} &= \hat{\Psi}_{m\mu} - \lambda \sum'_{k,\kappa} \frac{V_{k\kappa, m\mu}}{\hat{W}_{k\kappa} - \hat{W}_{m\mu}} \hat{\Psi}_{k\kappa}^1, \end{aligned} \quad (20)$$

¹⁾ $\sum'_{k,\kappa}$ oznacza sumę po wszystkich $(k, \kappa) \neq (m, \mu)$.

czyli

$$\Psi_{m\mu} = \hat{\Psi}_{m\mu} - \frac{\lambda}{\hbar} \sum'_{k,\kappa} \frac{V_{k\kappa,m\mu}}{\omega_{km} + \Omega_{\kappa\mu}} \hat{\Psi}_{k\kappa}, \quad (21)$$

gdzie jak zwykle

$$V_{k\kappa,m\mu} = \iint dx dX \hat{\Phi}_k^* \hat{\Phi}_\kappa^* V \hat{\Phi}_m \hat{\Phi}_\mu.$$

Z kolei wyznaczymy współczynniki $c_{m\mu}$ z warunku początkowego

$$\sum_{m,\mu} c_{m\mu} \Psi_{m\mu} = \Psi(0),$$

skąd

$$c_{m\mu} = \iint dx dX \Psi_{m\mu}^* \Psi(0). \quad (22)$$

Podstawiając (17) i (21) do (22) otrzymujemy

$$c_{m\mu} = \delta_{m\mu} c_\mu - \frac{\lambda}{\hbar} \sum'_{k,\kappa} \frac{V_{m\mu,k\kappa}}{\omega_{km} + \Omega_{\kappa\mu}} c_\kappa \delta_{ik}. \quad (23)$$

Podstawiając (21) i (23) do (18) otrzymujemy szukane rozwiązanie równania Schrödingera w pierwszym przybliżeniu

$$\Psi = \sum_\mu c_\mu \left[\hat{\Psi}_{i\mu} e^{-\frac{i}{\hbar} W_{i\mu} t} - \frac{\lambda}{\hbar} \sum'_{k,\kappa} \frac{V_{k\kappa,i\mu}}{\omega_{ki} + \Omega_{\kappa\mu}} \hat{\Psi}_{k\kappa} (e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{W}_{i\mu} t} - e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{W}_{k\kappa} t}) \right]. \quad (24)$$

W pierwszej sumie składającej się z wyrazów skończonych figuruje w wykładniku $W_{i\mu}$, w następnych sumach — tylko $\hat{W}_{m\mu}$, gdyż uwzględnienie w nich $W_{m\mu}$ dałoby wyrazy proporcjonalne do λ^2 , które zaniedbujemy.

Aby obliczyć teraz operator statystyczny dla układu $A+B$, piszemy szereg (24) w postaci (zob. § 3)

$$\Psi(x, X, t) = \sum_{m,\mu} f_{m\mu}(t) \hat{\Psi}_{m\mu}(x, X).$$

Współczynniki $f_{m\mu}(t)$ możemy — jak wiadomo — obliczyć za pomocą wzorów

$$f_{m\mu}(t) = \iint dx dX \hat{\Psi}_{m\mu}^* \Psi. \quad (25)$$

Podstawiając (24) do (25) otrzymujemy

$$f_{m\mu} = c_\mu \delta_{m\mu} e^{-\frac{i}{\hbar} W_{i\mu} t} - \frac{\lambda}{\hbar} \sum'_{k,\nu} \frac{V_{k\mu,i\nu}}{\omega_{ki} + \Omega_{\nu\mu}} c_\nu \delta_{m\nu} (e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{W}_{i\nu} t} - e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{W}_{m\mu} t}),$$

przy czym \sum'_{kv} oznacza sumę po $(k, \nu) \neq (i, \mu)$, czyli

$$\begin{aligned} f_{i\mu}(t) &= c_{i\mu} e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{W}_{i\mu} t} \\ f_{m\mu}(t) &= -\frac{\lambda}{\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{W}_{m\mu} t} \sum'_{\nu \neq \mu} c_{\nu} \frac{V_{m\mu, i\nu}}{\omega_{mi} + \Omega_{\mu\nu}} (e^{-(\omega_{mi} + \Omega_{\mu\nu})t} - 1) \end{aligned} \quad (26)$$

dla $m \neq i$.

Operator statystyczny dla układu $A+B$ ma więc wg (10) postać

$$P_{m\mu, n\nu}^{A+B}(t) = f_{m\mu}(t) f_{n\nu}^*(t).$$

Wiemy już z § 3, że układy A i B znajdują się (dla $t > 0$) w stanach mieszanych.

Dla układu A prawdopodobieństwo znalezienia m -tego stanu własnego energii w mieszaninie jest równe według wzoru (14)

$$P_{m(i)} = \sum_{\mu} f_{m\mu}^*(t) f_{m\mu}(t). \quad (12)$$

Podstawiając (26) do (12) otrzymamy dla $m \neq i$

$$P_{m(i)} = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \sum_{\mu} \left[\sum'_{\nu \neq \mu} c_{\nu}^* \frac{V_{m\mu, i\nu}^*}{\omega_{mi} + \Omega_{\mu\nu}} (e^{i(\omega_{mi} + \Omega_{\mu\nu})t} - 1) \sum'_{\rho \neq \mu} c_{\rho} \frac{V_{m\mu, i\rho}}{\omega_{mi} + \Omega_{\mu\rho}} (e^{-i(\omega_{mi} + \Omega_{\mu\rho})t} - 1) \right]. \quad (27)$$

Aby doprowadzić to wyrażenie do postaci wygodnej do rachunków, rozważmy najpierw sumę podwójną $\sigma_{\nu\rho}$ po ν i po ρ przy ustalonych i, m, μ i wprowadźmy oznaczenia

$$a_{\nu} = (\omega_{mi} + \Omega_{\mu\nu})t, \quad (28)$$

$$\frac{V_{m\mu, i\nu}}{\omega_{mi} + \Omega_{\mu\nu}} = k_{\nu} = |k_{\nu}| e^{i\gamma_{\nu}}. \quad (29)$$

Wtedy rozważana suma podwójna przyjmie postać

$$\sigma_{\nu\rho} = \sum_{\nu} k_{\nu}^* (e^{ia_{\nu}} - 1) \sum_{\rho} k_{\rho} (e^{-ia_{\rho}} - 1) = \sum_{\nu} \sum_{\rho} |k_{\nu} k_{\rho}| e^{i(\gamma_{\rho} - \gamma_{\nu})} (e^{i(a_{\nu} - a_{\rho})} - e^{ia_{\nu}} - e^{-ia_{\rho}} + 1).$$

Ponieważ, jak widać z (12), $\sigma_{\nu\rho}$ jest rzeczywiste, więc możemy uwzględnić tylko część rzeczywistą

$$\sigma_{\nu\rho} = \sum_{\nu} \sum_{\rho} |k_{\nu} k_{\rho}| (\cos(a_{\nu} - a_{\rho} + \gamma_{\rho\nu}) - \cos(a_{\nu} + \gamma_{\rho\nu}) - \cos(a_{\rho} + \gamma_{\rho\nu}) + \cos \gamma_{\rho\nu}), \quad (30)$$

gdzie

$$\gamma_{\rho\nu} = \gamma_{\rho} - \gamma_{\nu}.$$

Po prostym przekształceniu części trygonometrycznej wyrażenia (30) otrzymujemy

$$\sigma_{v_e} = 4 \sum_v \sum_e |k_v k_e| \cos \left(\frac{\alpha_v - \alpha_e}{2} + \gamma_{ev} \right) \sin \frac{\alpha_v}{2} \sin \frac{\alpha_e}{2}. \quad (31)$$

Podstawiając (28), (29) i (30) do (27) otrzymujemy wyrażenie na prawdopodobieństwo $p_{m(i)}$

$$p_{m(i)} = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \sum_{\mu} \sum_{\substack{v \\ v \neq \mu}} \sum_{\substack{e \\ e \neq \mu}} |c_v c_e| |V_{m\mu,iv} V_{m\mu,ie}| \cos \left(\frac{\Omega_{ve}}{2} t + \gamma_{ev} \right) \cdot \frac{\sin \frac{1}{2}(\omega_{mi} + \Omega_{\mu v})t}{\frac{1}{2}(\omega_{mi} + \Omega_{\mu v})} \cdot \frac{\sin \frac{1}{2}(\omega_{mi} + \Omega_{\mu e})t}{\frac{1}{2}(\omega_{mi} + \Omega_{\mu e})}. \quad (32)$$

Ponieważ założyliśmy, że oba układy A i B mają niezwyrodniałe stany energetyczne, możemy te stany przyporządkować sobie w sposób jedno-jednoznaczny. Po dokonaniu takiego przyporządkowania możemy stany energetyczne każdego układu numerować wskaźnikami zarówno łacińskimi, jak i greckimi.

Weźmy pod uwagę układ $A+B$ w chwili $t=0$. Wzór (17) możemy napisać w postaci

$$\Psi(0) = \sum_{m,\mu} c_\mu \delta_{mi} \hat{\varphi}_m \hat{\Phi}_\mu,$$

skład na mocy (24)

$$f_{m\mu}(0) = c_\mu \delta_{mi},$$

czyli

$$\begin{aligned} f_{i\mu}(0) &= c_\mu, \\ f_{m\mu}(0) &= 0 \quad m \neq i. \end{aligned} \quad (33)$$

Układ B znajdował się w chwili $t=0$ w stanie czystym określonym przez funkcję falową $\sum c_\mu \hat{\Phi}_\mu$. Gdyby nie było współdziałania z układem A , jego funkcja falowa miałaby postać

$$\sum c_\mu \hat{\Phi}_\mu(\vec{X}) e^{-\frac{i\hat{H}_B}{\hbar} t}.$$

Prawdopodobieństwo zmierzenia μ -tego stanu energetycznego byłoby wtedy równe $|c_\mu|^2$. Z wzorów (34) i (26) wynika, że

$$|c_\mu|^2 = f_{i\mu}^*(0) f_{i\mu}(0) = f_{i\mu}(t) - f_{i\mu}(t).$$

Dla $t > 0$ układ B przechodzi do stanu mieszanego. Prawdopodobieństwo znalezienia m -tego stanu energii w stanie mieszanym jest według (15) równe

$$\sum_n f_{nm}(t) f_{nm}(t).$$

Zatem przyrost prawdopodobieństwa zmierzenia m -tego stanu energii układu B na skutek współdziałania z układem A jest równy

$$(\Delta P)_m = \sum_n f_{nm}^*(t) f_{nm}(t) - |c_m|^2 = \sum_n f_{nm}^*(t) f_{nm}(t) - f_{im}^*(t) f_{im}(t), \quad (34)$$

a więc szukany przyrost jest równy

$$P_m(t) = \sum_{n \neq i} f_{nm}^*(t) f_{nm}(t). \quad (35)$$

Analogiczny rachunek jak przy obliczeniu p_m daje nam

$$(\Delta P)_m(t) = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \sum_{n \neq i} \sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq \mu}} \sum_{\substack{q \\ q \neq \mu}} |c_\nu c_q| |V_{nm, i\nu} V_{nm, iq}| \cos\left(\frac{\Omega_{\nu q}}{2} t + \gamma_{\nu q}\right) \cdot \frac{\sin \frac{1}{2}(\omega_{ni} + \Omega_{m\nu})t}{\frac{1}{2}(\omega_{ni} + \Omega_{m\nu})} \cdot \frac{\sin \frac{1}{2}(\omega_{ni} + \Omega_{mq})t}{\frac{1}{2}(\omega_{ni} + \Omega_{mq})}. \quad (36)$$

§ 5. Przypadek, gdy układ B jest makroskopowy

Dotąd oba układy wyróżniały się tylko stanem w chwili początkowej. Dla naszego zagadnienia potrzebny jest jednak taki układ B , który działa na układ A , ale sam nie doznaje na sobie, przynajmniej przez pewien czas, dostrzegalnych skutków działania układu A . Dlatego układ B przyjmujemy jako makroskopowy, to jest taki, dla którego wyniki teorii kwantowej i klasycznej są praktycznie nieodróżnialne. Dla ustalenia uwagi założymy, że układ B jest w chwili $t=0$ oscylatorem harmonicznym jednowymiarowym, jego funkcja w chwili $t=0$ przedstawia jednowymiarowy pakiet $\sum_\mu c_\mu \Phi_\mu$. Zakładamy więc według Schrödingera [3], że

$$c_\nu = \left(\frac{a^2 M \Omega}{\hbar}\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{2^\nu \nu!}} e^{-\frac{a^2 M \Omega}{4\hbar}}, \quad (37)$$

gdzie a jest amplitudą drgań pakietu (jako całości), Ω – jego częstością, M – jego masą. Gdyby układ B był izolowany, stan jego, jak wykazał Schrödinger, przedstawiałby pakiet nie rozplywający się.

Wyrażenie (37) możemy napisać w postaci

$$c_\nu = \frac{\varepsilon^{\nu/2}}{\sqrt{\nu!}} e^{-\frac{\varepsilon}{2}}, \quad (38)$$

gdzie

$$\varepsilon = \frac{\frac{1}{2} M a^2 \Omega^2}{\hbar \Omega}; \quad (39)$$

ε przedstawia stosunek energii oscylatora do odstepu poziomów energetycznych oscylatora skwantowanego.

Aby układ B można było uważać za makroskopowy, musimy założyć

$$\varepsilon \gg 1.$$

Zilustruje nam to następujący przykład: dla

$$M = 10^{-2} \text{ g}, \quad \Omega = 10^5 \frac{1}{\text{sek}},$$

otrzymamy

$$\varepsilon \approx 10^{25}.$$

Zbadajmy teraz funkcje

$$c_\nu = f(\nu) = \frac{\varepsilon^{\nu/2}}{\sqrt{\nu!}} e^{-\frac{\varepsilon}{2}}$$

oraz

$$c_\nu c_\varrho = f(\nu, \varrho) = \frac{\varepsilon^{\frac{\nu+\varrho}{2}}}{\sqrt{\nu! \varrho!}} e^{-\varepsilon}.$$

Wiadomo, że funkcja $f(\nu)$ posiada dla dużych ε maksimum dla $\nu = \varepsilon$. Aby zbadać przebieg tej funkcji w pobliżu maksimum, zastosujemy wzór Stirlinga

$$\nu! = \sqrt{2\pi\nu} \nu^\nu e^{-\nu}$$

i otrzymamy

$$f(\nu) = \frac{e^{-\frac{\varepsilon}{2}}}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{\nu}{2}(\ln\varepsilon - \ln\nu + 1)}$$

Wartość maksymalna funkcji jest równa

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Napiszmy ν jako sumę

$$\nu = \varepsilon + \delta;$$

wtedy funkcja $f(\nu)$ przyjmuje postać

$$f(\nu) = f(\varepsilon) e^{-\frac{\delta}{2} - \frac{\varepsilon+\delta}{2} \ln\left(1 + \frac{\delta}{\varepsilon}\right)}.$$

Jak długo możemy zaniedbać δ^2 wobec ε , mamy

$$f(\nu) \approx f(\varepsilon).$$

Wartości funkcji leżą wtedy w pobliżu wartości maksymalnej. Dla takich δ , dla których nie można zaniedbać δ^2 wobec ε , wartości funkcji $f(\varepsilon + \delta)$

są bardzo małe wobec wartości maksymalnej. Dla

$$v_{1,2} = \varepsilon e^{\pm \sqrt{\frac{2}{\varepsilon}}}$$

tj. dla

$$\delta = \pm \sqrt{2},$$

funkcja $f(v)$ posiada punkty przegięcia, przy czym

$$f(v_{1,2}) = \frac{1}{e} f(\varepsilon).$$

Szerokość przedziału pomiędzy punktami przegięcia jest równa

$$\Delta = \varepsilon (e^{\sqrt{\frac{2}{\varepsilon}}} - e^{-\sqrt{\frac{2}{\varepsilon}}}) = 2\sqrt{2}.$$

Funkcja $f(v, \varrho)$ osiąga maksimum dla $v = \varrho = \varepsilon$, przy czym

$$f(\varepsilon, \varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Jeżeli podobnie jak przedtem napiszemy

$$v = \varepsilon + \delta_1, \quad \varrho = \varepsilon + \delta_2,$$

to

$$f(v, \varrho) = f(\varepsilon, \varepsilon) e^{-\frac{\delta_1^2 - \varepsilon + \delta_1}{2} \ln\left(1 + \frac{\delta_1}{\varepsilon}\right)} e^{-\frac{\delta_2^2 - \varepsilon + \delta_2}{2} \ln\left(1 + \frac{\delta_2}{\varepsilon}\right)}. \quad (40)$$

Jak długo możemy zaniedbać δ_1^2 i δ_2^2 wobec ε , mamy

$$f(v, \varrho) \approx f(\varepsilon, \varepsilon).$$

Jeżeli nie możemy zaniedbać δ_1^2 i δ_2^2 wobec ε , wartości funkcji $f(v, \varrho)$ są bardzo małe wobec wartości maksymalnej. Będziemy więc aproksymować funkcję $f(v, \varrho)$ przez funkcję

$$g(v, \varrho) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad (41)$$

wewnątrz koła o środku $(\varepsilon, \varepsilon)$ i promieniu $\sqrt{2}$, poza tym

$$g(v, \varrho) = 0. \quad (42)$$

Powierzchnia obszaru, gdzie $g(v, \varrho) \neq 0$, wynosi $\Delta^2 = 2\pi$.

Przystąpimy teraz do oszacowania wyrażeń (32) i (36) na $p_{m(t)}$ oraz $(\Delta P)_m$. Z przeprowadzonej dyskusji własności funkcji c, c_0 wynika, że w przypadku makroskopowego oscylatora B pozostałe funkcje wskaźników v i ϱ oprócz c, c_0 możemy uważać za powoli zmienne, tak że funkcje te możemy zastąpić przez ich wartości dla v i ϱ równych ε . Funkcje zaś c, c_0

apreksymujemy przez $g(\nu, \rho)$. Wtedy otrzymamy z (32)

$$p_{m(i)} \approx \sqrt{2\pi} \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \sum_{\mu} |V_{m\mu,ie}|^2 \frac{\sin^2 \frac{1}{2}(\omega_{mi} + \Omega_{\mu e})t}{\frac{1}{4}(\omega_{mi} + \Omega_{\mu e})^2}. \quad (43)$$

Zwykle $|V_{m\mu,ie}|^2$ jest powoli zmienną funkcją swoich wskaźników, tak że możemy napisać

$$p_{m(i)} \approx \sqrt{2\pi} \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |V_{m_0\mu_0,ie}|^2 \sum_{\mu} \frac{\sin^2 \frac{1}{2}(\omega_{mi} + \Omega_{\mu e})t}{\frac{1}{4}(\omega_{mi} + \Omega_{\mu e})^2}, \quad (44)$$

gdzie m_0, μ_0 są pewnymi ustalonymi wartościami wskaźników m, μ .

Podobnie

$$P_m \approx \sqrt{2\pi} \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |V_{m_0\mu_0,ie}|^2 \sum_{\substack{n \\ n \neq i}} \frac{\sin^2 \frac{1}{2}(\omega_{ni} + \Omega_{ne})t}{\frac{1}{4}(\omega_{ni} + \Omega_{ne})^2}. \quad (45)$$

Sumy występujące w (44) i (45) możemy teraz przedstawić za pomocą całek

$$\begin{aligned} s &= \sum_{\mu} \frac{\sin^2 \frac{1}{2}(\omega_{mi} + \Omega_{\mu e})t}{\frac{1}{4}(\omega_{mi} + \Omega_{\mu e})^2} = \sum_{\kappa=-s}^{\infty} \frac{\sin^2 \frac{1}{2}(\omega_{mi} + \kappa\Omega)t}{\frac{1}{4}(\omega_{mi} + \kappa\Omega)^2} \approx \\ &\approx \int_{-s}^{\infty} \frac{\sin^2 \frac{1}{2}(\omega_{mi} + \Omega\xi)t}{\frac{1}{4}(\omega_{mi} + \Omega\xi)^2} d\xi = \frac{2}{\Omega} \int_{-\frac{1}{2}(\Omega\varepsilon - \omega_{mi})}^{\infty} \frac{\sin^2 ut}{u^2} du. \end{aligned} \quad (46)$$

Ponieważ układ A jest układem mikroskopowym, B zaś makroskopowym, przeto $\omega_{mi} \gg \Omega$. Pomimo to, gdy ε jest dostatecznie duże (co możemy osiągnąć biorąc oscylator B o dostatecznie dużej masie M), możemy zaniedbać ω_{mi} wobec $\varepsilon\Omega$ i zastąpić dolną granicę ostatniej całki przez $-\frac{1}{2}\Omega\varepsilon$. Aby otrzymać prawdopodobieństwo proporcjonalne do czasu, należy zastąpić dolną granicę ostatniej całki przez $-\infty$. Można to uczynić w znacznym przybliżeniu, jeżeli granica ta jest mniejsza niż pierwsze ujemne miejsce zerowe funkcji podcałkowej, a więc gdy

$$\left| -\frac{1}{2}\Omega\varepsilon \right| > \frac{\pi}{t},$$

czyli dla

$$t > \frac{2\pi}{\Omega\varepsilon}.$$

Jeżeli oznaczymy

$$t_1 = \frac{2\pi}{\Omega\varepsilon} = \frac{\hbar}{W_B},$$

gdzie W_B jest klasyczną energią oscylatora B , to dla

$$t > t_1 \quad (46')$$

możemy zastąpić dolną granicę ostatniej całki przez $-\infty$.

Wtedy

$$s = 2 \frac{\pi}{\Omega} t \quad \text{dla } t > t_1$$

oraz

$$P_{m(t)} \approx 2\sqrt{2\pi^3} \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |V_{m_0, \mu_0, i_0}|^2 \frac{t}{\Omega}.$$

Ponieważ chodzi nam tutaj tylko o rząd wielkości, zastąpimy $\sqrt{2\pi^3}$ przez 10 i otrzymamy wówczas

$$P_{m(t)} \approx 10 \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |V_{m_0, \mu_0, i_0}|^2 \frac{t}{\Omega}. \quad (47)$$

Założmy również, że układ A jest oscylatorem (ale mikroskopowym) i weźmy pod uwagę sumę

$$\begin{aligned} S &= \sum_{\substack{n \\ n \neq i}} \frac{\sin^2 \frac{1}{2}(\omega_n + \Omega_{m_2})t}{\frac{1}{4}(\omega_n + \Omega_{m_2})^2} = \sum_{\substack{l \neq i \\ l=0}}^{\infty} \frac{\sin^2 \frac{1}{2}(\omega_l + \Omega_{m_2})t}{\frac{1}{4}(\omega_l + \Omega_{m_2})^2} \approx \\ &\approx \frac{1}{\omega} \left(\int_{\frac{1}{2}(\Omega_{m_2} - \omega\epsilon)}^{\frac{1}{2}(-\frac{1}{2}\omega + \Omega_{m_2})} + \int_{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}\omega + \Omega_{m_2})}^{\infty} \right) \frac{\sin^2 ut}{u^2} < \frac{2}{\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 ut}{u^2} du = \frac{\pi}{\omega} t. \end{aligned}$$

Wtedy

$$(\Delta P)_m < 10 \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |V_{m_0, \mu_0, i_0}|^2 \frac{t}{\omega}. \quad (48)$$

Biorąc stosunek obu prawdopodobieństw widzimy, że

$$\frac{(\Delta P)_m}{P_{m(t)}} < \frac{\Omega}{\omega}. \quad (49)$$

Jeżeli układ A jest mikroskopowy, B makroskopowy, to $\omega \gg \Omega$, a przeto

$$(\Delta P)_m \ll p_{m(t)}$$

dla każdego m .

Zatem prawdopodobieństwo przejścia układu B do stanu mieszanego jest dużo mniejsze niż prawdopodobieństwo zmierzenia dla układu A innego stanu energii niż początkowy.

W przedziale czasowym, w którym

$$P_{m(t)} \ll 1,$$

jest dzięki (49) w jeszcze wyższym stopniu

$$(\Delta P)_m \ll 1. \quad (50)$$

Możemy więc uważać, że w tym przedziale czasowym układ makroskopowy B pozostaje jeszcze ciągle w stanie czystym, zadanym w chwili

początkowej i praktycznie nie zaburzonym przez układ A . Oszacujemy ten przedział czasowy.

Z (48) i (50) wynika, że

$$\frac{10\lambda^2}{\hbar^2} |V_{m_0\mu_0, i\epsilon}|^2 \frac{t}{\Omega} \ll 1,$$

a więc

$$t \ll \frac{\hbar\Omega}{10\lambda^2 |V_{m_0\mu_0, i\epsilon}|^2}.$$

Jeżeli więc obierzemy T spełniające nierówność:

$$T \ll \frac{\hbar^2\Omega}{10\lambda^2 |V_{m_0\mu_0, i\epsilon}|^2},$$

to dla

$$t_1 < t < T \quad (51)$$

można uważać, że układ B nie zmienił stanu.

Z (46') i (51) widać, że warunek stosowalności metody operatorów statystycznych

$$t_1 \ll T$$

ma w rozważanym przez nas przykładzie postać

$$|\lambda| \ll \frac{\Omega W_B}{10 |V_{m_0\mu_0, i\epsilon}|^2}$$

i może być spełniony, gdy sprzężenie układów A i B jest dostatecznie słabe.

§ 6. Konstrukcja funkcji $U(t)$

W paragrafie tym wykazemy, że zachowanie się układu A w okresie czasu (51), chociaż układ ten znajduje się pod wyraźnym wpływem układu B , może być opisane przez stan czysty, podlegający pewnemu równaniu Schrödingera. W tym celu skonstruujemy najpierw funkcję $U(t)$, o której była mowa w paragrafie 1. Ograniczymy się do chwil $t_1 < t < T$, kiedy możemy uważać, że układ makroskopowy B nie zmienił stanu i określony jest przez pakiet

$$\sum_{\mu} \frac{\epsilon^{\mu}}{V^{\mu!}} \hat{\Phi}_{\mu}(\mathbf{X}) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{W}_{\mu} t}.$$

Określamy

$$V_{\mu\nu} = \int dX \hat{\Phi}_{\mu}^* V \hat{\Phi}_{\nu},$$

oraz

$$U_\mu(t) = \lambda \sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq \mu}} c_\nu V_{\nu\mu} e^{-i\Omega_{\nu\mu}t}.$$

Funkcję $U(t)$ definiujemy jako sumę funkcyj

$$U(t) = \sum_\mu U_\mu(t) = \lambda \sum_\mu \sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq \mu}} c_\nu V_{\nu\mu} e^{-i\Omega_{\nu\mu}t}. \quad (52)$$

Zagadnienie stawiamy tu jak zazwyczaj przy obliczaniu współczynników emisji i absorpcji Einsteina, gdzie przyjmuje się „promieniowanie naturalne“. Rozważymy mianowicie równanie Schrödingera dla układu A , w którym potencjałem zaburzającym zależnym od czasu jest jeden ze składników sumy (52)

$$(H_A + U_\mu)\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t)$$

i rozwiążemy je metodą perturbacji zależnych od czasu, zakładając, że dla $t=0$ układ A znajduje się w i -tym stanie energii. Amplituda prawdopodobieństwa przejścia ze stanu i do stanu m jest równa

$$\gamma_{a(i)}^{(\mu)}(t) = \frac{i\lambda}{\hbar} \int_0^t (U_\mu)_{mi} e^{-i\omega_{mi}t} dt,$$

gdzie

$$(U_\mu)_{mi} = \lambda \sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq \mu}} c_\nu \int dx \hat{\varphi}_m^* V_{\nu\mu} \hat{\varphi}_i e^{-i\Omega_{\nu\mu}t},$$

czyli

$$(U_\mu)_{mi} = \lambda \sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq \mu}} c_\nu e^{-i\Omega_{\nu\mu}t} V_{m\mu, i\nu},$$

skąd

$$\gamma_{m(i)}^{(\mu)} = \frac{i\lambda}{\hbar} \int_0^t \sum_{\nu} c_\nu V_{m\mu, i\nu} e^{-i(\omega_{mi} + \Omega_{\nu\mu})t} dt.$$

Po scałkowaniu otrzymujemy

$$\gamma_{m(i)}^{(\mu)} = \frac{i\lambda}{\hbar} \sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq \mu}} c_\nu V_{m\mu, i\nu} \frac{1}{\omega_{mi} + \Omega_{\nu\mu}} (e^{-i(\omega_{mi} + \Omega_{\nu\mu})t} - 1).$$

Przyczynek do prawdopodobieństwa przejścia pochodzący od potencjału U_μ jest równy.

$$|\gamma_{m(i)}^{(\mu)}|^2 = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq \mu}} \sum_{\substack{\rho \\ \rho \neq \mu}} c_\nu^* c_\rho \frac{V_{m\mu, i\nu}^* V_{m\mu, i\rho}}{(\omega_{mi} + \Omega_{\nu\mu})(\omega_{mi} + \Omega_{\rho\mu})} \cdot (e^{-i\Omega_{\nu\rho}t} - e^{i(\omega_{mi} + \Omega_{\nu\mu})t} - e^{-i(\omega_{mi} + \Omega_{\rho\mu})t} + 1). \quad (53)$$

Sumując wszystkie przyczynki (53) pochodzące od wszystkich μ otrzymujemy na prawdopodobieństwo przejścia układu A ze stanu i do stanu m wyrażenie

$$\Pi_{m(i)} = \sum_{\mu} |\gamma_{m(i)}^{(\mu)}|^2 = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \sum_{\mu} \sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq \mu}} \sum_{\substack{\rho \\ \rho \neq \mu}} c_{\nu}^* c_{\rho} \frac{V_{m\mu, i\nu}^* V_{m\mu, i\rho}}{(\omega_{mi} + \Omega_{\mu\nu})(\omega_{mi} + \Omega_{\mu\rho})} \cdot (e^{-i\Omega_{\nu}t} - e^{i(\omega_{mi} + \Omega_{\mu\nu})t} - e^{-i(\omega_{mi} + \Omega_{\mu\rho})t} + 1), \quad (54)$$

przy założeniu (spełnionym dla $t_1 < t < T$ z dużym przybliżeniem), że stan układu B przedstawiony jest przez pakiet (51).

Porównując wyrażenia (32) i (54) widzimy, że

$$\Pi = \mathcal{P}_{m(i)}.$$

Zatem dla $t_1 < t < T$ prawdopodobieństwo przejścia obliczone metodą operatorów statystycznych jest równe przybliżonemu prawdopodobieństwu obliczonemu metodą perturbacji zależnych od czasu, gdzie rozpatruje się układ A jako będący w stanie czystym.

Możemy więc w przedziale (t_1, T) uważać ze znacznym przybliżeniem stan układu A jako stan czysty, którego funkcja falowa spełnia równanie Schrödingera z hamiltonianem będącym sumą wyrazu niezależnego od czasu H_A oraz zależnego od czasu $U(t)$; drugi wyraz pochodzi od działania układu makroskopowego B . Wykazanie tego było celem naszych rozważań.

Na zakończenie składam podziękowanie prof. J. Weyssenhoffowi za wskazanie zagadnienia oraz cenne dyskusje.

Katedra Fizyki Teoretycznej Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie
Otrzymano 10 czerwca 1954 r.

BIBLIOGRAFIA

- [1] F. London, E. Bauer, La théorie de l'observation en mécanique quantique, Paris 1939.
- [2] Johann Neumann, Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik, Berlin 1932.
- [3] Erwin Schrödinger, *Naturwissenschaften*, 14 Jahrg., 664 (1926).

РЕЗЮМЕ

О связи между методом статистических операторов и уравнением Шредингера для неизолированных систем

Положим, что для изолированных систем является справедливым уравнение Шредингера с независимым от времени гамильтонианом. Однако отсюда не следует, что уравнение Шредингера является правильным для систем с гамиль-

тонианом, зависящим от времени. Ибо каждую систему A с гамильтонианом зависящим от времени можно считать системой, содействующей с другой системой B и образующей с этой системой изолированную систему $A+B$, с независимым от времени гамильтонианом.

Уточняя — только изолированная система $A+B$ имеет волновую функцию, подчинённую уравнению Шредингера. Если бы мы даже предположили, что парциальная система A имеет при $t=0$ свою волновую функцию, то эта функция была бы утрачена в силу взаимодействия с системой B .

Однако, если мы положим, что:

- 1) система B может считаться „макроскопической“,
- 2) но зависящая от времени энергия взаимодействия является незначительной по сравнению с энергией каждой отдельной системы,
- 3) система A находится первоначально в одном из собственных состояний энергии,
- 4) системы A и B после разделения являются гармоничными осцилляторами

— то можем показать, что можно построить функцию времени $U(t)$ со следующим свойством:

Вставив $U(t)$ в уравнение Шредингера для системы A и вычислив (посредством метода пертурбаций зависящих от времени) правдоподобие перехода из первоначального состояния в другие состояния, мы получаем — с большим приближением — такие же результаты, какие были вычислены методом статистических операторов для содействующих систем. Это приближение справедливо в известном, поддающемся определению промежутке времени.

Итак, система A ведёт себя в этом промежутке времени так, как будто бы она имела свою волновую функцию, выполняющую уравнение Шредингера с гамильтонианом, зависящим от времени.

SUMMARY

On the Connection between the Method of Statistical Operators and the Schrödinger Equation for Non-Isolated Systems

The validity of the Schrödinger equation with time-independent hamiltonian for any isolated system is assumed. But it does not follow that the Schrödinger equation is valid for systems with time-dependent hamiltonians. Each system A with a time-dependent hamiltonian may be considered as a system interacting with another system B and forming together with B an isolated system $A+B$ with a time-independent hamiltonian. Strictly speaking only the total system $A+B$ possesses its individual wave function described by a Schrödinger equation. The partial system A though it is assumed to have at $t=0$ its individual wave function, loses it through the interaction with B .

But if we assume that:

- 1) we may consider system B as a „macroscopic“ one,
 - 2) the time independent interaction energy is small in comparison with the energies of each of the systems separately,
 - 3) system A is initially in one of its eigenstates of energy,
 - 4) systems A and B when separated are harmonical oscillators —
- then we can show that it is possible to construct a function of time $U(t)$ having the following property:

Inserting $U(t)$ into the Schrödinger equation for system A as perturbation energy and calculating (by the method of perturbations involving the time) transition probabilities from the initial energy state to other states we get in good approximation the same results as those calculated by the method of statistical operators for interacting systems. This approximation is valid at least for a certain time interval which is evaluated.

Therefore in this time interval system A behaves so as if it had an individual wave function obeying a Schrödinger equation with a time-dependent hamiltonian.