Stanisław Olszewski

Kołowa skala czasu z punktu widzenia mechaniki kwantowej w ujęciu Schrödingera

Studia Philosophiae Christianae 40/2, 57-81

2004

Artykuł został zdigitalizowany i opracowany do udostępnienia w internecie przez Muzeum Historii Polski w ramach prac podejmowanych na rzecz zapewnienia otwartego, powszechnego i trwałego dostępu do polskiego dorobku naukowego i kulturalnego. Artykuł jest umieszczony w kolekcji cyfrowej bazhum.muzhp.pl, gromadzącej zawartość polskich czasopism humanistycznych i społecznych.

Tekst jest udostępniony do wykorzystania w ramach dozwolonego użytku.

MUZEUM HISTORII POLSKI

Studia Philosophiae Christianae
UKSW
40(2004)2

STANISŁAW OLSZEWSKI
Instytut Chemii Fizycznej PAN, Warszawa

KOŁOWA SKALA CZASU Z PUNKTU WIDZENIA MECHANIKI KWANTOWEJ W UJĘCIU SCHRÖDINGERA

1. Wstęp. 2. Skale zmiennej czasowej i subiektywne podejście do nich. 3. Główne cechy rachunku zaburzeń Schrödingera. 4. Rachunek zaburzeń Schrödingera i problem biegu czasu. 5. Główne cechy rachunku zaburzeń Schrödingera. 6. Rachunek zaburzeń Schrödingera a diagramy Feynmana. 7. Rachunek zaburzeń Schrödingera przeprowadzony na podstawie kołowej skali czasu. 8. Komasacje diagramów występujących wzdłuż kołowej skali czasu. 9. Podsumowanie wyników dotyczących zastosowania kołowej skali czasu do obliczeń rachunku zaburzeń Schrödingera. 10. Zakończenie.

1. WSTĘP

Jakikolwiek postęp w badaniu zagadnienia czasu nie jest sprawą łatwą. Sam problem jest oczywiście tak dawny jak dawna jest ludzka refleksja nad bytem i jego przemijaniem. „Kiedy mnie nie pytają o to, czym jest czas – to wiem co to jest, ale kiedy mnie pytają – to nie wiem" mówi dość przekornie w swoich *Wyznaniach* św. Augustyn. Z kolei Kant twierdzi, że pojęcia czasu i przestrzeni są immanentnie wkomponowane w świadomość człowieka, są więc niejako poza zasięgiem obiektywnych badań.

W mechanice klasycznej Newtona i Lagrange'a czas jest po prostu zmienną niezależną występującą w równaniach tej mechaniki. Dopiero fizyka XIX i XX wieku umożliwiła dokonanie pewnego postępu w badaniu zjawiska czasu. Po pierwsze, mechanika statystyczna i wprowadzone do niej przez Boltzmanna pojęcie entropii pozwoliły odróżnić obiektywnie chwilę późniejszą od chwili wcześniejszej. Mianowicie, gdy układ wielu cząstek samorzutnie zmienia się w czasie, to zmienia się na ogół także jego funkcja stanu zwana entropią. Wówczas chwilą późniejszą jest ta, w której układ ma entropię większą,

chwilą wcześniejszą jest ta, w której układ ma entropię mniejszą. Innymi słowy entropia obliczona dla kolektywu cząstek pozwala ustalić kierunek tzw. strzałki, czyli biegu czasu. Z kolei drugie ważne stwierdzenie zostało dostarczone przez fizykę relatywistyczną. O ile w ujęciu tradycyjnej fizyki klasycznej czas i przestrzeń są formami niezależnymi, o tyle według fizyki relatywistycznej ulegają one wzajemnemu sprzężeniu w twór więcej niż trójwymiarowy, zwany zwykle czasoprzestrzenią. Metryka, czyli kwadrat odległości dwu punktów takiej czasoprzestrzeni, może zależeć od wielu czynników fizycznych. W warunkach ziemskich do opisu zjawisk wystarcza na ogół cztero-wymiarowa metryka dostarczona przez szczególną teorię względności, bardziej skomplikowana metryka ogólnej teorii względności jest przydatna głównie w kosmologii. Z kolei – gdy prędkość badanego obiektu jest mała – można z powodzeniem zaniechać relatywistycznego pojęcia czasoprzestrzeni, zastępując go tradycyjną, np. kartezjańską, metryką przestrzeni trójwymiarowej odseparowaną od jednowymiarowej metryki – albo po prostu zmiennej – czasu.

Celem niniejszego artykułu jest zajęcie się własnościami tej właśnie – tak uproszczonej – jednowymiarowej metryki albo po prostu zmiennej czasowej. Warto wspomnieć, że niedawno dokonano interesującego przeglądu zagadnień fizyki czasu, choć nie związanego bezpośrednio z badaniem kształtu skali czasu[1]; całkiem ostatnio omawiano także zagadnienie separacji zmiennej czasowej i zmiennych położeniowych w fizyce relatywistycznej[2].

2. SKALE ZMIENNEJ CZASOWEJ I SUBIEKTYWNE PODEJŚCIE DO NICH

Zastanówmy się nad zagadnieniem biegu czasu w pojedynczym – a więc nie zbiorczym, czyli traktowanym statystycznie – obiekcie fizycznym. Jeśli założyć, że zdolności pomiarowe (percepcyjne) obserwatora korelują z własnościami układu, to łatwo się przekonać, że czas będzie czysto subiektywnym pojęciem określanym przez te własności.

Na wstępie warto tu zauważyć, że człowiek – jako jednostka ludzka, a tym bardziej jako zbiorowość – jest w stanie dokonać bar-

---

[1] J. J. Halliwell, J. Perez-Mercader, W. H. Zurek, *Physical Origins of Time Asymmetry*, Cambridge University Press, Cambridge 1994.

[2] R. J. Cook, *Physical time and physical space in general relativity*, Americal Journal of Physics 72(2004)2, 214-219.

dzo wielu różnorodnych obserwacji dotyczących zarówno własnej osoby, jak i otaczającego świata. Ekstrapolacja tych doświadczeń jest znana: wyobrażamy sobie czas jako parametr zmieniający się od bardzo dalekiej – mówimy: nieskończonej – przeszłości do podobnie odległej, równie nieskończonej, przyszłości. Taki pogląd na zmienną czasową będę nazywał topologicznie prostoliniową skalą czasu zawartą w przedziale

$$t \in (-\infty; +\infty). \tag{1}$$

Jednakże łatwo spostrzec, że inny rodzaj skali czasu niż topologiczna prosta jest także możliwy. Weźmy mianowicie pod uwagę jako przykład atom wodoru w stanie podstawowym; zakładamy przy tym, że zdolności percepcyjne obserwatora związanego z takim układem ograniczają się jedynie do pomiaru rozkładu prawdopodobieństwa (gęstości) ładunku elektronowego oraz energii elektronu. Póki na atom nie zacznie działać jakikolwiek czynnik zaburzający, obserwator nie zauważy żadnych zmian w mierzonych przez siebie parametrach: według obecnego stanu wiedzy niezaburzony atom w stanie podstawowym nie „starzeje się", jest obiektem całkowicie niezmiennym, czyli wiecznym. Innymi słowy: pojęcie czasu dla obserwatora związanego z takim atomem przestaje istnieć. Weźmy z kolei inny przykład, mianowicie klasyczny oscylator harmoniczny, i załóżmy, że obserwator związany z oscylatorem potrafi jedynie mierzyć jego odchylenia od pewnego stałego punktu; niech będzie to na przykład punkt dla którego średnie odchylenie oscylatora wynosi zero. W toku pomiarów odchyleń oscylatora obserwator zauważy różnice w wynikach pomiarów późniejszych od wyników pomiarów wcześniejszych – będzie więc mógł wprowadzić pojęcie czasu – jednakże po zamknięciu pewnego cyklu pomiarów przeprowadzonych w interwale czasowym zwanym okresem uzyskane wyniki zaczną być bardzo bliskie wynikom poprzednim: innymi słowy, nastąpi powtórzenie cyklu pomiarów. Ponieważ żaden parametr fizyczny charakteryzujący pomiary wychyleń oscylatora nie odróżnia jednego cyklu pomiarów od drugiego – ta sama własność powtarzalności pomiarów powinna dotyczyć punktów czasowych, w których pomiary wychyleń następują. Implikuje to od razu topologicznie kołową skalę czasu,

$$t \in \text{topologiczne koło}, \tag{2}$$

gdyż tylko na takiej skali może wystąpić automatycznie wspomniana powtarzalność zdarzeń.

Warto zauważyć, że szczegółowe własności kołowej skali czasu zależą od subiektywnych zdolności pomiarowych obserwatora. Wspomniany wyżej oscylator harmoniczny to nic innego jak rzut punktu, będącego końcem wahadła, skierowany na płaszczyznę prostopadłą do linii prostej położenia wahadła w wychyleniu zerowym. Wahadło nie zmienia swej płaszczyzny wahań, nie zmienia się więc też oscylator. Jednakże – jak to miało miejsce w słynnym doświadczeniu w Panteonie paryskim w wieku XIX – obserwator punktu końcowego wahadła może, na przykład, rejestrować także zmiany położenia oscylatora związane z dobowym ruchem Ziemi wokół jej osi. Informacje dostarczone przez tą dodatkową zdolność obserwacyjną pozwalają odróżnić czas jednego okresu wahnięcia od drugiego, a cykl zdarzeń dotyczący wahnięć wahadła rejestrującego dobowy ruch Ziemi powtórzy się dopiero po upływie doby. A więc dla obserwatora rejestrującego dodatkowo ruch Ziemi względem osi, skala czasu – pozostając kołową – zwiększy się w stosunku do skali czasu obserwatora rejestrującego jedynie wychylenia wahadła. Podobne zastąpienie uboższej kołowej skali czasu wzbogaconą skalą kołową można uzyskać, zastępując obserwatora związanego np. z nieruchomą ekliptyką planety obserwatorem, który – obok rejestracji położeń planety na ekliptyce – potrafi jednocześnie rejestrować precesję tej ekliptyki. Po wielu obiegach planety precesja może doprowadzić ekliptykę do praktycznie jej pierwotnego położenia. Powyższe przykłady pokazują jak zdolności obserwacyjne mogą wpłynąć na rodzaj skali czasu. Można wynik ten ekstrapolować wyobrażając sobie Istotę, której zdolności obserwacyjne będą większe niż zdolności obserwacyjne człowieka, czy nawet całej ludzkości: skala czasu tej Istoty będzie w sposób oczywisty inna niż skala czasu uzyskana przez podmiot, czy zespół podmiotów, wyposażony w ludzkie zdolności obserwacyjne.

Powstaje w rezultacie dosyć zasadnicze pytanie: czy fizyka prostych układów jest w stanie dostarczyć argumenty pozwalające optować za określoną skalą czasu, np. za skalą (1), bądź skalą (2)? Odpowiedź jest tu twierdząca: mechanika kwantowa pojedynczego układu, a właściwie jej formalizm zaburzeń, pozwala wyraźnie wskazać jako bardziej „naturalną" skalę (2). Przemawia tu głównie argument wygody – lub prostoty – opisu przejścia niezdegenerowa-

nego układu kwantowo-mechanicznego ze stacjonarnego stanu niezaburzonego do podobnego stanu zaburzonego: wydarzenia towarzyszące takiemu przejściu jest o wiele dogodniej opisać w zmiennej czasowej charakterystycznej dla kołowej skali czasu (2), niż zmienną przebiegającą wzdłuż prostoliniowej skali (1). Pozostałe rozdziały niniejszego artykułu mają na celu uzasadnienie tej tezy. Warto tu zauważyć, że pewne – zresztą bardzo oględne – próby wprowadzenia kołowej (zamkniętej) skali czasu w fizyce były czynione już wcześniej[3].

3. GŁÓWNE CECHY RACHUNKU ZABURZEŃ SCHRÖDINGERA

W roku 1926 Erwin Schrödinger opublikował w czasopiśmie *Annalen der Physik* w cyklu czterech prac pod wspólnym tytułem *Kwantyzacja jako zagadnienie własne* swoje słynne równanie falowe[4]. Przypomnijmy, że rozwiązanie równania stanowi nieskończony – na ogół – zespół funkcji własnych, znanych obecnie powszechnie w fizyce jako funkcje falowe Schrödingera. Funkcjom własnym towarzyszy odpowiedni zespół wartości własnych będących energiami układu opisanego równaniem Schrödingera.

Dobrze wiadomo, że każdy nierelatywistyczny układ klasyczny cząstek, którego hamiltonian jest stały w czasie, ma swój kwantowy odpowiednik. Opis kwantowy stanowi charakterystyczny zespół funkcji własnych (f. w.) i energii własnych (e. w.) układu. Jednocześnie stało się oczywiste, że stopień łatwości, z którą otrzymuje się poszczególne f. w. oraz e. w. zależy bardzo istotnie od rodzaju rozpatrywanego układu. Praktycznie istnieje zaledwie kilka prostych modeli układów, dla których zespół f. w. oraz e. w. jest matematycznie łatwo dostępny. Jedynym realnym układem, którego uproszczony model pozwala stosunkowo łatwo obliczyć przybliżone postacie f. w. oraz podobne wartości e. w., jest elektron w polu ją-

---

[3] L. V. Keldysh, *Diagram technique for non-equilibrium process*, Soviet Physics JETP 20(1965), 1018-1030 [Zhur. Eksper. Teoret. Fiziki (USSR) 47(1964), 1515-1527]; J. Schwinger, *Brownian motion of a quantum oscillator*, Journal of Mathematical Physics 2(1961), 407-432; K. Szymanzik, *On the many-particle structure of Green's functions in quantum field theory*, Journal of Mathematical Physics 1(1960), 249-273.

[4] E. Schrödinger, Quantisierung als Eigenwertproblem, I, II, III, IV, Annalen der Physik 79(1926), 361-376; 79(1926), 489-527; 80(1926), 437-490; 81(1926), 109-139. Zob. także: E. C. Kemble, *Fundamental principles of quantum mechanics*, McGraw Hill, New York 1937; L. I. Schiff, *Mechanika kwantowa*, tłum. z ang. Zofia Rek, Zbigniew Rek, PWN, Warszawa 1987; I. Białynicki-Birula, M. Cieplak, J. Kamiński, *Teoria kwantów*, PWN, Warszawa 1991.

dra atomu wodoru (lub atomu wodoropodobnego). Każdy inny układ fizyczny wymaga niewspółmiernie większego nakładu obliczeń niż ten układ. Dobrze znanymi – bo stosunkowo prostymi – przykładami stanów nieco bardziej skomplikowanych niż w atomie wodoru są stany elektronowe atomu helu lub drobiny wodoru. Określenie z dobrą dokładnością f. w. oraz e. w. dla stanów elektronowych większych atomów lub większych drobin wymagało – i wymaga współcześnie nadal – zaangażowania bardzo poważnych środków obliczeniowych. Stało się dość szybko jasne, że uzyskanie informacji o f. w. oraz e. w. dla przytłaczającej liczby układów występujących w przyrodzie może nastąpić jedynie w sposób mniej lub bardziej przybliżony.

Schrödinger zdawał sobie niewątpliwie sprawę z bardzo ograniczonego zakresu zagadnień, dla których rozwiązanie jego równania jest praktycznie możliwe. Aby zakres ten poszerzyć zaproponował (w trzeciej pracy cyklu *Annalen der* Physik[5]) postępowanie, które pozwala uzyskać odpowiedzi na e. w. oraz f. w. dla jednego układu – nazwijmy go *nowym* – wychodząc ze znanych e. w. oraz f. w. dla innego – *starego* – układu. Warunkiem poprawności takiego postępowania – dobrze znanego pod nazwą rachunku zaburzeń[6] – jest, aby układ nowy (zaburzony) niewiele różnił się od układu starego (niezaburzonego). A więc zachowana jest z reguły liczba cząstek układu, natomiast zmienione jest – na ogół niewiele – pole sił działających na cząstki w tym układzie. Klasycznymi przykładami zaburzenia są np. zmiany pola w atomie wodoru przez dodanie zewnętrznego, raczej słabego, pola elektrycznego (efekt Starka), lub dodanie zewnętrznego pola magnetycznego (efekt Zeemana). Warto dodać, że wcześniejsza niż Schrödingera, lecz podobna do niej, wersja rachunku zaburzeń była zastosowana w fizyce klasycznej przez Rayleigha[7] do przypadku obliczeń fal akustycznych.

Obecnie rachunek zaburzeń Schrödingera jest podręcznikową metodą uzyskiwania przybliżonych rozwiązań na f. w. oraz e. w. układu nieco bardziej złożonego ze znanych rozwiązań otrzyma-

---

[5] E. Schrödinger, art. cyt., III, Annalen der Physik 80(1926), 437-490.

[6] E. C. Kemble, dz. cyt., L. I. Schiff, dz. cyt., I. Białynicki-Birula, M. Cieplak, J. Kamiński, dz. cyt.

[7] J. W. S. Rayleigh, *The theory of sound*, MacMillan, London 1877 (przedruk w Dover Publications, New York 1945), vol. 1, 109.

nych dla układu mniej złożonego. Warto tu wspomnieć o innych, niejako konkurencyjnych metodach, które osiągają wspomniany cel przybliżonych rozwiązań dla bardziej skomplikowanych układów na drogach odmiennych niż ta, która została podana przez Schrödingera[8]. Niemniej, rachunek zaburzeń pozostaje nadal standartową i stosunkowo powszechnie używaną metodą obliczeniową teoretycznej fizyki kwantowej. Istnieje przy tym istotny – także z punktu widzenia dalszych rozważań tego artykułu – podział metody rachunku zaburzeń Schrödingera na dwa podstawowe zakresy. Pierwszy zakres obejmuje sytuację, gdy wyjściowy stan układu podlegający zaburzeniu jest niezdegenerowany: mówimy wówczas, że w stanie, który ma być zaburzony, czyli w stanie *początkowym* lub *wyjściowym*, jednej e. w. odpowiada tylko jedna f. w. Druga sytuacja odpowiada degeneracji stanu początkowego (wyjściowego): wówczas jednej e. w. odpowiada więcej niż jedna f. w. Niniejszy artykuł obejmuje rachunek zaburzeń Schrödingera jedynie dla sytuacji odpowiadających wyjściowym stanom niezdegenerowanym.

4. RACHUNEK ZABURZEŃ SCHRÖDINGERA I PROBLEM BIEGU CZASU

Warto tu stwierdzić od razu, że pojęcie czasu nie jest konieczne do przeprowadzenia rachunku zaburzeń. Stany własne układu, opisane przez znane f. w. Schrödingera, są na ogół stanami niezależnymi od czasu; zmienna czasu występuje jedynie w czynniku modulującym f. w. Czynnik ten ma charakter fali harmonicznej w czasie, przy czym częstość tej fali jest proporcjonalna do e. w. uzyskanej dla danego stanu. Przy obliczaniu wielkości fizycznych, czyli tzw. średnich z obserwabli dynamicznych układu, z reguły bierzemy iloczyn f. w. przez jej wielkość zespoloną sprzężoną. Ponieważ przyjmujemy, że operatory obserwabli – zarówno w układzie niezaburzonym, jak i zaburzonym – nie zależą od czasu, czynniki zależne od czasu występujące w f. w. oraz jej wielkości zespolonej sprzężonej wykasowują się i w rezultacie w konkretnych obliczeniach wartości średnich dla obserwabli bierze udział tylko ta część f. w., która jest niezależna od czasu. Dlatego ogólnie przyjęło się mówić o stanach opisanych przez f. w. Schrödingera jako o stanach stacjonarnych układu. Następnie pokazuje się, że przeprowadzenie procedu-

[8] Zob. np. J. P. Killingbeck, *Techniques of applied quantum mechanics*, Butterworths, London 1975.

ry zaburzeń Schrödingera wymaga uwzględnienia jedynie tych części f. w., które są niezależne od czasu. Czy zatem wprowadzenie pojęcia czasu do rachunku zaburzeń dla stanów stacjonarnych nie jest jedynie zbędną komplikacją?

Moim zdaniem tak nie jest, gdyż – po pierwsze – pomiędzy chwilą włączenia zaburzenia do układu a chwilą uzyskania nowego, czyli zaburzonego, stanu stacjonarnego przez ten układ, musi upłynąć pewien (bliżej niesprecyzowany) przedział czasowy. Powstaje zatem dość naturalne pytanie: jak ewoluuje zmienna czasowa w tym przedziale? Po drugie – okazuje się, że pojęcie czasu i jego skala mogą wprowadzić ład w doborze i pomoc w uzyskiwaniu poszczególnych składników występujących we wzorach rachunku zaburzeń.

Pierwszym, który zwrócił uwagę na porządkującą rolę czasu w mechanice kwantowej, był Feynman[9]. Feynman uzyskał swoje wyniki na podstawie topologicznie prostoliniowej skali czasu. Oznaczało to numerację zdarzeń na skali czasu od pewnej chwili początkowej, będącej jakimś punktem czasowym położonym na skali stosunkowo najbliżej minus nieskończoności, aż do pewnej chwili końcowej, będącej punktem czasowym położonym stosunkowo najbliżej plus nieskończoności. Cały zespół zdarzeń rozciągał się wzdłuż skali czasu pomiędzy tymi dwoma punktami[10]. W następnym rozdziale przypomnę rolę idei Feynmana w uzyskiwaniu składników energii zaburzenia otrzymanej według formalizmu Schrödingera. Jednakże celem niniejszego artykułu jest zwrócenie uwagi, iż można wprowadzić także inny rodzaj biegu czasu do rachunku zaburzeń; opis ten umożliwia prześledzenie „wędrówki" układu od stacjonarnego stanu niezaburzonego do stacjonarnego stanu zaburzonego w inny sposób niż podyktowany prostoliniową skalą czasu Feynmana. Ten alternatywny opis wędrówki układu jest oparty o topologicznie kołową skalę czasu. Okazuje się, że skala ta jest o wiele bardziej przydatna do obliczeń energii zaburzenia stanów mechaniki kwantowej Schrödingera niż prostoliniowa skala czasu zastosowana przez Feynmana.

---

[9] R. P. Feynman, *The theory of positrons*, Physical Review 76 (1949), 749-759.

[10] N. H. March, W. H. Young, S. Sampanthar, *The many-body problem in quantum mechanics*, Cambridge University Press, Cambridge 1967; S. Raimes, *Many-electron theory*, North Holland, Amsterdam 1972; R. D. Mattuck, *A guide to Feynman diagrams in the many-body problem*, McGraw Hill, New York 1967.

5. GŁÓWNE CECHY RACHUNKU ZABURZEŃ SCHRÖDINGERA

Ograniczymy nasze rozważania do zaburzenia stanu niezdegenerowanego układu oraz do obliczenia energii zaburzenia tego stanu. Szukamy zaburzenia energii E_n niezaburzonego stanu własnego

$$\psi_n(\vec{r}, t) = e^{-iE_n t} u_n(\vec{r}), \tag{3}$$

w którym E_n oraz u_n spełnia równanie Schrödingera niezależne od czasu

$$\hat{H}_0 u_n(\vec{r}) = E_n u_n(\vec{r}), \tag{3a}$$

mamy bowiem operator energii $\hat{H}_0$ niezależny od czasu; stałą Plancka $\hbar$ położyliśmy dla uproszczenia równą 1. Dodatkowo zauważmy, że zależności (3) oraz (3a) są spełnione dla nieskończonej liczby stanów własnych, a więc także dla stanów różnych od n.

W układzie zaburzonym $\hat{H}_0$ przechodzi w operator $\hat{H} = \hat{H}_0 + V^{per}$ gdzie V^{per} jest potencjałem zaburzenia. Odpowiednio, E_n zmienia się o energię zaburzenia ΔE, tak więc energią stanu zaburzonego jest

$$E_n^{per} = E_n + \Delta E. \tag{4}$$

Wielkość ΔE jest na ogół nieskończoną sumą składników, związanych z V^{per} oraz energiami własnymi stanów niezaburzonych układu; o potencjale V^{per} zakładamy, że jest zależny jedynie od zmiennej położenia $\vec{r}$ cząstki: układ rozpatrywany jest więc – dla prostoty – układem jednej cząstki będącej w polu sił zewnętrznych niezależnych od czasu. Składniki wchodzące do ΔE można poklasyfikować, wyróżniając ich poszczególne rzędy N:

$$\Delta E = \sum_{N=1}^{\infty} \Delta E^{(N)}. \tag{5}$$

Rzędy N odpowiadają więc poszczególnym stopniom przybliżenia energii ΔE uwzględnianym w procesie rachunku zaburzeń.

Wycałkujmy po czasie i przestrzeni element macierzowy potencjału zaburzenia V^{per} występujący pomiędzy dwoma niezaburzonymi stanami $\psi_p(\vec{r}, t)$ oraz $\psi_q(\vec{r}, t)$. Stany te mają postać analogiczną do

(3), przy czym – zgodnie z (3a) – E_p, E_q są to e. w. stanów niezaburzonych, zaś $u_p(\vec{r})$, $u_q(\vec{r})$ są to f. w. niezaburzonego równania Schrödingera (3a) wziętego dla stanów p, q zamiast stanu n. Opuszczając dolną granicę całkowania po dt, otrzymamy następującą postać na szukany element macierzowy:

$$\int^{t} dt \int d\vec{r}\, e^{iE_p t} u_p^*(\vec{r})\, V^{per} e^{-iE_q t} u_q(\vec{r}) \equiv$$

$$\equiv \langle p | V^{per} | q \rangle \frac{e^{i(E_p - E_q)t}}{i(E_p - E_q)}, \tag{6}$$

gdzie

$$\langle p | V^{per} | q \rangle = \int u_p^*(\vec{r}) V^{per} u_q(\vec{r})\, d\vec{r} \equiv U_{pq}. \tag{6a}$$

Całkowanie po $d\vec{r}$ rozpościera się na całą przestrzeń wektora $\vec{r}$.

Cechą charakterystyczną członów N-go rzędu rachunku zaburzeń, czyli członów wchodzących w skład $\Delta E^{(N)}$ jest to, że każdy z nich jest iloczynem N członów typu (6a) oraz N-1 członów typu

$$(E_p - E_q)^{-1} \tag{6b}$$

przy czym w (6b) z reguły $p = n$, lecz $q \neq p$. Obecny w (6) czynnik eksponencjalny zależny od t nie występuje w składnikach energii zaburzenia $\Delta E^{(N)}$ dla dowolnego N; podobnie nie występuje w tych składnikach czynnik równy liczbie urojonej i, ani jego potęgi. Natomiast ogólną cechą takiego składnika dla $N > 1$ jest to, że podlega on z kolei jednokrotnemu, lub wielokrotnemu, sumowaniu po występujących w nim wskaźnikach typu q spełniających relację $q \neq n$; często występują też iloczyny takich sumowań[11]. Sumowania obejmują na ogół nieskończony zbiór stanów własnych typu q.

Podstawową trudnością obliczenia członu $\Delta E^{(N)}$, gdy N jest dużą liczbą, stanowi występowanie bardzo różnych zespołów elementów macierzowych (6a) oraz wyrazów $(E_p - E_q)^{-1}$ dla każdego ze składników tworzących $\Delta E^{(N)}$. Maksymalna liczba wskaźników q dopuszczonych w takim składniku – zwanym dalej członem Schrödingera

[11] E. C. Kemble, dz. cyt., L. I. Schiff, dz. cyt., I. Białynicki-Birula, M. Cieplak, J. Kamiński, dz. cyt.

– wynosi $N-1$. Z kolei liczba składników (członów Schrödingera), które tworzą określony człon $\Delta E^{(N)}$ jest określona wzorem[12]:

$$S_N = \frac{(2N-2)!}{N!(N-1)!}. \tag{7}$$

Dla dużych N wynik (7) wskazuje na bardzo duży zbiór – zwykle bardzo skomplikowanych – członów Schrödingera, które należy uwzględnić przy obliczaniu $\Delta E^{(N)}$; patrz Tabela 1.

6. RACHUNEK ZABURZEŃ SCHRÖDINGERA A DIAGRAMY FEYNMANA

Próby przejrzystego przedstawienia tych zwykle bardzo skomplikowanych wyrażeń, które wchodzą w skład $\Delta E^{(N)}$ dla $N \gg 1$, można dokonać posługując się topologicznie prostoliniową skalą czasu Feynmana. Graficznie idea opisu jest bardzo prosta[13]. Celem obliczenia $\Delta E^{(N)}$ rysujemy N punktów czasowych na prostoliniowej skali i łączymy te punkty nie przecinającymi się krzywymi tak, aby do każdego punktu czasowego wchodziła i z każdego punktu wychodziła jedna krzywa; przykładowym rysunkiem dla $N = 5$ jest Rys. 1. Liczba uzyskanych w ten sposób połączeń, albo kombinacji linii reprezentujących cząstkę-dziurę, wynosi

$$P_N = (N-1)! \tag{8}$$

Liczba P_N odpowiada różnym kombinacjom linii reprezentujących bądź cząstkę, bądź dziurę, wchodzących do punktów czasowych położonych pomiędzy chwilą t_1 oraz chwilą t_N. Na Rys. 2 pokazujemy przykładowo $(N-1)! = 24$ diagramy Feynmana dla $N = 5$; odpowiadające im kombinacje linii cząstka-dziura przedstawia Tabela 2. Jednakże – zgodnie z regułami podanymi w pracy R. D. Mattucka[14] – jedynie te diagramy, gdzie linia czasowa tylko raz może przeciąć linię cząstki i raz przeciąć linię dziury, wnoszą wkład do energii równy pełnemu członowi Schrödingera wchodzącemu do $\Delta E^{(N)}$. Takimi diagramami (w wypadku $N=5$) są jednopalczaste diagramy I-VIII pokazane na Rys. 2: reprezentują one 8 członów

[12] R. Huby, *Formulae for non-degenerate Rayleigh-Schrödinger perturbation theory in any order*, Proceedings of the Physical Society (London) 78(1961), 529-536.

[13] Patrz np. R. D. Mattuck, dz. cyt.

[14] Tamże.

Schrödingera spośród $S_5 = 14$ członów wchodzących do $\Delta E^{(5)}$ zgodnie ze wzorem (7). W pozostałych diagramach Feynmana, które są dwu- i więcej-palczaste, może wystąpić sytuacja, gdy linia czasowa może przeciąć więcej niż jeden raz linię cząstki i więcej niż jeden raz linię dziury. Wówczas każdy z diagramów IX-XXIV przedstawionych na Rys. 2 może dawać jedynie pewien ułamek przyczynku wnoszonego przez określony człon Schrödingera wchodzący do $\Delta E^{(5)}$. Dla $N = 5$ sytuacja ta wymaga skombinowania przyczynków pochodzących od 24-8 = 16 diagramów Feynmana w $S_5 - 8 = 14 - 8 = 6$ członów Schrödingera wchodzących w skład $\Delta E^{(5)}$. Pełny zestaw członów Schrödingera dla $N = 5$ podaje Tabela 3; skombinowanie przyczynków pochodzących od diagramów Feynmana w człony Schrödingera pokazuje Tabela 4.

Operacja kombinowania przyczynków pochodzących od diagramów Feynmana w człony Schrödingera jest niezbyt uciążliwa dla małych N, jednakże staje się ona dramatycznie skomplikowana już dla N niewiele przekraczających 10. Na przykład w wypadku $N = 20$ liczba jednopalczastych diagramów Feynmana wynosi[15]

$$\sum_{i=0}^{N-2} \binom{N-2}{i} \Bigg|_{N=20} = 2^{N-2} \Big|_{N=20} = 2^{18} = 262144. \tag{9}$$

Tymczasem – na podstawie (8) – mamy wynik

$$P_{20} = (20-1)! \approx 1.216 \times 10^{17}, \tag{10}$$

czyli że liczba (9) jednopalczastych diagramów Feynmana stanowi zaledwie znikomy ułamek całkowitej liczby tych diagramów dla $N = 20$. A więc dokładnie

$$S_{20} - 2^{18} = 1\,767\,001\,046 \tag{11}$$

składników Schrödingera wchodzących do S_{20} musi być opisane przy pomocy dwu- i więcej-palczastych diagramów Feynmana. Liczba tych diagramów jest bliska podanej w (10), z uwagi na znikomy

[15] V. Bryant, *Aspekty kombinatoryki*, tłum. z ang. Z. Palka, Wyd. Nauk.-Tech., Warszawa 1997.

wkład (9) do całkowitej liczby diagramów Feynmana. W rezulatcie dzieląc (10) przez (11) otrzymujemy zadanie skombinowania przyczynków pochodzących średnio od

$$\frac{1.216 \times 10^{17}}{1.767 \times 10^{9}} \approx 0.7 \times 10^{8} \tag{12}$$

diagramów Feynmana w każdy z członów Schrödingera, które – w liczbie podanej w (11) – wchodzą do $\Delta E^{(20)}$. Zadanie to może być uciążliwe nawet przy użyciu nowoczesnych środków obliczeniowych.

7. RACHUNEK ZABURZEŃ SCHRÖDINGERA PRZEPROWADZONY NA PODSTAWIE KOŁOWEJ SKALI CZASU

O wiele prostszy i wygodniejszy jest wywód członów Schrödingera wchodzących w skład $\Delta E^{(N)}$ na podstawie topologicznie kołowej skali czasu[16]. Wydarzenia na tej skali – będące zderzeniami układu z potencjałem zaburzenia V^{per} – układają się wzdłuż obwodu koła: układ, będący pierwotnie w stanie n (odpowiadającym jakiemuś punktowi obwodu koła, który nazwiemy punktem początkowym), przechodzi po zderzeniu z V^{per} do innego punktu (stanu) p na kole, po dalszym zderzeniu – z punktu p układ przechodzi do punktu (stanu) q będącym na obwodzie koła poza punktem p, z kolei z punktu q do jeszcze dalej położonego na obwodzie (w stosunku do początkowego punktu n) punktu (stanu) r, itd. Ostatnie zderzenie z V^{per} odpowiada przejściu z najdalej położonego względem początku drogi punktu (stanu) z z powrotem do punktu (stanu) początkowego n. Wówczas obwód zdarzeń zostaje zamknięty i układ rozpoczyna ponownie wędrówkę z punktu n po kole, przy czym zespół stanów, po których układ przebiega wzdłuż obwodu jest za każdym obiegiem inny. Liczba punktów wyróżnionych na obwodzie – równa liczbie rozpatrywanych interwałów czasowych – wskazuje na rząd rachunku zaburzeń Schrödingera do którego należy dany diagram. I tak w wypadku jednego punktu będącego jednocześnie punktem początkowym i końcowym obiegu mamy diagram pierw-

[16] S. Olszewski, *Time scale and its application in perturbation theory*, Zeitschrift für Naturforschung 46A (1991)4, 313-320; S. Olszewski, T. Kwiatkowski, *A topological approach to evaluation of non-degenerate Schrödinger perturbation energy based on a circular scale of time*, Computers in Chemistry 22(1998) 6, 445-461.

szego rzędu ($N = 1$) rachunku zaburzeń; w wypadku dwu punktów (jeden z nich jest punktem początkowym-końcowym, drugi jest punktem pośrednim) mamy diagram drugiego rzędu ($N = 2$) rachunku zaburzeń Schrödingera; w wypadku trzech punktów (pierwszy punkt jest początkowo-końcowy, drugi i trzeci są punktami pośrednimi) mamy diagram trzeciego rzędu ($N = 3$) rachunku zaburzeń Schrödingera, itd. W ten bardzo prosty sposób uzyskujemy po jednym diagramie dla każdego rzędu N rachunku zaburzeń Schrödingera; patrz Rys. 3.

Wyrażenie na energię zaburzenia odpowiadające każdemu z tych diagramów uzyskać można według następującej reguły: za każdym przejściem pomiędzy dwoma stanami, np. pomiędzy p oraz q, całkujemy potencjał zaburzenia V^{per} po zmiennej położeniowej $\vec{r}$ pomiędzy funkcjami własnymi u_p oraz u_q: w wyniku całkowania otrzymujemy element macierzowy typu (6a); wchodzi on do licznika członu Schrödingera będącego składnikiem $\Delta E^{(N)}$. Natomiast do mianownika członu Schrödingera wchodzą wyrażenia uzyskane z całkowania po czasie. Odbywa się ono w ten sposób, że przeprowadzamy najpierw całkowanie (6) po zmiennej czasowej $t = t_1$, a więc pomiędzy stanem początkowym n i np. stanem p; z kolei wynik tego całkowania podstawiamy do całkowania po zmiennej czasowej $t = t_2$ pomiędzy stanami p oraz q, zamieniając t_1 na t_2; dalej wynik całkowania po t_2 podstawiamy – po zamianie t_2 na t_3 – do całkowania po zmiennej czasowej $t = t_3$, itd. Otrzymujemy mianownik członu Schrödingera złożony z iloczynów energii stanów pośrednich odjętych – w każdym z czynników – od energii stanu n. Całość przyczynku do energii zaburzenia, dana przez diagram pokazany na Rys. 3d, ma postać:

$$\frac{\overbrace{U_{np}\,U_{pq}\,U_{qr}\ldots U_{zn}}^{\swarrow\ N\ \text{czynników}}}{\underbrace{(E_n-E_p)\,(E_n-E_q)\,(E_n-E_r)\ldots(E_n-E_z)}_{\nwarrow\ N\text{-}1\ \text{czynników}}}\,. \tag{13}$$

Znaki sumowania po wskaźnikach $p, q, r,\ldots$ różnych od n zostały opuszczone; mogą być one zastąpione przez konwencję sumowania po powtarzających się blisko siebie wskaźnikach.

Jednakże wzór (13) – oraz diagram Rys. 3d – przedstawiają zaledwie jeden człon Schrödingera rzędu N. Aby uzyskać pozostałe człony, występujące dla danego N, należy posłużyć się następującą prostą regułą topologiczną dotyczącą diagramu podanego na Rys. 3d: należy dokonać wszystkich możliwych kontrakcji punktów występujących na diagramie Rys. 3d tak, aby linie łączące te punkty nie przecinały się, natomiast kilka linii może schodzić się (łączyć się) w jednym punkcie diagramu; jednocześnie punkt diagramu Rys. 3d odpowiadający stanowi początkowemu-końcowemu n jest wyłączony z operacji kontrakcji, to znaczy ze zbioru punktów, w których może następować łączenie punktów diagramu. Przykłady kontrakcji dozwolonych pokazuje Rys. 4, niedozwolone kontrakcje są pokazane przykładowo na Rys. 5.

Okazuje się, że reguła kontrakcji uwzględnia dokładnie wszystkie S_N członów Schrödingera występujące w danym rzędzie N rachunku zaburzeń. Jednakże przy operacji kontrakcji należy wyczerpać wszystkie dozwolone kontrakcje diagramów, a więc uwzględnić także dozwolone kontrakcje diagramów uzyskanych z kontrakcji wcześniejszych. Uzyskujemy w ten sposób diagramy złożone z kół (pętli) czasowych ustawionych w pewnej hierarchii, bowiem z każdej pętli na diagramie posiadającej N' punktów – przy czym $N > N' > 2$ – można wykreować dalsze pętle boczne. Przy obliczeniach przyczynków do energii pochodzących od pętli bocznych istotne jest założenie, że punkt początkowy-końcowy każdej pętli uznaje się za punkt n, niezależnie od jego pierwotnego symbolu. Wynik uzyskany dla pętli wchodzi jako czynnik do danego członu Schrödingera tworzącego energię zaburzenia $\Delta E^{(N)}$. Jako przykład przedstawiamy komplet diagramów związanych z $\Delta E^{(5)}$ (piąty rząd rachunku zaburzeń); Rys. 6.

Znak, z którym występuje człon Schrödingera w danym $\Delta E^{(N)}$ jest określany hierarchią pętli występujących w diagramie. I tak: obecność jednej pętli dodatkowej (występującej poza pętlą Rys. 3d, zwaną pętlą główną) odpowiada znakowi minus przed członem Schrödingera reprezentowanym przez ten diagram, natomiast jeśli pętle są dwie, wówczas znak członu Schrödingera jest dodatni. Ostatecznie znak członu dla liczby pętli l występujących w diagramie – łącznie z pętlą główną – podaje reguła:

$$(-1)^{l+1}. \tag{14}$$

8. KOMASACJE DIAGRAMÓW WYSTĘPUJĄCYCH WZDŁUŻ KOŁOWEJ SKALI CZASU

Sposób uzyskania liczby S_N diagramów odpowiadających jednoznacznie S_N członom Schrödingera składającym się na energię zaburzenia $\Delta E^{(N)}$ wskazuje, że przeprowadzenie obliczeń dla wszystkich członów S_N z osobna nie jest konieczne. Można bowiem nie przeprowadzać kontrakcji punktów czasowych na pętli bocznej mającej $N' > 2$ punktów, lecz wziąć od razu pod uwagę przyczynek $\Delta E^{(N)}$ pochodzący od całej pętli. Odpowiada to skombinowaniu S_N członów Schrödingera występujących dla pewnego N w jeden człon mający mnożnik $\Delta E^{(N)}$. Zaleta komasacji członów Schrödingera wynika z niezależności pętli bocznych względem pętli głównej. Każda bowiem pętla boczna wyprowadzona dla rzędu N może być traktowana jako pętla główna odpowiadająca rzędowi zaburzeń

$$N' < N. \tag{15}$$

I tak jedyna pętla boczna występująca dla $N = 3$ (Rys. 4a) odpowiada pętli głównej dla

$$N' = 1, \tag{15a}$$

z kolei dla $N = 4$ pętla boczna posiadająca maksymalną liczbę punktów 2 odpowiada pętli głównej

$$N' = 2, \tag{15b}$$

dla $N = 5$ maksymalna liczba punktów, które mogą wystąpić na pętli bocznej, wynosi

$$N' = 3, \tag{15c}$$

itd. W wypadku (15a) i (15b) pętle boczne nie mogą ulegać kontrakcjom, jednakże możliwość taka istnieje w wypadku pętli (15c): może ona ulec kontrakcji dając diagram z pętlą boczną względem (15c). Wspomniana pętla odpowiada

$$N'' = 1, \tag{15d}$$

zgodnie z wynikiem (15a).

A zatem kontrakcja punktów czasowych 1 oraz 4, oznaczona jako 1:4, przeprowadzona dla $N = 5$ (Rys. 6) implikuje od razu powstanie dwu diagramów charakterystycznych dla $N' = 3$; jednego pozbawionego kontrakcji 2:3 (diagram III $^{T}_{s}$), drugiego posiadającego tę kontrakcję (diagram XIII $^{T}_{s}$). Innymi słowy, diagram III $^{T}_{s}$ powoduje konieczność uwzględnienia także diagramu XIII $^{T}_{s}$. Cecha ta dla dużych N redukuje w znaczny sposób liczbę diagramów, dla których trzeba przeprowadzić z osobna obliczenia członów Schrödingera. Szczegółowa analiza kombinatoryczna – ważna zwłaszcza dla $N \gg 1$ – wykracza poza zakres niniejszego artykułu. Istotnym wynikiem tej analizy jest, że – po zredukowaniu liczby diagramów zgodnie z zasadą komasacji diagramów wynikających z kontrakcji punktów czasowych na pętlach bocznych – obliczenia członu Schrödingera odpowiadające skomasowanemu diagramowi można ograniczyć jedynie do przyczynku pochodzącego od pętli głównej: pętle boczne dają bowiem od razu mnożniki odpowiadające energiom zaburzenia o rzędach mniejszych niż N. I tak: człon Schrödingera dla $N = 3$ odpowiadający kontrakcji 1:2 (Rys. 4a) będzie miał mnożnik $\Delta E^{(1)}$ [patrz (15a) i Rys. 3a]; podobny człon dla $N = 4$ i kontrakcji 1:3 będzie miał mnożnik $\Delta E^{(2)}$ (Rys. 3b); wreszcie, dla $N = 5$ człon Schrödingera odpowiadający kontrakcji 1:4 będzie miał mnożnik $\Delta E^{(3)}$. Mnożnik ten – z uwagi na Rys. 3c oraz Rys. 4a – komasuje przyczynek do $\Delta E^{(5)}$ pochodzący od obydwu sytuacji: diagramu III $^{T}_{s}$ oraz diagramu XIII $^{T}_{s}$. Łatwo stwierdzić, że człony Schrödingera dla diagramów I $^{T}_{s}$, IV $^{T}_{s}$ oraz VI $^{T}_{s}$ będą miały mnożniki równe $\Delta E^{(1)}$; człony VII $^{T}_{s}$, X $^{T}_{s}$ oraz XII $^{T}_{s}$ będą miały mnożniki $(\Delta E^{(1)})^2$; człony II $^{T}_{s}$ oraz V $^{T}_{s}$ – mnożnik $\Delta E^{(2)}$; człony VIII $^{T}_{s}$ i IX $^{T}_{s}$ – mnożniki $\Delta E^{(1)}\,\Delta E^{(2)}$; wreszcie, człon XI $^{T}_{s}$ będzie miał mnożnik $(\Delta E^{(1)})^3$. Wraz z diagramami III $^{T}_{s}$, XIII $^{T}_{s}$ oraz diagramem 0 $^{T}_{s}$, który – jako pozbawiony kontrakcji – nie będzie miał żadnego mnożnika, wyczerpuje to całkowitą liczbę $S_5 = 14$ diagramów dla $N = 5$.

Ogólnie biorąc, komasacja diagramów powstałych z kontrakcji czasowych na pętlach bocznych redukuje dla $N>4$ liczbę diagramów w rzędzie N rachunku zaburzeń, dla których przyczynki do $\Delta E^{(N)}$ należy obliczyć. Zredukowana liczba diagramów wynosi[17]

[17] S. Olszewski, T. Kwiatkowski, art. cyt.

$$W_N = 2^{N-1} - N \tag{16}$$

będąc wydatnie mniejszą od $S_N - 1$ dla $N \gg 1$; patrz Tabela 1. Poza przyczynkami od W_N diagramów należy uwzględnić dla danego N tylko przyczynek do $\Delta E^{(N)}$ pochodzący od pojedynczego diagramu pozbawionego kontrakcji; Rys. 3.

9. PODSUMOWANIE WYNIKÓW DOTYCZĄCYCH ZASTOSOWANIA KOŁOWEJ SKALI CZASU DO OBLICZEŃ RACHUNKU ZABURZEŃ SCHRÖDINGERA

W oryginalnym ujęciu Schrödingera dla dużych rzędów N rachunku zaburzeń przeprowadzonego dla energii niezdegenerowanego stanu zaburzonego otrzymujemy z reguły ogromną [równą S_N – patrz równanie (7) i Tabela 1] liczbę członów Schrödingera wyrażających energię zaburzenia N-go rzędu; energię tę oznaczamy jako $\Delta E^{(N)}$. Poszczególne człony wchodzące w skład $\Delta E^{(N)}$ przybierają na ogół bardzo skomplikowaną postać.

Wprowadzenie zmiennej czasowej pozwala na uporządkowane obliczanie członów Schrödingera uzyskiwanych zazwyczaj według procedury iteracyjnej rachunku zaburzeń. Jeśli zmienna czasowa ma charakter skali prostoliniowej, rozciągającej się od minus do plus nieskończoności, wówczas celem uzyskania $\Delta E^{(N)}$ należy umieścić N punktów czasowych na tej skali i połączyć je diagramami Feynmana w liczbie P_N; patrz równanie (8) i Tabela 1. Z uwagi na to, że dla dużych N mamy

$$P_N \gg S_N, \tag{17}$$

powstaje niewygodny problem skombinowania przyczynków pochodzących od P_N diagramów Feynmana w S_N członów Schrödingera wchodzących do energii $\Delta E^{(N)}$.

Powyższa trudność nie występuje, gdy prostoliniową skalę czasu zastąpić skalą topologicznie kołową. Wówczas energię zaburzenia $\Delta E^{(N)}$ uzyskujemy umieszczając N punktów czasowych na tej skali. Jeśli dopuścić obecność kontrakcji punktów czasowych na skali kołowej rzędu N w taki sposób, aby powstałe pętle czasowe miały nadal charakter nie przecinających się kół, otrzymamy dokładnie liczbę S_N członów Schrödingera wchodzących w skład

$\Delta E^{(N)}$. Ponadto, dzięki własności wzajemnej niezależności bocznych pętli czasowych, składniki pochodzące od niektórych zespołów członów Schrödingera należących do danego N mogą być łatwo poddane komasacji. Redukuje to w wyraźny sposób liczbę obliczanych członów Schrödingera, a ponadto ułatwia charakterystykę budowy poszczególnych członów[18].

10. ZAKOŃCZENIE

W artykule dokonano próby oglądu skali czasu z punktu widzenia fizyki nierelatywistycznej. W pierwszym rzędzie zwrócono uwagę na subiektywny charakter skali czasu. I tak, ekstrapolacja ludzkich doświadczeń proponuje konwencjonalną skalę czasu, będącą topologiczną prostą, która biegnie od minus nieskończoności (przeszłość) do plus nieskończoności (przyszłość). Tymczasem łatwo zauważyć – na prostych układach mechaniki klasycznej – że nie jest to jedynie możliwa skala czasu, o ile założyć, że zdolności percepcyjne obserwatora są zgodne z własnościami fizycznymi badanego układu. W szczególności, układy oscylujące mechaniki klasycznej preferują skalę czasu będącą topologicznym kołem. Skalę czasu o podobnym, czyli kołowym, charakterze implikuje także schrödingerowski rachunek zaburzeń przeprowadzony na gruncie nierelatywistycznej mechaniki kwantowej. Wędrówka od stacjonarnego niezdegenerowanego stanu niezaburzonego do podobnego stanu zaburzonego odbywa się po nieskończonym zespole cyklów zdarzeń ustawionych wzdłuż kołowej skali czasu. Każdy cykl – który składa się z różnych zdarzeń – wnosi swój wkład do energii zaburzenia ΔE. Istotne staje się tu zagadnienie zbieżności obliczeń do dokładnej wartości ΔE. W wielu wypadkach praktycznych już niewiele cyklów zaburzeń, obejmujących w dodatku małą liczbę zdarzeń zawartych w pojedynczym cyklu, wnosi dominujący wkład do ΔE. Mogą się jednak

[18] Bardziej szczegółowa analiza kombinatoryczna zdarzeń związanych z opisem rachunku zaburzeń wzdłuż kołowej skali czasu jest podana w: S. Olszewski, *Combinatorical analysis of the Rayleigh-Schrödinger perturbation theory based on a circular scale of time*, International Journal of Quantum Chemistry 97(2004), 784-801; Tenże, *Two pathways of the time parameter characteristic for the perturbation problem in quantum chemistry*, Trends in Physical Chemistry 9(2003), 69-101. Niektóre filozoficzne reperkusje dotyczące kołowej skali czasu są omawiane w: S. Olszewski, *Time topology for some classical and quantum non-relativistic systems*, Studia Philosophiae Christianae 28(1992)1, 119-135.

zdarzyć sytuacje odwrotne, mianowicie do poprawnej oceny ΔE potrzebne będzie uwzględnienie bardzo dużej liczby cyklów, z których wiele może obejmować bardzo liczne zespoły zdarzeń. Kołowa skala czasu umożliwia stosunkowo prosty sposób reprezentacji poszczególnych cyklów zdarzeń, a także częściowe sumowanie ich wkładów do wyniku na ΔE.

Tabela 1. Liczby członów Schrödingera (S_N), diagramów Feynmana (P_N) oraz skomasowanych diagramów na kołowej skali czasu (W_N) obliczone dla różnych rzędów zaburzenia N; patrz odpowiednio wzory (7), (8) oraz (16). Liczba nieskomasowanych diagramów na kołowej skali czasu jest równa 1 dla każdego rzędu N.

N	S_N	P_N	W_N
2	1	1	0
3	2	2	1
4	5	6	4
5	14	24	11
6	42	120	26
7	132	720	57
8	429	5 040	120
9	1 430	40 320	247
10	4 862	362 880	502
15	2 674 440	$8.718*10^{10}$	16 369
20	1 767 263 190	$1.216*10^{17}$	524 268

Tabela 2. Permutacje punktów czasowych zawarte pomiędzy t_1 oraz t_5 odpowiadające poszczególnym diagramom Feynmana dla rzędu zaburzeń $N = 5$; patrz Rys. 2. Kreski nad symbolami t oznaczają, że linie cząstek na diagramie danej permutacji zostały zastąpione przez linie dziur i *vice versa*.

I^F:	t_2, t_3, t_4	XIII:	t_4, t_3, t_2
II^F:	t_2, t_3	XIV:	t_3, t_2
III^F:	t_2, t_4	XV:	t_4, t_2
IV^F:	t_3, t_4	XVI:	t_4, t_3
V^F:	$\bar{t}_2, \bar{t}_3, \bar{t}_4$	XVII:	$\bar{t}_3, \bar{t}_2, \bar{t}_4$
VI^F:	$\bar{t}_2, \bar{t}_3$	XVIII:	$\bar{t}_3, \bar{t}_4, \bar{t}_2$
VII^F:	$\bar{t}_2, \bar{t}_4$	XIX:	$\bar{t}_4, \bar{t}_4, \bar{t}_3$
VIII^F:	$\bar{t}_3, \bar{t}_4$	XX:	$\bar{t}_4, \bar{t}_2, \bar{t}_3$

IX^F:	t_3, t_2, t_4	XXI:	$\bar{t}_4, \bar{t}_3, \bar{t}_2$
X^F:	t_3, t_4, t_2	XXII:	$\bar{t}_3, \bar{t}_2$
XI^F:	t_2, t_4, t_3	XXIII:	$\bar{t}_4, \bar{t}_2$
XII^F:	t_4, t_2, t_3	XXIV:	$\bar{t}_4, \bar{t}_3$

Tabela 3. Pełny zestaw S_5= 14 członów Schrödingera dla rzędu zaburzeń N = 5. Sumacje w poszczególnych członach przebiegają po wskaźnikach różnych od n.

$$(1) = \frac{U_{np} U_{pq} U_{qr} U_{rs} U_{sn}}{(E_n - E_p)(E_n - E_q)(E_n - E_r)(E_n - E_s)}$$

$$(2) = -\frac{U_{np} U_{pq} U_{qs} U_{sn}}{(E_n - E_p)(E_n - E_q)(E_n - E_s)^2} U_{nn}$$

$$(3) = -\frac{U_{np} U_{pr} U_{rs} U_{sn}}{(E_n - E_p)(E_n - E_r)^2 (E_n - E_s)} U_{nn}$$

$$(4) = -\frac{U_{nq} U_{qr} U_{rs} U_{sn}}{(E_n - E_q)^2 (E_n - E_r)(E_n - E_s)} U_{nn}$$

$$(5) = -\frac{U_{ns} U_{sn}}{(E_n - E_s)^4} U^3_{nn}$$

$$(6) = \frac{U_{nr} U_{rs} U_{sn}}{(E_n - E_r)^3 (E_n - E_s)} U^2_{nn}$$

$$(7) = \frac{U_{nq} U_{qs} U_{sn}}{(E_n - E_q)^2 (E_n - E_s)^2} U^2_{nn}$$

$$(8) = \frac{U_{np} U_{ps} U_{sn}}{(E_n - E_p)(E_n - E_s)^3} U^2_{nn}$$

$$(9) = -\frac{U_{ns} U_{sn}}{(E_n - E_s)^2} \frac{U_{nq} U_{qr} U_{sn}}{(E_n - E_q)(E_n - E_r)}$$

$$(10) = \frac{U_{nq} U_{qn}}{(E_n - E_q)^2} \frac{U_{ns} U_{sn}}{(E_n - E_s)^2} U_{nn}$$

$$(11) = -\frac{U_{nq}U_{qn}}{E_n - E_q}\,\frac{U_{np}U_{ps}U_{sn}}{(E_n - E_p)^2(E_n - E_r)}$$

$$(12) = -\frac{U_{nr}U_{rn}}{E_n - E_r}\,\frac{U_{np}U_{ps}U_{sn}}{(E_n - E_p)(E_n - E_s)^2}$$

$$(13) = \frac{U_{ns}U_{sn}}{(E_n - E_s)^3}\,\frac{U_{nr}U_{rn}}{(E_n - E_r)}U_{nn}$$

$$(14) = \frac{U_{ns}U_{sn}}{(E_n - E_s)^3}\,\frac{U_{nq}U_{qn}}{(E_n - E_q)}U_{nn}$$

Tabela 4. Przyporządkowanie diagramów Feynmana (Rys. 2) oraz diagramów kołowej skali czasu (Rys. 6) do członów Schrödingera z Tabeli 3; $N = 5$.

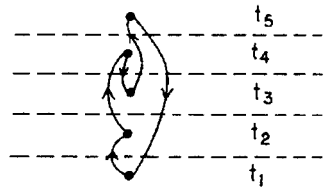
Człony Schrödingera przedstawione przez diagramy Feynmana

$(1) = 1 \times (\mathrm{I}^{\mathrm{F}})$
$(2) = 1 \times (\mathrm{II}^{\mathrm{F}})$
$(3) = 1 \times (\mathrm{III}^{\mathrm{F}})$
$(4) = 1 \times (\mathrm{IV}^{\mathrm{F}})$
$(5) = 1 \times (\mathrm{V}^{\mathrm{F}})$
$(6) = 1 \times (\mathrm{VI}^{\mathrm{F}})$
$(7) = 1 \times (\mathrm{VII}^{\mathrm{F}})$
$(8) = 1 \times (\mathrm{VIII}^{\mathrm{F}})$
$(9) = {}^1/_2 \times (\mathrm{IX}^{\mathrm{F}}) + {}^1/_4 \times (\mathrm{XII}^{\mathrm{F}}) + {}^1/_4 \times (\mathrm{XXI}^{\mathrm{F}})$
$(10) = {}^1/_2 \times (\mathrm{XIV}^{\mathrm{F}}) + {}^1/_4 \times (\mathrm{XV}^{\mathrm{F}}) + {}^1/_4 \times (\mathrm{XVIII}^{\mathrm{F}})$
$(11) + (12) = {}^1/_4 \times (\mathrm{X}^{\mathrm{F}}) + {}^1/_2 \times (\mathrm{XI}^{\mathrm{F}}) + {}^1/_2 \times (\mathrm{XXII}^{\mathrm{F}}) + {}^1/_4 \times (\mathrm{XXIII}^{\mathrm{F}})$
$\qquad + {}^1/_2 \times (\mathrm{XXIV}^{\mathrm{F}})$
$(13) + (14) = {}^1/_4 \times (\mathrm{XIII}^{\mathrm{F}}) + {}^1/_2 \times (\mathrm{XVI}^{\mathrm{F}}) + {}^1/_2 \times (\mathrm{XVII}^{\mathrm{F}})$
$\qquad + {}^1/_2 \times (\mathrm{XIX}^{\mathrm{F}}) + {}^1/_4 \times (\mathrm{XX}^{\mathrm{F}})$

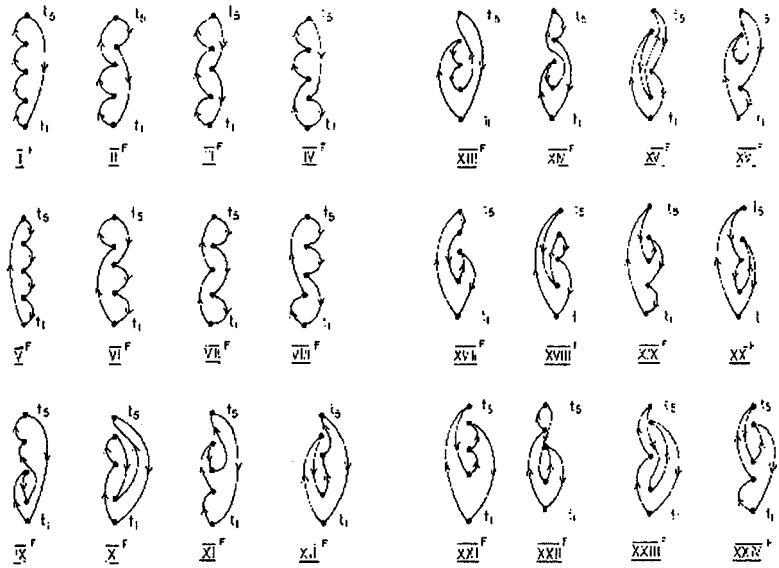
Człony Schrödingera przedstawione na kołowej skali czasu

$(1) = 0^{\mathrm{T}}_{s}$	$(8) = \mathrm{X}^{\mathrm{T}}_{s}$
$(2) = \mathrm{VI}^{\mathrm{T}}_{s}$	$(9) = \mathrm{III}^{\mathrm{T}}_{s}$
$(3) = \mathrm{IV}^{\mathrm{T}}_{s}$	$(10) = \mathrm{XIII}^{\mathrm{T}}_{s}$
$(4) = \mathrm{I}^{\mathrm{T}}_{s}$	$(11) = \mathrm{II}^{\mathrm{T}}_{s}$
$(5) = \mathrm{XI}^{\mathrm{T}}_{s}$	$(12) = \mathrm{V}^{\mathrm{T}}_{s}$
$(6) = \mathrm{VII}^{\mathrm{T}}_{s}$	$(13) = \mathrm{VIII}^{\mathrm{T}}_{s}$
$(7) = \mathrm{XII}^{\mathrm{T}}_{s}$	$(14) = \mathrm{IX}^{\mathrm{T}}_{s}$

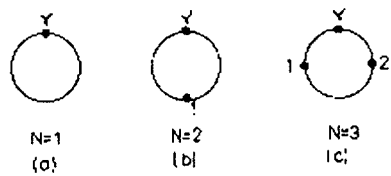
Rys. 1. Przykład diagramu Feynmana dla rzędu zaburzenia $N = 5$.

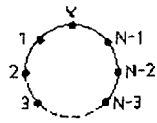


Rys. 2: Pełny zestaw $P_5 = 24$ diagramów Feynmana dla rzędu zaburzenia $N = 5$.



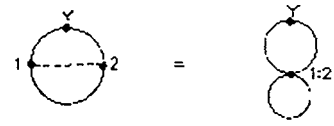
Rys. 3: Diagramy kołowej skali czasu bez kontrakcji punktów czasowych (tzw. pętle główne). Symbol v reprezentuje początkowy-końcowy punkt czasowy na skali. Rys. 3a – rząd zaburzenia $N = 1$; rys. 3b – rząd zaburzenia $N = 2$; rys. 3c – rząd $N = 3$; rys. 3d – rząd $N \gg 1$.



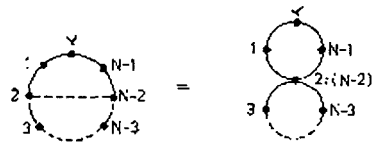


(d)

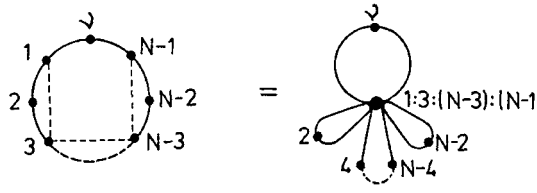
Rys. 4: Diagramy kołowej skali czasu bez kontrakcji punktów czasowych (tzw. pętle główne). Symbol η reprezentuje początkowy-końcowy punkt czasowy na skali. Rys. 3a – rząd zaburzenia $N = 1$; rys. 3b – rząd zaburzenia $N = 2$; rys. 3c – rząd $N = 3$; rys. 3d – rząd $N \gg 1$.



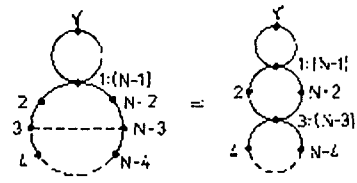
(c)



(b)

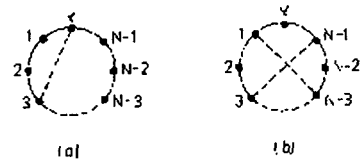


(c)

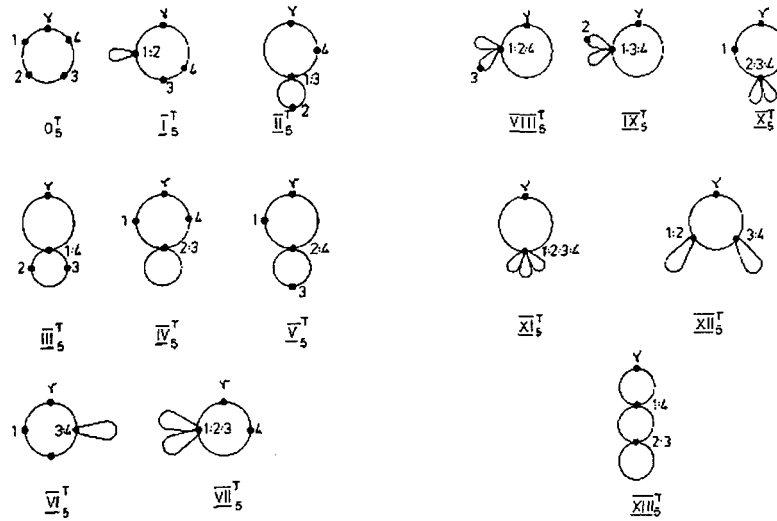


(d)

Rys. 5: Dwa typowe przykłady niedozwolonych kontrakcji punktów czasowych na kołowej skali czasu $N \gg 1$.



Rys. 6: Pełny zestaw $S_5 = 14$ diagramów kołowej skali czasu dla rzędu zaburzenia $N = 5$.



CIRCULAR SCALE OF TIME CONSIDERED FROM THE POINT OF VIEW OF SCHRÖDINGER'S QUANTUM MECHANICS

Summary

A basic approximate method of non-relativistic quantum mechanics is Schrödinger's perturbation theory. Two kinds of the time scale can be applied in order to follow the events which lead from an unperturbed non-degenerate stationary quantum state to a similar perturbed state. Topologically, one time scale is a straight-linear scale similar to that applied by Feynman, but the another possible scale is a topological circle. It is demonstrated that in calculating large orders of the perturbation energy a circular scale of time is much more efficient than a straight-linear scale.