

Kvantová teorie světla

Obsah

1	Úvodem	3
2	Maxwellovy rovnice	4
2.1	Volné a vázané pole	4
2.2	Podélné a příčné pole	6
2.3	Hamiltonián	7
2.4	Fourierův obraz	8
2.5	Diskrétní vlnové vektory	8
3	Kvantování světla	9
3.1	Druhé kvantování	10
3.2	Hamiltonián ve druhém kvantování	12
3.3	Casimirova síla*	13
3.4	Interakční Hamiltonián	17
3.5	Dipólové přiblížení	18
4	Čisté stavy volného elektromagnetického pole	20
4.1	Elektromagnetické vakuum	21
4.2	Stavy s jedním fotonem	23
4.3	Stavy s ostrým počtem fotonů	23
4.4	Nestacionární stavy	24
5	Koherentní stavy	26
5.1	Kvantová a klasická energie	26
5.2	Vlastní stav anihilačního operátoru	28
5.3	Operátor posuvu	29
5.4	Vztah koherentního stavu a klasického pole	31
5.5	A -representace koherentního stavu	32
6	Stlačené stavy	33
6.1	Stlačené vakuum	33
6.2	Stlačený koherentní stav	36
7	Smíšené stavy volného elektromagnetického pole	37
7.1	Maticе hustoty	38
7.2	Tepelné záření	38
7.3	Energie tepelného záření	39
7.4	Vedení tepla sáláním	41
7.5	Monochromatické světlo z tepelného zdroje	42

8 Spontání emise fotonu excitovaným atomem	43
8.1 Metoda projekčních operátorů	44
8.2 Doba života vybuzeného stavu	45
8.3 Jedno-fotonová emise	47
8.4 Doba života p -stavu vodíku	49
9 Šířka spektrální čáry	51
9.1 Přírozená šířka čáry	51
9.2 Teplotní rozšíření spektrální čáry	53
9.3 Srážkové rozšíření spektrální čáry	55
10 Vynucené přechody atomu	57
10.1 Absorpce a stimulovaná emise	57
10.2 Přechody vynucené elektromagnetickým polem ve stacionárním smí- šeném stavu	59
10.3 Vypálení díry do spektrální čáry	60
10.4 Stimulovaná emise versus absorpce	62
11 Interakce atomu s koherentním světlem	64
11.1 Klasický popis světla laseru	64
11.2 Dvouhladinový model a přiblížení rotující vlnou	66
11.3 Rabiho oscilace	68
12 Optická Blochova rovnice	71
12.1 Blochova rovnice	72
12.2 Spektrální čáry v susceptibilitě	74
12.3 Saturace a oscilace	75
13 Λ-systémy	76
13.1 Indukované rozladění rezonance	77
13.2 Stacionární režim	79
13.3 Zastavené světlo	83

1 Úvodem

Předložený text se zabývá kvantovými vlastnostmi světla. Výklad se skládá ze čtyř bloků.

Ve druhé a třetí kapitole oddělíme elektromagnetické záření od hmoty. Nejedná se o rozpínání vesmíru, ale o formální krok, kterým se odčlení elektrostatická interakce částic ve stabilních atomech od volných elektromagnetických vln. Zatímco elektrostatickou interakci popíšeme Coulombickým potenciálem, tak jak je zařazena do teorie atomů v kursu kvantové mechaniky, pro elektromagnetické vlny (tedy světlo) dostaneme vlnovou rovnici s kvantovanou amplitudou vln. Nakonec odvodíme Hamiltonián pro světlo ve druhém kvantování a interakci mezi atomy a světlem.

Ve čtvrté až sedmé kapitole spočteme různé stavy elektromagnetického záření. Nejprve vlastní stavy Hamiltoniánu světla – od elektromagnetického vakua po stavy s ostrým počtem fotonů. Tyto stavy nejsou vhodné k popisu klasického světla. K tomu účelu zavedeme koherentní stavy. Jako kvantově-mechanická zvláštnost jsou ukázány tzv. stlačené stavy. Pro popis světla od tepelných zdrojů zavedeme stavy smíšené.

V osmé až desáté kapitole se budeme věnovat vyzáření a záchytu jednoho fotonu jedním atomem. Odvodíme dobu života vybuzeného stavu atomu a její důsledek na spektrum fotonů vyzářených plynem. Započteme i nežádoucí mechanismy ovlivňující pozorované spektrální čáry a na vypalování děr do spektrální čáry si ukážeme, jak se některé nežádoucí vlivy dají experimentálně vyloučit.

V jedenácté až třinácté kapitole se zaměříme na nelineární odezvu jednoho atomu v silném elektromagnetickém poli laseru. Pro jeden laserový svazek odvodíme vliv síly pole na šířku absorpční čáry, saturaci absorpční schopnosti plynu a Rabiho oscilace počtu excitovaných atomů v plynu. Nelineární interakci dvou laserových svazků o různých barvách si ukážeme na atomech se dvěma stabilními stavy a jedním excitovaným, tzv. Λ -systémech. Spočteme světlem indukovanou průzračnost a světlem sníženou rychlost světla až téměř k jeho zastavení.

2 Maxwellovy rovnice

Předpokládám, že čtenář již prošel kursem klasické teorie elektromagnetického pole. Pak tedy ví nebo tuší, co je to intenzita elektrického pole \mathbf{E} a vektor magnetické indukce \mathbf{B} . Budeme jim říkat krátce elektrické a magnetické pole.

Zdrojem elektrického pole je hustota elektrického náboje ρ , krátce náboj. Zdrojem magnetického pole je hustota elektrického proudu \mathbf{j} , krátce proud. Toto vymezení zdrojů je jen přibližné a přesně platí jen pro časově nezávislá pole. Pokud se pole mění s časem, jsou jejich hodnoty dány Maxwellovými rovnicemi

$$\nabla \times \mathbf{B} - \mu\epsilon \partial_t \mathbf{E} = \mu \mathbf{j} \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \quad (2)$$

$$\epsilon \nabla \mathbf{E} = \rho \quad (3)$$

$$\nabla \mathbf{B} = 0. \quad (4)$$

Zde $\epsilon \equiv \epsilon_0$ je elektrická permitivita vakua. Podobně, $\mu \equiv \mu_0$ je magnetická permeabilita vakua. Časovou derivaci zkracujeme takto $\partial_t \equiv \frac{\partial}{\partial t}$. Pro zápis diferenciálních operací používáme oprátor ‘nabla’

$$\nabla \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (5)$$

přes který vyjadřujeme rotaci $\text{rot} \mathbf{A} \equiv \nabla \times \mathbf{A}$ formou vektorového součinu a divergenci $\text{div} \mathbf{A} \equiv \nabla \mathbf{A}$ jako skalární součin.

2.1 Volné a vázané pole

V systémech atomů vyzařujících světlo či pohlcujících světlo z vnějšího zdroje hraje elektrické pole dvojí úlohu. Jednak je součástí vyzařovaného i dopadajícího světla. Současně je elektrické pole nejvýznamější interakcí určující strukturu atomů. Tyto dvě úlohy vyžadují různé popisy.

Světlo se pohybuje a je nutné ho popsat z úplného řešení Maxwellových rovnic. Jediné co můžeme zjednodušit je jeho interakce s atomy, která se běžně popisuje jako porucha k pohybu volného pole.

Zcela opačný přístup vyžadují atomy. Interakce mezi elektrony a jádry je při úplném započtení dynamiky polí neřešitelná. Pro většinu

atomů je dostatečně dobrým přiblížením, když elektrické pole nahradíme Coulombovým potenciálem. Coulombův potenciál závisí pouze na okamžitých polohách nabitých částic a zcela zanedbává možnost vlastního časového vývoje elektrického pole.

Dvě různé úlohy a s nimi spojená dvě zcela různá přiblížení by velmi komplikovaly formulaci rovnic pro elektromagnetické pole. Naštěstí se oba příspěvky dají od sebe oddělit již na velmi obecné úrovni. Vyčleníme Coulombovu interakci přechodem k elektromagnetickým potenciálům.

Z Maxwellovy rovnice (4) plyne, že existuje vektorový potenciál \mathbf{A} , takový že

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (6)$$

Dosazením vztahu (6) do (2) dostaneme $\nabla \times (\mathbf{E} + \partial_t \mathbf{A}) = 0$. Elektrické pole se tedy může lišit od časové derivace vektorového potenciálu \mathbf{A} pouze o pole s nulovou rotací. Pole s nulovou rotací lze vyjádřit jako gradient skalárního potenciálu ϕ , takže

$$\mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{A} - \nabla \phi. \quad (7)$$

Potenciály \mathbf{A} a ϕ nejsou určeny jednoznačně. Pomocí libovolné skalární funkce χ můžeme vytvořit jiné potenciály $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \chi$ a $\phi' = \phi - \partial_t \chi$, které dávají stejné elektrické a magnetické pole. Tato tzv. kalibrační invariance nám dává možnost zvolit si potenciály, ve kterých je dělba na okamžitou interakci a pohybující se světlo co nejpohodlnější. Omezíme vektorový potenciál tzv. Coulombickou kalibrační podmínkou

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0. \quad (8)$$

Nyní již můžeme dosadit potenciály do Maxwellových rovnic a najít jejich pohybové rovnice. Dosazením (7) za podmínky (8) do (3) dostaneme

$$-\epsilon \nabla^2 \phi = \rho. \quad (9)$$

Skalární potenciál je tedy okamžitou funkcí rozložení náboje, tak jak se to předpokládá při použití okamžité Coulombovy interakce mezi elektrony a jádery. Volbou kalibrace se nám podařilo vyčlenit okamžitou interakci do skalárního potenciálu.

Dynamické chování elektromagnetického pole je popsáno pouze vektorovým potenciálem \mathbf{A} . Dosazením (6) a (7) za podmínky (8) do (1) totiž dostaneme

$$(\mu\epsilon\partial_t^2 - \nabla^2)\mathbf{A} = \mu(\mathbf{j} - \epsilon\nabla\partial_t\phi). \quad (10)$$

Soustava rovnic (6-10) poskytuje elektrická a magnetická pole, která řeší soustavu Maxwellových rovnic. Okamžitá interakce je pokryta skalárním potenciálem ϕ , jehož formální řešení je totožné s Coulombovou interakcí

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}', t)}{\epsilon|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|}. \quad (11)$$

2.2 Podélné a příčné pole

Při Coulombově kalibraci závisí vektorový potenciál i na časové změně skalárního potenciálu. Výrazu na pravé straně (10) se říká příčný (transversální) proud

$$\mathbf{j}_T = \mathbf{j} - \epsilon\nabla\partial_t\phi. \quad (12)$$

Z rovnice (10) a podmínky (8) plyne $\nabla\mathbf{j}_T = 0$. Velikost této složky proudu se nemění podél proudnic, takže teče pouze ve smyčkách, podobně jako nestlačitelná kapalina – třeba voda.

Z definice (12) přímo plyne, že doplňkový podélný (longitudinální) proud $\mathbf{j}_L = \mathbf{j} - \mathbf{j}_T$ má nulovou rotaci, $\nabla \times \mathbf{j}_L = 0$. Z rovnice kontinuity $\partial_t\rho + \nabla\mathbf{j} = 0$ je patrné, že pouze podélná složka proudu přispívá ke změnám hustoty náboje

$$\partial_t\rho + \nabla\mathbf{j}_L = 0. \quad (13)$$

Podle hodnoty divergence a rotace můžeme rozdělit i elektrické a magnetické pole na podélné a příčné složky,

$$\mathbf{E}_T = -\partial_t\mathbf{A}, \quad \mathbf{E}_L = -\nabla\phi, \quad \mathbf{B}_T = \mathbf{B}, \quad \mathbf{B}_L = 0. \quad (14)$$

Magnetické pole má $\nabla\mathbf{B} = 0$, takže je čistě příčné. Elektrické pole se rozpadá podle příspěvků jednotlivých potenciálů.

2.3 Hamiltonián

Na příspěvek podélných a příčných polí lze rozložit i celkovou elektromagnetickou energii systému,

$$\begin{aligned}
H &= \int d\mathbf{r} \left(\frac{\epsilon}{2} \mathbf{E} \mathbf{E} + \frac{1}{2\mu} \mathbf{B} \mathbf{B} \right) \\
&= \int d\mathbf{r} \left(\frac{\epsilon}{2} \mathbf{E}_T \mathbf{E}_T + \frac{1}{2\mu} \mathbf{B}_T \mathbf{B}_T \right) + \int d\mathbf{r} \frac{\epsilon}{2} \mathbf{E}_L \mathbf{E}_L + \int d\mathbf{r} \epsilon \mathbf{E}_L \mathbf{E}_T \\
&= \int d\mathbf{r} \left(\frac{\epsilon}{2} \mathbf{E}_T \mathbf{E}_T + \frac{1}{2\mu} \mathbf{B}_T \mathbf{B}_T \right) + \int d\mathbf{r} \frac{\epsilon}{2} \nabla \phi \nabla \phi - \int d\mathbf{r} \epsilon \nabla \phi \mathbf{E}_T \\
&= \int d\mathbf{r} \left(\frac{\epsilon}{2} \mathbf{E}_T \mathbf{E}_T + \frac{1}{2\mu} \mathbf{B}_T \mathbf{B}_T \right) - \int d\mathbf{r} \frac{\epsilon}{2} \phi \nabla^2 \phi + \int d\mathbf{r} \epsilon \phi \nabla \mathbf{E}_T \\
&= \int d\mathbf{r} \left(\frac{\epsilon}{2} \mathbf{E}_T \mathbf{E}_T + \frac{1}{2\mu} \mathbf{B}_T \mathbf{B}_T \right) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{\epsilon |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|}. \tag{15}
\end{aligned}$$

Třetí člen předposledního řádku je nulový neboť $\nabla \mathbf{E}_T = 0$. V posledním řádku jsme dosadili z rovnic (3) a (11).

Okamžitým Coulombovým potenciálem se již nebudeme zabývat a budeme jej považovat za započtený v modelu látky, se kterou světlo interaguje. Naším cílem je podrobný popis světla, jehož energie je dána pouze příčnou složkou.

Nakonec vyjádříme příčnou složku energie přes derivace vektorového potenciálu,¹

$$\begin{aligned}
H_T &= \int d\mathbf{r} \left(\frac{\epsilon}{2} \mathbf{E}_T \mathbf{E}_T + \frac{1}{2\mu} \mathbf{B}_T \mathbf{B}_T \right) \\
&= \int d\mathbf{r} \left(\frac{\epsilon}{2} \partial_t \mathbf{A} \partial_t \mathbf{A} + \frac{1}{2\mu} \nabla \times \mathbf{A} \nabla \times \mathbf{A} \right) \\
&= \int d\mathbf{r} \left(\frac{\epsilon}{2} \partial_t \mathbf{A} \partial_t \mathbf{A} - \frac{1}{2\mu} \mathbf{A} \nabla^2 \mathbf{A} \right). \tag{16}
\end{aligned}$$

¹

$$\begin{aligned}
\int d\mathbf{r} \nabla \times \mathbf{A} \nabla \times \mathbf{A} &= \int d\mathbf{r} \epsilon_{ijk} \nabla_j A_k \epsilon_{ilm} \nabla_l A_m = -\epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} \int d\mathbf{r} A_m \nabla_l \nabla_j A_k \\
&= -(\delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}) \int d\mathbf{r} A_m \nabla_l \nabla_j A_k = - \int d\mathbf{r} A_k \nabla_j \nabla_j A_k = - \int d\mathbf{r} \mathbf{A} \nabla^2 \mathbf{A}.
\end{aligned}$$

Využili jsme součin anti-symetrických symbolů $\epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} = \delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}$, kde všechny indexy chybějící na opačné straně rovnice se sčítají od jedné do tří. Při poslední úpravě jsme použili kalibrační podmínku $\delta_{kl} \nabla_l A_k = \nabla \cdot \mathbf{A} = 0$.

2.4 Fourierův obraz

Jako každá vlnová rovnice, i rovnice pro vektorový potenciál se pohodlněji řeší ve Fourierově obrazu. Vektorový potenciál má obraz

$$A_\lambda(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} \mathbf{A}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \quad (17)$$

Oproti obvyklé Fourierově transformaci je ve výrazu přidána projekce na vektor $\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}$. Tento vektor je jednotkový $|\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}| = 1$ a kolmý na vlnový vektor $\mathbf{q}\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} = 0$. Existují tedy pouze dva nezávislé vektory, $\lambda = 1, 2$, do kterých můžeme potenciál rozložit. Složka vektorového potenciálu ve směru vlnového vektoru je nulová podle kalibrační podmínky $\nabla \mathbf{A} = i\mathbf{q}\mathbf{A} = 0$.

Zpětná transformace je

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda=1}^2 \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} A_\lambda(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \quad (18)$$

2.5 Diskrétní vlnové vektory

Zápis potenciálu a dalších veličin přes Fourierovy obrazy vede na zbytečně nepřehledné vzorce. Místo spojitého vlnového vektoru budeme uvažovat diskrétní hodnoty umístěné do středů malých krychlí objemu $\Delta = dq_x dq_y dq_z$. Vlnové vektory, které jsou násobkem dq_x jsou periodické na intervalu $L_x = 2\pi/dq_x$. Funkce sestavená z diskrétních hodnot vlnového vektoru je periodickým opakováním motivu z jednoho kvádrů o objemu $\Omega = L_x L_y L_z = (2\pi)^3/\Delta$.

Integrace je pak nahrazena součtem přes diskrétní hodnoty

$$\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \cdots = \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Delta}{(2\pi)^3} \cdots \quad (19)$$

Abychom se vyhnuli nepříjemnému vypisování faktoru $\frac{\Delta}{(2\pi)^3}$, přijmeme úmluvu, že operátory na diskrétní mříži jsou děleny odmocninou objemu, na němž se motiv opakuje,

$$A_{\lambda\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{\Delta}{(2\pi)^3}} A_\lambda(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{1}{\Omega}} A_\lambda(\mathbf{q}). \quad (20)$$

Vektorový potenciál je pak rozložen do složek

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r}) A_{\lambda\mathbf{q}}, \quad (21)$$

kde

$$\mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\Delta}{(2\pi)^3}} \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \sqrt{\frac{1}{\Omega}} \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad (22)$$

je vlnová funkce rovinné vlny normovaná na objemu Ω

$$\int_{\Omega} d\mathbf{r} \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \mathbf{f}_{\mu-\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \delta_{\mu\mathbf{k}\lambda\mathbf{q}}. \quad (23)$$

Diskrétní hodnotu vlnového vektoru a polarizace budeme nazývat modem. Říkáme například, že $\mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}$ je vlnová funkce modu $\lambda\mathbf{q}$.

3 Kvantování světla

Volné pole vytváří vlny, které přenášejí energii. Uvažujme jednu vlnu o vlnovém vektoru \mathbf{q} , frekvenci $\omega_{\mathbf{q}}$ a polarizaci $\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}$. Maxwellovy rovnice kladou na tyto veličiny řadu omezení.

Předně, vektorový potenciál je reálný, takže musíme zahrnout i Fourierovu složku s opačným vlnovým vektorem, tedy komplexně sdruženou část, $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A_{\lambda\mathbf{q}} \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} e^{i(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{q}}t)} + A_{\lambda-\mathbf{q}} \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} e^{-i(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{q}}t)}$. Druhé omezení plyne z kalibrační podmínky a je již zahrnuto do volby polarizačního vektoru. Za třetí, aby vektorový potenciál řešil pohybovou rovnici (10) s nulovou pravou stranou, musí být frekvence svázána s vlnovým vektorem

$$\omega_{\mathbf{q}} = cq, \quad (24)$$

kde

$$c = \frac{1}{\sqrt{\mu\epsilon}} \quad (25)$$

je rychlost světla. Tímto výčtem jsou vyčerpána klasická omezení.

Klasicky může amplituda a tím i energie vlny nabývat libovolné hodnoty. Kvantový popis světla dovoluje v modu $\lambda\mathbf{q}$ pouze ty vlny, jejichž energie je celočíselným násobkem $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$. Tato podmínka omezuje možné hodnoty vektorového potenciálu.

Nadále budeme chápat vektorový potenciál \mathbf{A} jako Heisenbergovský operátor, jehož hodnoty v různých časech nekomutují. Jako důsledek, nekomutují \mathbf{A} a $\partial_t \mathbf{A}$.

Hodnotu komutátoru mezi \mathbf{A} a $\partial_t \mathbf{A}$ najdeme pomocí kanonicky sdruženého impulsu \mathbf{Q} k vektorovému potenciálu \mathbf{A} . Impulz určíme

z Lagrangiánu²

$$L_T = \int d\mathbf{r} \left(\frac{\epsilon}{2} \partial_t \mathbf{A} \partial_t \mathbf{A} + \frac{1}{2\mu} \mathbf{A} \nabla^2 \mathbf{A} \right). \quad (26)$$

Převědeme Lagrangián do Fourierova obrazu. Po dosazení (18) do Lagrangiánu (26) a integraci přes prostor dostaneme

$$L_T = \sum_{\lambda \mathbf{q}} \left(\frac{\epsilon}{2} \partial_t A_{\lambda-\mathbf{q}} \partial_t A_{\lambda \mathbf{q}} - \frac{q^2}{2\mu} A_{\lambda-\mathbf{q}} A_{\lambda \mathbf{q}} \right). \quad (27)$$

Impulz kanonicky sdružený s amplitudou vektorového potenciálu v módu $\lambda \mathbf{q}$ je derivací Lagrangiánu podle rychlosti změny této amplitudy,

$$Q_{\lambda \mathbf{q}} = \frac{\partial L_T}{\partial (\partial_t A_{\lambda \mathbf{q}})} = \epsilon \partial_t A_{\lambda-\mathbf{q}}. \quad (28)$$

Podle Heisenbergova principu žádná veličina nekomutuje se svým kanonicky sdruženým impulzem,

$$\begin{aligned} Q_{\lambda \mathbf{q}} A_{\mu \mathbf{k}} - A_{\mu \mathbf{k}} Q_{\lambda \mathbf{q}} &= -i\hbar \delta_{\mu \lambda} \delta_{\mathbf{k} \mathbf{q}} \equiv -i\hbar \delta_{\mu \mathbf{k} \lambda \mathbf{q}} \\ A_{\lambda \mathbf{q}} A_{\mu \mathbf{k}} - A_{\mu \mathbf{k}} A_{\lambda \mathbf{q}} &= 0 \\ Q_{\lambda \mathbf{q}} Q_{\mu \mathbf{k}} - Q_{\mu \mathbf{k}} Q_{\lambda \mathbf{q}} &= 0. \end{aligned} \quad (29)$$

Druhý řádek připomíná, že amplitudy potenciálu mezi sebou komutují. Třetí řádek platí pro kanonicky sdružené impulzy.

Nevím, zda se sluší připomínat, že komutační relace (29) nelze splnit s obyčejnými c -číselnými funkcemi. Od této chvíle jsou amplitudy $A_{\lambda \mathbf{q}}$ i kanonické impulzy $Q_{\lambda \mathbf{q}}$ Heisenbergovými operátory. Tyto operátory splňují stejné rovnice jako klasická pole popsaná c -číselnými amplitudami. Nebudeme proto zavádět žádné zvláštní označení operátorů.

3.1 Druhé kvantování

Soustava rovnic (27-29) představuje kvantový popis volného elektromagnetického pole a mohli bychom ji nadále užívat v tomto tvaru. Míchání složek \mathbf{q} a $-\mathbf{q}$ je ale nepohodlné. Proto se volí zápis, ve kterém jsou tyto složky formálně odděleny.

²Hustota Langranovy funkce $l_T = \frac{\epsilon}{2} \partial_t \mathbf{A} \partial_t \mathbf{A} + \frac{1}{2\mu} \mathbf{A} \nabla^2 \mathbf{A}$, dává Lagrangeovu rovnici $-\partial_t \frac{\partial l_T}{\partial (\partial_t \mathbf{A})} + \frac{\partial l_T}{\partial \mathbf{A}} = 0$, která je totožná s Maxwellovou rovnicí $-\epsilon \partial_t^2 \mathbf{A} + \frac{1}{\mu} \nabla^2 \mathbf{A} = 0$. To potvrzuje, že (26) je skutečně Lagrangián.

Zavedeme operátor $A_{\lambda\mathbf{q}}$ jako součet dvou složek

$$A_{\lambda\mathbf{q}} = C_{\lambda\mathbf{q}} \left(a_{\lambda-\mathbf{q}}^\dagger + a_{\lambda\mathbf{q}} \right). \quad (30)$$

Zde kreační operátor $a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger$ je Hermitovsky sdružený k anihilačnímu operátoru $a_{\lambda\mathbf{q}}$ a $C_{\lambda\mathbf{q}}$ je pouhé číslo. Jelikož impulz splňuje vztah (28), tedy $Q_{\lambda\mathbf{q}} = \epsilon \partial_t A_{\lambda-\mathbf{q}}$, musí být vyjádřen přes kreační a anihilační operátory následovně³

$$Q_{\lambda\mathbf{q}} = i\epsilon \omega_{\mathbf{q}} C_{\lambda\mathbf{q}} \left(a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger - a_{\lambda-\mathbf{q}} \right). \quad (31)$$

Vztahy (30) a (31) definují anihilační a kreační operátor. Řešením těchto rovnic dostaneme

$$a_{\lambda\mathbf{q}} = \frac{A_{\lambda\mathbf{q}}}{2C_{\lambda\mathbf{q}}} + i \frac{Q_{\lambda-\mathbf{q}}}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}C_{\lambda\mathbf{q}}}, \quad a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger = \frac{A_{\lambda-\mathbf{q}}}{2C_{\lambda\mathbf{q}}} - i \frac{Q_{\lambda\mathbf{q}}}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}C_{\lambda\mathbf{q}}}. \quad (32)$$

Nyní můžeme pouhým dosazením (32) a komutační relace (29) vyhodnotit komutaci anihilačního a kreačního operátoru,

$$a_{\lambda\mathbf{q}} a_{\mu\mathbf{k}}^\dagger - a_{\mu\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}} = \frac{\hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}C_{\lambda\mathbf{q}}^2} \delta_{\mu\mathbf{k}\lambda\mathbf{q}}. \quad (33)$$

Pokud chceme $a^\dagger a$ interpretovat jako operátor počtu kvant světla, je nutné jej patřičně normalizovat. Proto volíme

$$C_{\lambda\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon c q}}. \quad (34)$$

Pro kreační a anihilační operátory platí komutační relace

$$\begin{aligned} a_{\lambda\mathbf{q}} a_{\mu\mathbf{k}}^\dagger - a_{\mu\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}} &= \delta_{\mu\mathbf{k}\lambda\mathbf{q}} \\ a_{\lambda\mathbf{q}} a_{\mu\mathbf{k}} - a_{\mu\mathbf{k}} a_{\lambda\mathbf{q}} &= 0 \\ a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\mu\mathbf{k}}^\dagger - a_{\mu\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger &= 0. \end{aligned} \quad (35)$$

První řádek vztah (33) při volbě (34). Druhý a třetí vztah z této sady říká, že anihilační a kreační operátory komutují vždy se shodným operátorem. Jejich důkaz je jednoduchý. Pro $\lambda = \mu$ a $\mathbf{q} = \mathbf{k}$ jsou tyto komutace pouhými identitami. Pro $\lambda \neq \mu$ nebo $\mathbf{q} \neq \pm\mathbf{k}$ je komutace operátorů zaručena komutací operátorů polí A a impulzů Q , viz druhý

³Ve srovnání se vztahem (30) jsme zavedli následující změny. Zaměnili jsme $\mathbf{q} \leftrightarrow -\mathbf{q}$ a vynásobili ϵ . Časová derivace vnese $i\omega_{\mathbf{q}}$. Impulz je úměrný rozdílu kreačního a anihilačního operátoru, aby byl lineárně nezávislý od amplitudy.

a třetí vztah (29). Zbývá jen $\lambda = \mu$ a $\mathbf{q} = -\mathbf{k}$. O platnosti komutačních relací pro tento případ se snadno můžete přesvědčit dosazením kreačních a anihilačních operátorů z výrazů (32).

3.2 Hamiltonián ve druhém kvantování

Na kreační a anihilační operátory převedeme všechny veličiny, se kterými se budeme zabývat. Podle (18), (30) a (34) je Heisenbergův operátor vektorového potenciálu roven

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}) &= \sum_{\lambda\mathbf{q}} \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}} \left(a_{\lambda-\mathbf{q}}^\dagger + a_{\lambda\mathbf{q}} \right) \\ &= \sum_{\lambda\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}} \left(\mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}}(\mathbf{r}) a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger + \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r}) a_{\lambda\mathbf{q}} \right). \end{aligned} \quad (36)$$

Příčné elektrické pole $\mathbf{E}_T = -\partial_t \mathbf{A}$ vyhodnotíme z Fourierova obrazu impulzu. Podle (28) je $E_{\lambda\mathbf{q}} = -\frac{1}{\epsilon} Q_{\lambda-\mathbf{q}}$, takže podle (31) je jeho operátor roven

$$\mathbf{E}_T(\mathbf{r}) = -i \sum_{\lambda\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon}} \left(\mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}}(\mathbf{r}) a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger - \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r}) a_{\lambda\mathbf{q}} \right). \quad (37)$$

Konečně magnetické pole $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ z (36) má operátor

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = -i \sum_{\lambda\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}} \mathbf{q} \times \left(\mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}}(\mathbf{r}) a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger - \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r}) a_{\lambda\mathbf{q}} \right). \quad (38)$$

Vyjádření Hamiltoniánu ve druhém kvantování vyžaduje několik kroků. Nejprve Hamiltonián (16) přepíšeme přes Fourierovy složky potenciálu a impulzu,

$$H_T = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \left(\frac{1}{2\epsilon} Q_{\lambda-\mathbf{q}} Q_{\lambda\mathbf{q}} + \frac{q^2}{2\mu} A_{\lambda-\mathbf{q}} A_{\lambda\mathbf{q}} \right). \quad (39)$$

Přímým dosazením potenciálu (30) a impulzu (31) s hodnotami (34) a (24) dostaneme⁴

$$H_T = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \frac{1}{2} \left(a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}} + a_{\lambda\mathbf{q}} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger \right). \quad (40)$$

⁴Při úpravě je nutno použít, že frekvence ani lineární koeficient α nezávisí na znaménku vlnového vektoru.

Podle komutační relace (35) lze Hamiltonián (40) přepsat na nejobvyklejší tvar

$$H_T = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}} + U_T^0. \quad (41)$$

Energie základního stavu

$$U_T^0 = \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}}, \quad (42)$$

nepřispívá k pohybovým rovnicím, neboť komutuje s libovolným operátorem. Na tom nic nezmění ani nepříjemná skutečnost, že je nekonečný. Elektromagnetické záření má totiž nekonečně mnoho stupňů volnosti, neboť jeho vlnový vektor může být libovolně velký. Každý stupeň volnosti přispívá ke konstantnímu členu energií nulových kmitů $\frac{1}{2}\hbar\omega_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2}\hbar c q$. Pro velká \mathbf{q} suma přes energie nulových kmitů rychle diverguje.

Podívejme se ještě na hybnost \mathbf{S} přenášenou elektromagnetickým polem. Ta je určena integrálem Poyntingova vektoru $\mathbf{S} = f d\mathbf{r} \epsilon \mathbf{E} \times \mathbf{B}$. Dosadíme za obě pole rozklad do druhého kvantování, tj. výrazy (37) a (38), a upravíme⁵

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= - \sum_{\lambda\mathbf{q}\mu\mathbf{k}} \int d\mathbf{r} \mathbf{f}_{\mu\mathbf{k}} \times \mathbf{q} \times \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}} \frac{\hbar}{2} (a_{\mu-\mathbf{k}}^\dagger - a_{\mu\mathbf{k}}) (-a_{\lambda-\mathbf{q}}^\dagger - a_{\lambda\mathbf{q}}) \\ &= \sum_{\lambda\mathbf{q}\mu} \mathbf{e}_{\mu\mathbf{q}} \times \mathbf{q} \times \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} \frac{\hbar}{2} (a_{\mu\mathbf{q}}^\dagger - a_{\mu-\mathbf{q}}) (a_{\lambda-\mathbf{q}}^\dagger + a_{\lambda\mathbf{q}}) \\ &= \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\mathbf{q} \frac{1}{2} (a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger - a_{\lambda-\mathbf{q}}) (a_{\lambda-\mathbf{q}}^\dagger + a_{\lambda\mathbf{q}}) \\ &= \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\mathbf{q} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (43)$$

Hybnost elektromagnetického pole je tedy součtem impulzů jednotlivých kvant.

3.3 Casimirova síla*

Přestože energie základního stavu U_T^0 nepřispívá k pohybovým rovnicím pro elektromagnetické vlny, je částí celkové energie systému. Její

⁵Integrace přes prostor vede na $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$. Touto δ odstraníme impuls \mathbf{k} . Vektorové součiny zjednodušíme identitou $\mathbf{A} \times \mathbf{B} \times \mathbf{C} = \mathbf{B}(\mathbf{A}\mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A}\mathbf{B})$, kalibrační podmínkou $\mathbf{q}\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} = 0$ a pomocí ortogonalit polarizačních vektorů $\mathbf{e}_{\mu\mathbf{q}}\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} = \delta_{\mu\lambda}$ přesčítáme index μ . Nakonec použijeme symetrii vůči záměně $\mathbf{q} \leftrightarrow -\mathbf{q}$ a vyloučíme liché příspěvky.

příspěvek je měřitelný jako tzv. Casimirova síla mezi dvěma vodivými předměty. Výpočet Casimirovy je zdlouhavý a tato kapitola je určena pouze zájemcům.

Uvažujme dvě rovnoběžné ideálně vodivé desky o ploše S ve vzdálenosti L . Plocha je veliká, $S \gg L^2$, takže je můžeme považovat za nekonečné a neuvažovat vliv okrajů. Světelné mody mezi deskami mají kolmo na desky charakter stojatých vln s diskrétním vlnovým číslem $q_n = \frac{\pi}{L}n$, kde $n = 1, 2, \dots$. Podél desek je vlnové číslo spojité, $\mathbf{q} = (q_y, q_z)$. Pro $q_n \neq 0$ má elektrické pole vlny složku rovnoběžnou s deskami. Předpokládaná nekonečná vodivost desek pak vyžaduje, aby vlna měla uzly v polohách desek (jednu desku máme v $x = 0$ a druhou pro $x = L$), takže odpovídající vektor base má tvar $\mathbf{f}_{\lambda, n\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{SL}} \mathbf{e}_{\lambda, n\mathbf{q}} e^{iq_y y + iq_z z} \sin(q_n x)$.

Objemová hustota energie základního stavu mezi deskami je

$$u_L = \frac{U_{\text{T}}^0}{SL} = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \frac{1}{2} \hbar c q = \hbar c \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{1}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2 + q^2} e^{-\eta \sqrt{\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2 + q^2}}. \quad (44)$$

Součet přes polarizace dal faktor dvě a zkrátil se s jednou polovinou. Dvojměrná integrace je normována na jednotku plochy, zatímco u součtu přes kolmý vektor zůstává faktor $\frac{1}{L}$. Součet je regularizován vymírající exponentou s infinitesimálním útlumem $\eta \rightarrow 0$.

Skutečnost, že hustota energie závisí na vzdálenosti desek, vede na sílu mezi deskami. Jestliže desky vzdálíme o dL , změní se celková energie systému, $dU = (u_{L+dL}(L+dL) - u_L L - u_{\infty} dL)S$. První dva členy vyjadřují rozdíl energií základního stavu mezi deskami. Třetí člen započítává, že oddálením desek zmenšíme okolní objem s hustotou energie nekonečného systému $u_{\infty} = \lim_{L \rightarrow \infty} u_L$. Změna energie po dráze je síla a její hodnota na jednotku plochy je tlak,

$$p = -\frac{1}{S} \frac{dU}{dL} = u_{\infty} - u_L - \frac{\partial u_L}{\partial L} L. \quad (45)$$

Nezbývá, než tlak vyhodnotit v nejnižším netriviálním řádu $\frac{1}{L}$. Začneme výpočtem hustoty energie, kde přeintegrujeme polární úhel

$$u_L = \frac{\hbar c}{2\pi L} \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} q dq \sqrt{\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2 + q^2} e^{-\eta \sqrt{\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2 + q^2}}. \quad (46)$$

Substitucí $z = q^2 + \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2$ dostaneme

$$u_L = \frac{\hbar c}{4\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\pi}{L} g\left(\frac{\pi}{L}n\right), \quad \text{kde} \quad g(k) = \int_{k^2}^{\infty} dz \sqrt{z} e^{-\eta\sqrt{z}}. \quad (47)$$

Pro $L \rightarrow \infty$ přechází součet na integrál $\lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\pi}{L} \dots = \int_0^{\infty} dk \dots$, takže $u_{\infty} = \frac{\hbar c}{4\pi^2} \int_0^{\infty} dk g(k)$.

Potřebujeme zjistit, jakým způsobem se hustota energie blíží ke své limitní hodnotě. Použijeme k tomu úvahu podobnou numerickému výpočtu integrálu. Nejprve rozdělíme integrovanou oblast na intervaly délky $\frac{\pi}{L}$ centrované kolem diskretních hodnot vlnového vektoru,

$$\int_0^{\infty} dk g = \int_0^{\frac{\pi}{2L}} dk g + \sum_{n=1}^{\infty} \int_{(n-\frac{1}{2})\frac{\pi}{L}}^{(n+\frac{1}{2})\frac{\pi}{L}} dk g. \quad (48)$$

V prvním intervalu rozvineme funkci kolem nuly $g(k) = g_0 + \delta g$, kde $g_0 = \int_0^{\infty} dz \sqrt{z} e^{-\eta\sqrt{z}}$ a $\delta g = -\int_0^{k^2} dz \sqrt{z} e^{-\eta\sqrt{z}}$. Pro malé vektory $k \sim \frac{\pi}{L}$ můžeme zanedbat útlum v opravném členu, $\delta g = -\int_0^{k^2} dz \sqrt{z} = -\frac{2}{3}k^3$, takže

$$\int_0^{\frac{\pi}{2L}} dk g = g_0 \frac{\pi}{2L} - \frac{1}{6} \left(\frac{\pi}{2L}\right)^4. \quad (49)$$

Oba příspěvky vymizí v limitě $L \rightarrow \infty$, takže patří k hledané funkci $u_{\infty} - u_L$. Příspěvek úměrný g_0 však můžeme vyloučit, neboť nepřispívá k tlaku, $(1 + L \frac{\partial}{\partial L}) \frac{1}{L} = 0$.

V intervalech $(n - \frac{1}{2})\frac{\pi}{L} < k < (n + \frac{1}{2})\frac{\pi}{L}$ rozvineme funkci g kolem středů,

$$g = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} g_n^{(m)} \left(k - \frac{\pi}{L}n\right)^m, \quad (50)$$

kde $g_n^{(m)}$ je m -tá derivace v bodu $\frac{\pi}{L}n$. Liché mocniny nepřispívají k integrálu přes symetrický interval, takže pro $m = 2j + 1$ dostaneme

$$\int_{(n-\frac{1}{2})\frac{\pi}{L}}^{(n+\frac{1}{2})\frac{\pi}{L}} dk g = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2}{(2j+1)!} g_n^{(2j)} \left(\frac{\pi}{2L}\right)^{2j+1}. \quad (51)$$

Nultý řád mocninného rozvoje je hodnota v diskrétním vlnovém vektoru, $g_n^{(0)} = g\left(\frac{\pi}{L}n\right)$. Součet přes nulté řády je tedy roven hledané hustotě energie pro konečnou vzdálenost desek. Skutečně pro $j = 0$ dostaneme $\frac{2}{1!} \frac{\pi}{2L} \sum_{n=1}^{\infty} g_n^{(0)} = \frac{4\pi}{\hbar c} u_L$. Rozvoj do řádů proto můžeme psát s vyčleněnými opravnými členy, $u_{\infty} - u_L = \frac{\hbar c}{4\pi^2} G$, kde

$$G = -\frac{1}{6} \left(\frac{\pi}{2L}\right)^4 + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{2}{(2j+1)!} \left(\frac{\pi}{2L}\right)^{2j+1} \sum_{n=1}^{\infty} g_n^{(2j)}. \quad (52)$$

Hledáme nejnižší nenulový opravný člen. Zkusme členy do řádu L^{-4} , tj. členy pro $j = 1$ a $j = 2$. Nejprve vezmeme $j = 1$, k jehož úpravě použijeme

$$\frac{\pi}{L} \sum_{n=1}^{\infty} g_n^{(2)} = \int_{\frac{\pi}{2L}}^{\infty} dk g^{(2)} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{3!} \left(\frac{\pi}{2L}\right)^3 g_n^{(4)}. \quad (53)$$

Tento vztah je opět rozvojem integrálu na pravé straně do součtu středových hodnot a parabolické opravy. Vyšší opravy jsou zanedbány. V přiblížení (53) je výchozí funkcí $g^{(2)}$. První člen je integrál z derivace, což snadno vyhodnotíme

$$\int_{\frac{\pi}{2L}}^{\infty} dk g^{(2)} = -g^{(1)}\left(\frac{\pi}{2L}\right) = 2 \left(\frac{\pi}{2L}\right)^2. \quad (54)$$

Využili jsme, že pro malá k je $g = g_0 - \frac{2}{3}k^3$.

Dosazením (53) a (54) do (52) najdeme

$$G = \frac{1}{6} \left(\frac{\pi}{2L}\right)^4 + 2 \left(\frac{1}{5!} - \frac{1}{3!3!}\right) \left(\frac{\pi}{2L}\right)^5 \sum_{n=1}^{\infty} g_n^{(4)}. \quad (55)$$

Prvního člen je součet prvního členu rozkladu (52) a členu (54). Ve druhém členu je příspěvek úměrný $\frac{1}{5!}$ dán přímo rozkladem (52), zatímco člen úměrný $\frac{1}{3!3!}$ plyne z opravy v (53).

Konečně spočteme přibližně součet integrálem

$$\frac{\pi}{L} \sum_{n=1}^{\infty} g_n^{(4)} = \int_{\frac{\pi}{2L}}^{\infty} dk g^{(4)} = -g^{(3)}\left(\frac{\pi}{2L}\right) = 4. \quad (56)$$

a celý výraz sestavíme

$$G = \left(\frac{\pi}{2L}\right)^4 \left(\frac{1}{6} + \frac{4}{5!} - \frac{4}{3!3!}\right) = \frac{\pi^4}{L^4} \frac{1}{180}. \quad (57)$$

Tlak elektromagnetické energie v základním stavu (Casimirova síla) tedy přitlačuje desky k sobě

$$p = \frac{\hbar c}{4\pi^2} \left(1 + L \frac{\partial}{\partial L}\right) G = -\frac{\pi^2 \hbar c}{240 L^4}. \quad (58)$$

3.4 Interakční Hamiltonián

Rozšíříme Hamiltonián o Hamiltonián hmoty $H_{\mathbf{A}}$, který sice závisí na vektorovém potenciálu \mathbf{A} , nezávisí však na jeho časové derivaci. Pro jednoduchost zanedbáme pohyb jader a budeme uvažovat pouze elektrony. Ve formalismu druhého kvantování má Hamiltonián elektronů tvar

$$\begin{aligned} H_{\mathbf{A}} &= \sum_{s=\uparrow\downarrow} \int d\mathbf{r} \Psi_s^\dagger(\mathbf{r}) \left[\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla - e\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi_s(\mathbf{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{ss'=\uparrow\downarrow} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Psi_{s'}^\dagger(\mathbf{r}') \Psi_s^\dagger(\mathbf{r}) U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \Psi_s(\mathbf{r}) \Psi_{s'}(\mathbf{r}') \\ &+ \sum_{ss'=\uparrow\downarrow} \int d\mathbf{r} \Psi_{s'}^\dagger(\mathbf{r}) \mu_B (\sigma_{ss'} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r})) \Psi_s(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (59)$$

První člen je kinetická energie a vnější potenciál V . Vnější potenciál může být libovolného původu, ale jeho nejdůležitější položkou je elektrostatický potenciál od jader. Druhý člen je Coulombická interakce elektronů. Třetí člen je interakce spinu s magnetickým polem. Zde σ představuje vektor Pauliho matic a $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ je Pauliho magneton. Vektor σ tvoří skalární součin s magnetickým polem $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Indexy s a s' označují spin.

Pro pohodlný zápis přibližných výpočtů je výhodné oddělit interakci elektronů s polem od zbytku Hamiltoniánu. Označíme jako H_e Hamiltonián fiktivních elektronů neinteragujících s vektorovým potenciálem. Tento Hamiltonián dostaneme z úplného Hamiltoniánu (59) vyloučením pole, $H_e = H_{\mathbf{A}=0}$, tj. pro $\mathbf{A} = 0$. Interakční Hamiltonián je rozdíl mezi skutečným a fiktivním Hamiltoniánem,

$$\begin{aligned} H' = H_{\mathbf{A}} - H_e &= \sum_s \int d\mathbf{r} \Psi_s^\dagger \mathbf{A} \frac{e}{m} i\hbar\nabla \Psi_s \\ &+ \sum_s \int d\mathbf{r} \Psi_s^\dagger \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2 \Psi_s \\ &+ \sum_{ss'} \int d\mathbf{r} \Psi_{s'}^\dagger \mu_B (\sigma_{ss'} \cdot \nabla \times \mathbf{A}) \Psi_s. \end{aligned} \quad (60)$$

Tři členy interakčního Hamiltoniánu (60) představují tři různé mechanismy interakce. První a druhý člen vyplývají ze závislosti kinetické energie na vektorovém potenciálu. Je zřejmé, že kalibrační transformací, $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi$, se smysl oddělení těchto dvou částí změní. Budeme předpokládat kalibraci, ve které je vektorový potenciál nulový, pokud je elektromagnetické záření ve vakuovém stavu.

Při zvolené kalibraci představuje první člen lineární interakci pole s elektrony. Druhý představuje interakci nelineární. Oba tyto členy zachovávají spin elektronu. Třetí člen je lineární, ale při interakci dojde k překlopení spinu. Který z těchto příspěvků je podstatný záleží na řadě okolností a na tom, jaký proces chceme světlem pozorovat. V našich úvahách se omezíme na interakci popsanou prvním členem.

3.5 Dipólové přiblížení

Uvažujme pro jednoduchost interakci světla s atomy plynu. Elektrony atomů jsou zhruba popsány jedoelektronovými vlnovými funkcemi, $\psi_{\kappa}(\mathbf{r} - \mathbf{R})$, kde \mathbf{r} je poloha elektronu a \mathbf{R} je poloha jádra příslušného atomu.

Přechod elektronu z jednoho stavu do jiného je možný jen tehdy, je-li počáteční stav obsazen a koncový prázdný. Jeden ze stavů může být i volný elektron odlétající od atomu nebo naopak přilétající k němu.

Odhadneme velikost prvního členu interakčního Hamiltoniánu. Budeme uvažovat pouze elektromagnetické vlny s energií fotonu srovnatelnou s vazebnou energií elektronů $\hbar\omega_{\mathbf{q}} \sim E_{\kappa}$.

Největší vazebná energie elektronu u jádra s nábojem $-Ze$ je zhruba $E \approx Z^2 \text{Ry}$, kde Rydbergova energie je $\text{Ry} = \frac{me^4}{(4\pi\epsilon\hbar)^2} = 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 13.6 \text{ eV}$. Pro atomová čísla $Z = 1 - 200$ dostaneme rozmezí energií $E \sim 10\text{eV} - 100\text{keV} \sim 10^{-18} - 10^{-14} \text{ J}$.

Vazebným energiím odpovídá velikost vlnového vektoru v rozmezí $q = \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{c} \sim \frac{E_{\kappa}}{\hbar c} \sim 10^8 - 10^{12} \text{ m}^{-1}$. Charakteristickou délkou $1/q$ srovnáme s poloměrem vlnové funkce $a = a_0/Z$, kde $a_0 = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{me^2} = 5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ je Bohrov poloměr. Pro $Z = 200$ je $a \sim 10^{-13}$ zatímco $1/q \sim 10^{-12}$. Pro $Z = 1$ je $a \sim 10^{-10}$ a $1/q \sim 10^{-8}$. V obou mezních případech je $1/q \gg a$. Uvažovali jsme maximální vazebné energie. Pro malé energie elektronových přechodů ve vazebné slupce je tato nerovnost

ještě ostřejší.

Nerovnost $1/q \gg a$ znamená, že vektorový potenciál se v prostoru mění pomalu ve srovnání s vlnovými funkcemi elektronů. Pro každý atom zvláště pak můžeme hodnotu vektorového potenciálu nahradit hodnotou v poloze jeho jádra, $\mathbf{A}(\mathbf{r}) \approx \mathbf{A}(\mathbf{R})$. Nyní můžeme vektorový potenciál vytknout před integraci po elektronových souřadnicích,

$$H' = \sum_{\mathbf{R}} e\mathbf{A}(\mathbf{R}) \sum_s \int_{\text{okolí } \mathbf{R}} d\mathbf{r} \Psi_s^\dagger \frac{i\hbar\nabla}{m} \Psi_s = \sum_{\mathbf{R}} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \mathbf{J}_{\mathbf{R}}, \quad (61)$$

kde

$$\mathbf{J}_{\mathbf{R}} = e \sum_s \int_{\text{okolí } \mathbf{R}} d\mathbf{r} \Psi_s^\dagger \frac{i\hbar\nabla}{m} \Psi_s \quad (62)$$

je integrál proudu v okolí jednoho atomu v bodu \mathbf{R} . V praxi tuto integraci provedeme jako nekonečný integrál s jediným atomem v systému.

Integrál elektrického proudu v okolí jednoho atomu lze vyjádřit přes atomární dipól. V klasické fyzice se dipólové záření odvozuje z relativního pohybu těžišť kladného a záporného náboje. Pro atom s protonovým číslem Z je těžiště kladného náboje $-Ze\mathbf{R}$. Operátor těžiště elektronového náboje je

$$\mathbf{t} = e \sum_s \int_{\text{okolí } \mathbf{R}} d\mathbf{r} \Psi_s^\dagger \mathbf{r} \Psi_s. \quad (63)$$

Pro neutrální atom můžeme operátor dipólu zapsat jako

$$\mathbf{d} = e \sum_s \int_{\text{okolí } \mathbf{R}} d\mathbf{r} \Psi_s^\dagger (\mathbf{r} - \mathbf{R}) \Psi_s. \quad (64)$$

Protože $\nabla^2(\mathbf{r} - \mathbf{R}) - (\mathbf{r} - \mathbf{R})\nabla^2 = 2\nabla$, je operátor proudu úměrný komutátoru dipólu s Hamiltoniánem,

$$\mathbf{J} = \frac{1}{i\hbar} (H_e \mathbf{d} - \mathbf{d} H_e). \quad (65)$$

Vyjádření operátoru proudu přes komutátor dipólu s Hamiltoniánem dovoluje výpočet interakce s atomy, jejichž dipól a energie jednotlivých stavů jsou experimentálně stanoveny. Uvažujme přechod mezi stavy a a b o energiích E_a a E_b . Dipól tohoto přechodu $\mathbf{d}_{ab} = \langle \psi_a | \mathbf{d} | \psi_b \rangle$ nechť je znám. Potom elektrický proud spojený s tímto přechodem je

$$\mathbf{j}_{ab} = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_a | (H_e \mathbf{d} - \mathbf{d} H_e) | \psi_b \rangle = \frac{E_a - E_b}{i\hbar} \mathbf{d}_{ab}. \quad (66)$$

Použili jsme $H_e|\psi_b\rangle = E_b|\psi_b\rangle$ a podobně pro a .

Čtenář si možná položil otázku, proč interakční Hamiltonián obsahuje úplný proud $\mathbf{j} = e\Psi_s^\dagger \frac{i\hbar\nabla}{m} \Psi_s$, když zdrojem vektorového potenciálu je pouze příčný proud \mathbf{j}_T . V interakčním Hamiltoniánu je to jedno a lze psát buď \mathbf{j} nebo \mathbf{j}_T podle pohodlí. Interakční energie podélného proudu s vektorovým potenciálem je totiž v Coulombické kalibraci nulová,

$$\int d\mathbf{r} \mathbf{A}\mathbf{j}_L = -\epsilon \int d\mathbf{r} \mathbf{A}\nabla\partial_t\phi = \epsilon \int d\mathbf{r} \partial_t\phi \nabla\mathbf{A} = 0. \quad (67)$$

Použili jsme integraci po částech a kalibrační podmínku.

Ve všech uvažovaných problémech se omezíme na atomy s malým počtem hladin. Interakci budeme popisovat v rámci dipólového přiblížení.

4 Čisté stavy volného elektromagnetického pole

Na rozdíl od klasické fyziky, operátory \mathbf{A} , \mathbf{E} a \mathbf{B} neurčují hodnoty polí, pouze poskytují návod, jak tyto hodnoty zjistit z vlnové funkce systému Ψ . V Diracově bra-ketové symbolice je například střední hodnota elektrického pole

$$\mathcal{E}_T = \langle\Psi|\mathbf{E}_T|\Psi\rangle. \quad (68)$$

Abychom dokázali takovéto střední hodnoty počítat, musíme si upřesnit vlnovou funkci a jak na ni působí kreační a anihilační operátory.

Použijeme vlnovou funkci, jejímiž souřadnicemi jsou amplitudy vektorového potenciálu v jednotlivých modech⁶

$$\Psi(\{A\}) \equiv \Psi(\dots, A_{\lambda\mathbf{q}}, \dots). \quad (69)$$

Vlnová funkce má nekonečně mnoho argumentů, neboť elektromagnetické pole má nekonečně stupňů volnosti odpovídajících nekonečnému počtu modů.

⁶ Připomeňme si, jak je systém popsán vlnovou funkcí u jednoduchých systémů. Klasicky je jedna částice popsána svojí polohou v prostoru, tedy souřadnicí \mathcal{R} , a hybností \mathcal{Q} . Kvantově potřebujeme znát vlnovou funkci ψ a klasicky chápanou polohu či hybnost částice dokážeme určit pouze jako střední hodnotu $\mathcal{R} = \langle\psi|\mathbf{R}|\psi\rangle$ a $\mathcal{Q} = \langle\psi|\mathbf{Q}|\psi\rangle$.

Vlnovou funkci lze vyjádřit v různých reprezentacích. Vezměme si obvyklou funkci souřadnice $\psi(\mathbf{R}) = \langle\mathbf{R}|\psi\rangle$. V \mathbf{R} -reprezentaci je působení operátoru \mathbf{R} na vlnovou funkci rovno hodnotě souřadnice, $\mathbf{R}^{\text{op}}\psi(\mathbf{R}^{\text{souř}}) = \mathbf{R}^{\text{souř}}\psi(\mathbf{R}^{\text{souř}})$. Kdybychom byli důslední v notaci, museli bychom pro operátory a souřadnice používat jiné značky, což by celý zápis zkomplikovalo. Věřím, že dokážete v rovnici $\mathcal{R} = \langle\psi|\mathbf{R}|\psi\rangle = \int d\mathbf{R} |\psi(\mathbf{R})|^2 \mathbf{R}$ poznat, že v Diracově závorce je operátor, zatímco pod integrálem je číselná hodnota souřadnice.

Operátor hybnosti v souřadnicové reprezentaci je úměrný gradientu $\mathbf{Q} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}} \equiv -i\hbar\nabla$. Potom v \mathbf{R} -reprezentaci dostaneme $\mathcal{Q} = \langle\psi|\mathbf{Q}|\psi\rangle = \int d\mathbf{R} \bar{\psi}(\mathbf{R})(-i\hbar\nabla)\psi(\mathbf{R})$, kde $\bar{\psi}(\mathbf{R})$ je komplexně sdužená k $\psi(\mathbf{R})$.

Argumentem vlnové funkce je veličina, pro kterou jsme stanovili komutační pravidla. Pro světlo tedy kvantová vlnová funkce nezávisí na souřadnici, ale na amplitudách modů.

V klasickém popisu je také nekonečně modů, ale to příliš nevádí, protože se zabýváme jen těmi mody, které se aktivně účastní studovaných procesů. Toto oddělení aktivních a pasivních proměnných je nutno provést i při kvantovém popisu. Abychom této dělbě rozuměli, podívejme se na vlnovou funkci prostoru, kde není žádný foton. Klasicky tento stav odpovídá nulovému elektromagnetickému poli, takže všechny proměnné jsou pasivní.

4.1 Elektromagnetické vakuum

Předpokládejme, že prostor je úplně prázdný bez elektromagnetických kvant. Takovému stavu budeme krátce říkat vakuum a jeho vlnovou funkci označíme $|\emptyset\rangle$.

Energie vakua je nulová, takže

$$\langle\emptyset|H_T|\emptyset\rangle = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \langle\emptyset|a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}}|\emptyset\rangle = 0. \quad (70)$$

Protože funkce $a_{\lambda\mathbf{q}}|\emptyset\rangle$ a $\langle\emptyset|a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger$ jsou Hermitovsky sdružené, je jejich skalární součin nezáporný $\langle\emptyset|a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}}|\emptyset\rangle = |a_{\lambda\mathbf{q}}|\emptyset\rangle|^2 \geq 0$. Podmínku nulové energie vakua lze tedy splnit pouze když

$$a_{\lambda\mathbf{q}}|\emptyset\rangle = 0 \quad \text{neboli} \quad \langle\emptyset|a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger = 0 \quad (71)$$

pro všechny mody $\lambda\mathbf{q}$.

Z rovnice (71) lze spočítat vlnovou funkci vakua v reprezentaci amplitud vektorového potenciálu $\Psi_0(\{A\}) = \langle\{A\}|\emptyset\rangle$. Podle (32) je anihilační operátor roven

$$a_{\lambda\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}{2\hbar}} \left(A_{\lambda\mathbf{q}} + i\frac{1}{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}} Q_{\lambda-\mathbf{q}} \right). \quad (72)$$

Opět jsme narazili na míchání dvou Fourierovských složek. Musíme řešit mody $\lambda\mathbf{q}$ a $\lambda-\mathbf{q}$ současně. Místo rovnice (71) a sdružené rovnice $a_{\lambda-\mathbf{q}}|\emptyset\rangle = 0$, budeme hledat vlnovou funkci z ekvivalentních rovnic

$$\langle\{A\}|(a_{\lambda\mathbf{q}} + a_{\lambda-\mathbf{q}})|\emptyset\rangle = 0, \quad \langle\{A\}|i(a_{\lambda\mathbf{q}} - a_{\lambda-\mathbf{q}})|\emptyset\rangle = 0. \quad (73)$$

V rovnicích (73) se potenciály vyskytují v kombinacích

$$x = A_{\lambda\mathbf{q}} + A_{\lambda-\mathbf{q}} = 2 \operatorname{Re} A_{\lambda\mathbf{q}}, \quad y = -i(A_{\lambda\mathbf{q}} - A_{\lambda-\mathbf{q}}) = 2 \operatorname{Im} A_{\lambda\mathbf{q}}. \quad (74)$$

Abychom získali diferenciální rovnice pro vlnovou funkci, vyjádříme operátor kanonického impulzu v reprezentaci vektorového potenciálu,

$$Q_{\lambda\mathbf{q}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial A_{\lambda\mathbf{q}}}. \quad (75)$$

Lineárním kombinacím impulzů z rovnic (72) odpovídají derivace⁷

$$Q_{\lambda\mathbf{q}} + Q_{\lambda-\mathbf{q}} = -2i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad Q_{\lambda\mathbf{q}} - Q_{\lambda-\mathbf{q}} = -2\hbar \frac{\partial}{\partial y}. \quad (76)$$

V proměnných x a y rovnice (73) znějí

$$\left(\frac{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}{2\hbar}x + \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi_{\lambda\pm\mathbf{q}}^0 = 0, \quad \left(\frac{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}{2\hbar}y + \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_{\lambda\pm\mathbf{q}}^0 = 0. \quad (77)$$

Normovatelné řešení rovnic je Gaussova funkce

$$\Psi_{\lambda\pm\mathbf{q}}^0 = Z e^{-\frac{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}{4\hbar}(x^2+y^2)} = Z e^{-\frac{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}{\hbar}|A_{\lambda\mathbf{q}}|^2}, \quad (78)$$

kde norma $Z = \frac{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}{\pi\hbar}$ je stanovena vzhledem k integraci přes obě amplitudy, $1 = \int d\text{Re } A_{\lambda\mathbf{q}} d\text{Im } A_{\lambda\mathbf{q}} |\Psi_{\lambda\pm\mathbf{q}}^0|^2$.

Řešení (78) představuje závislost vlnové funkce na amplitudách potenciálu ve dvou sdružených modech. Další mody jsou nezávislé, takže vlnová funkce je v jejich proměnných separabilní. Řešení (78) tedy můžeme přímo zobecnit pro všechny mody

$$\Psi_0(\{A\}) = \prod_{\lambda\pm\mathbf{q}} \Psi_{\lambda\pm\mathbf{q}}^0 = \exp \left[- \sum_{\lambda\mathbf{q}} \left(\frac{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}{2\hbar} |A_{\lambda\mathbf{q}}|^2 - \frac{1}{2} \ln \frac{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}{\pi\hbar} \right) \right]. \quad (79)$$

Proti (78) obsahuje argument výrazu (79) faktor 1/2. Ten kompenzuje skutečnost, že v sumě argumentu (79) se každá dvojice stavů $\lambda \pm \mathbf{q}$ objeví dvakrát, neboť suma obsahuje \mathbf{q} i $-\mathbf{q}$.

Vlnová funkce ukazuje, že amplitudy potenciálů jsou rozděleny kolem nuly stejně jako souřadnice klidových oscilátorů. Toto rozdělení amplitud se někdy nazývá kvantové fluktuace pole.

7

$$\begin{aligned} Q_{\lambda\mathbf{q}} &= -i\hbar \left(\frac{\partial x}{\partial A_{\lambda\mathbf{q}}} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial A_{\lambda\mathbf{q}}} \frac{\partial}{\partial y} \right) = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ Q_{\lambda-\mathbf{q}} &= -i\hbar \left(\frac{\partial x}{\partial A_{\lambda-\mathbf{q}}} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial A_{\lambda-\mathbf{q}}} \frac{\partial}{\partial y} \right) = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right). \end{aligned}$$

Přestože amplitudy vektorového potenciálu nabývají nenulových hodnot s pravděpodobností danou kvadrátem vlnové funkce, klasické hodnoty polí jsou ve vakuu nulové. Skutečně, podle podmínky (71) je $\langle \emptyset | a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger | \emptyset \rangle = 0$ i $\langle \emptyset | a_{\lambda\mathbf{q}} | \emptyset \rangle = 0$ pro všechny mody, takže všechny střední hodnoty vymizí, např. $\mathcal{E}_T = \langle \emptyset | \mathbf{E}_T | \emptyset \rangle = 0$.

4.2 Stav s jedním fotonem

Nejjednodušší excitované stavy systému jsou stavy s jedním fotonem. Vlnovou funkci těchto stavů získáme působením kreačního operátoru na vakuum,⁸

$$|1_{\lambda\mathbf{q}}\rangle = a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger | \emptyset \rangle. \quad (80)$$

Energie stavu s jedním fotonem je $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$, jak se přesvědčíme ze Schrödingerovy rovnice

$$H_T |1_{\lambda\mathbf{q}}\rangle = H_T a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger | \emptyset \rangle = a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger (H_T + \hbar\omega_{\mathbf{q}}) | \emptyset \rangle = \hbar\omega_{\mathbf{q}} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger | \emptyset \rangle = \hbar\omega_{\mathbf{q}} |1_{\lambda\mathbf{q}}\rangle. \quad (81)$$

Při úpravě jsme použili nulovou energii vakua $H_T | \emptyset \rangle = 0$ a komutátor kreačního operátoru s Hamiltoniánem⁹

$$H_T a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger = a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger (H_T + \hbar\omega_{\mathbf{q}}). \quad (82)$$

4.3 Stav s ostrým počtem fotonů

Pokud je vybraný mod $\lambda\mathbf{q}$ vybuzen na $N_{\lambda\mathbf{q}}$ -tou hladinu, neboli je obsazen $N_{\lambda\mathbf{q}}$ fotony, jeho vlnová funkce je¹⁰

$$|N_{\lambda\mathbf{q}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_{\lambda\mathbf{q}}!}} a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger N_{\lambda\mathbf{q}}} | \emptyset \rangle. \quad (83)$$

⁸ Že je vlnová funkce $a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger | \emptyset \rangle$ správně normována $\langle \emptyset | a_{\lambda\mathbf{q}} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger | \emptyset \rangle = 1$ ukážeme třeba tak, že dosadíme komutátor $a_{\lambda\mathbf{q}} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger = a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}} + 1$, použijeme $a_{\mu\mathbf{k}} | \emptyset \rangle = 0$ a normu vakuového stavu $\langle \emptyset | \emptyset \rangle = 1$.

⁹ Komutátor (82) spočteme pomocí komutačních relací (35),

$$\begin{aligned} H_T a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger &= \sum_{\mu\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} a_{\mu\mathbf{k}}^\dagger a_{\mu\mathbf{k}} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger = \sum_{\mu\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} a_{\mu\mathbf{k}}^\dagger (a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\mu\mathbf{k}} + \delta_{\mu\mathbf{k}\lambda\mathbf{q}}) = \sum_{\mu\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} (a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\mu\mathbf{k}}^\dagger a_{\mu\mathbf{k}} + a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger \delta_{\mu\mathbf{k}\lambda\mathbf{q}}) \\ &= a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger \sum_{\mu\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} (a_{\mu\mathbf{k}}^\dagger a_{\mu\mathbf{k}} + \delta_{\mu\mathbf{k}\lambda\mathbf{q}}) = a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger (H_T + \hbar\omega_{\mathbf{q}}) \end{aligned}$$

¹⁰ Norma $\langle N_{\lambda\mathbf{q}} | N_{\lambda\mathbf{q}} \rangle = 1$ se dokáže postupným uplatněním komutací, $a_{\lambda\mathbf{q}}^{N_{\lambda\mathbf{q}}} a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger N_{\lambda\mathbf{q}}} = a_{\lambda\mathbf{q}}^{N_{\lambda\mathbf{q}}-1} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger N_{\lambda\mathbf{q}}} a_{\lambda\mathbf{q}} + N_{\lambda\mathbf{q}} a_{\lambda\mathbf{q}}^{N_{\lambda\mathbf{q}}-1} a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger N_{\lambda\mathbf{q}}-1}$. První člen nepřispívá, neboť $a_{\lambda\mathbf{q}} | \emptyset \rangle = 0$. Ukázali jsme tedy, že $a_{\lambda\mathbf{q}}^{N_{\lambda\mathbf{q}}} a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger N_{\lambda\mathbf{q}}} | \emptyset \rangle = N_{\lambda\mathbf{q}} a_{\lambda\mathbf{q}}^{N_{\lambda\mathbf{q}}-1} a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger N_{\lambda\mathbf{q}}-1} | \emptyset \rangle$. Opakováním kroku najdeme $a_{\lambda\mathbf{q}}^{N_{\lambda\mathbf{q}}} a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger N_{\lambda\mathbf{q}}} | \emptyset \rangle = N_{\lambda\mathbf{q}}! | \emptyset \rangle$.

Opakovaným použitím komutátoru (82) ukážeme, že energie je rovna energetickému kvantu vynásobenému počtem fotonů,

$$H_T|N_{\lambda\mathbf{q}}\rangle = N_{\lambda\mathbf{q}}\hbar\omega_{\mathbf{q}}|N_{\lambda\mathbf{q}}\rangle. \quad (84)$$

Nyní dokážeme sestrojít libovolný stav s ostrým počtem fotonů. Známe-li počty fotonů v jednotlivých módech, $\{N\} \equiv \dots, N_{\lambda\mathbf{q}}, \dots$, pak vlnová funkce je

$$|\{N\}\rangle = \left(\prod_{\lambda\mathbf{q}} \frac{1}{\sqrt{N_{\lambda\mathbf{q}}!}} a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger N_{\lambda\mathbf{q}}} \right) |\emptyset\rangle. \quad (85)$$

Energie složeného stavu je součet energetických kvant přes všechny fotony,

$$H_T|\{N\}\rangle = \sum_{\lambda\mathbf{q}} N_{\lambda\mathbf{q}}\hbar\omega_{\mathbf{q}}|\{N\}\rangle. \quad (86)$$

Stavy s ostrým počtem fotonů nejsou vhodné pro popis polí, u nichž dokážeme měřit velikost buď elektrického nebo magnetického pole. Měřené hodnoty polí jsou středními hodnotami operátorů polí, jak je popisuje rovnice (68) pro elektrické pole. Střední hodnota elektrického pole pro stavy s ostrým počtem fotonů je vždy nulová,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_T(\mathbf{r}) &= \langle \{N\} | \mathbf{E}_T(\mathbf{r}) | \{N\} \rangle \\ &= -i \sum_{\lambda\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon}} \langle N_{\lambda\mathbf{q}} | \left(\mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}}(\mathbf{r}) a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger} - \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r}) a_{\lambda\mathbf{q}} \right) | N_{\lambda\mathbf{q}} \rangle \\ &= 0. \end{aligned} \quad (87)$$

Nulová hodnota elektrického pole plyne z ortogonalitavy stavů s různým počtem fotonů, $\langle N_{\lambda\mathbf{q}} | (N+1)_{\lambda\mathbf{q}} \rangle = 0$, neboli $\langle N_{\lambda\mathbf{q}} | a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger} | N_{\lambda\mathbf{q}} \rangle = 0$. Vztah $\langle N_{\lambda\mathbf{q}} | a_{\lambda\mathbf{q}} | N_{\lambda\mathbf{q}} \rangle = 0$ je Hermitovsky sdružený. Podobně lze dokázat i nulovou střední hodnotu magnetického pole.

4.4 Nestacionární stavy

Pro radiové vlny, což je elektromagnetické pole s nízkými frekvencemi, je elektrické i magnetické pole přesně měřitelné. Takové vlny nelze popsat jako čistý stav ostrého počtu fotonů.

Podle Maxwellových rovnic se elektrické pole vlny mění v čase. Stavy s ostrým počtem částic jsou vlastní stavy Hamiltoniánu a jsou

tedy stacionární. Pro popis časově závislých polí musíme použít vlnové funkce, které nepředstavují vlastní stavy Hamiltoniánu. Jinými slovy, musíme hledat vlnové funkce, které jsou lineární kombinací vlastních stavů s různými energiemi.

Nejjednodušší lineární kombinací je součet dvou sousedních vybuzených stavů jednoho modu,

$$|\Psi\rangle = c_N |N_{\lambda\mathbf{q}}\rangle + c_{N-1} |(N-1)_{\lambda\mathbf{q}}\rangle. \quad (88)$$

Elektrické pole v tomto kvantovém stavu je skutečně nenulové

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_T(\mathbf{r}) &= \langle \Psi | \mathbf{E}_T(\mathbf{r}) | \Psi \rangle \\ &= -i \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon}} \left(\bar{c}_N \langle N_{\lambda\mathbf{q}} | + \bar{c}_{N-1} \langle (N-1)_{\lambda\mathbf{q}} | \right) \\ &\quad \times \left(\mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}}(\mathbf{r}) a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger - \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r}) a_{\lambda\mathbf{q}} \right) \left(c_N |N_{\lambda\mathbf{q}}\rangle + c_{N-1} |(N-1)_{\lambda\mathbf{q}}\rangle \right) \\ &= -i \mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon}} \bar{c}_N c_{N-1} \langle N_{\lambda\mathbf{q}} | a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger | (N-1)_{\lambda\mathbf{q}} \rangle \\ &\quad + i \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon}} \bar{c}_{N-1} c_N \langle (N-1)_{\lambda\mathbf{q}} | a_{\lambda\mathbf{q}} | N_{\lambda\mathbf{q}} \rangle \\ &= -\sqrt{\frac{N_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon}} i \left(\bar{c}_N c_{N-1} \mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}}(\mathbf{r}) - \bar{c}_{N-1} c_N \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \right). \quad (89) \end{aligned}$$

Podobně dosazením do rovnice (38) nalezneme nenulové magnetické pole $\mathcal{B}(\mathbf{r}) = \langle \Psi | \mathbf{B}(\mathbf{r}) | \Psi \rangle$

$$\mathcal{B}(\mathbf{r}) = -\sqrt{\frac{N_{\lambda\mathbf{q}} \hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}} i \left(\bar{c}_N c_{N-1} \mathbf{q} \times \mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}}(\mathbf{r}) - \bar{c}_{N-1} c_N \mathbf{q} \times \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \right). \quad (90)$$

Podívejme se, jak velkou energii bychom přisoudili tomuto stavu, pokud bychom změřili elektrické i magnetické pole a spočetli energii podle klasického vztahu (16),

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_T^{\text{kl}} &= \frac{\epsilon}{2} \int d\mathbf{r} \mathcal{E}_T(\mathbf{r}) \mathcal{E}_T(\mathbf{r}) + \frac{1}{2\mu} \int d\mathbf{r} \mathcal{B}(\mathbf{r}) \mathcal{B}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\epsilon}{2} \frac{N_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon} 2 |c_{N-1}|^2 |c_N|^2 + \frac{1}{2\mu} \frac{N_{\lambda\mathbf{q}} \hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}} q^2 2 |c_{N-1}|^2 |c_N|^2 \\ &= N_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} |c_{N-1}|^2 |c_N|^2. \quad (91) \end{aligned}$$

Z normy vlnové funkce $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ plyne normalizační podmínka pro koeficienty vlnové funkce $|c_{N-1}|^2 + |c_N|^2 = 1$. Jejich součin je vždy

menší než jedna čtvrtina, $|c_{N-1}|^2|c_N|^2 \leq \frac{1}{4}$, neboť funkce $a = x(1-x)$ má maximum $a = \frac{1}{4}$ pro $x = \frac{1}{2}$.

Našli jsme tedy, že pro vlnovou funkci (88) je klasicky spočtená energie elektromagnetického pole menší než čtvrtina kvantové hodnoty. Z experimentu s radiovými vlnami je známo, že energie přenášená vlnou je dostatečně přesně popsána klasickou hodnotou. Je zřejmé, že vlnová funkce (88) sice poskytuje nenulová pole, ale nepopisuje správně vlny typu radiových vln.

5 Koherentní stavy

Jednoduchá konstrukce vlnové funkce (88) není vhodná pro pole, které dokážeme natolik přesně proměřit či připravit, že je lze popsat klasickou elektrodynamikou. Nezbyvá nám, než přesně sformulovat, co musí klasické pole splňovat a z této podmínky vlnovou funkci najít.

5.1 Kvantová a klasická energie

Vyjdeme opět z energie. Všechny dosud uvažované vlnové funkce měli kvantovou energii vyšší než klasicky spočtenou hodnotu. Dokážeme, že klasicky spočtená energie musí být menší nebo rovna kvantové hodnotě.

Předpokládejme libovolný stav $|\psi\rangle$. Jako $|\psi'\rangle$ označíme všechny stavy kolmé na $|\psi\rangle$, takže relace úplnosti je $1 = |\psi\rangle\langle\psi| + \sum' |\psi'\rangle\langle\psi'|$. Suma \sum' probíhá podprostor stavů kolmých na $|\psi\rangle$.

Vložíme relaci úplnosti mezi operátory pole,

$$\begin{aligned} \langle\psi|\mathbf{E}_T(\mathbf{r})\mathbf{E}_T(\mathbf{r})|\psi\rangle &= \langle\psi|\mathbf{E}_T(\mathbf{r})(|\psi\rangle\langle\psi| + \sum' |\psi'\rangle\langle\psi'|)\mathbf{E}_T(\mathbf{r})|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\mathbf{E}_T(\mathbf{r})|\psi\rangle^2 + \sum' |\langle\psi'|\mathbf{E}_T(\mathbf{r})|\psi\rangle|^2. \end{aligned} \quad (92)$$

Poslední člen je nezáporný, takže střední hodnota kvadrátu pole (kvantová energie) je vždy větší nebo rovna kvadrátu středních hodnot (klasická energie). Totéž platí i pro magnetické pole, takže řečeno opačně – klasicky spočtená energie je menší nebo rovna kvantové hodnotě.

Jedním z příspěvků, které odlišují kvantovou a klasickou střední hodnotu kvadrátu pole je energie nulových kmitů. Tohoto příspěvku se zbavíme, když operátory ve střední hodnotě uspořádáme tak, aby

kreační ležely nalevo od anihilačních. Tomu se říká normální uspořádání. Pro jednoduchost si toto uspořádání zavedeme přímo pro pole. Rozložíme elektrické pole na kreační a anihilační složku,

$$\mathbf{E}_T = \mathbf{E}_T^+ + \mathbf{E}_T^-, \quad (93)$$

kde

$$\mathbf{E}_T^+(\mathbf{r}) = i \sum_{\lambda\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon}} \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r}) a_{\lambda\mathbf{q}} \quad (94)$$

a

$$\mathbf{E}_T^-(\mathbf{r}) = -i \sum_{\lambda\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon}} \mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}}(\mathbf{r}) a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger. \quad (95)$$

Je zjevné, že operátory jsou vzájemně sdružené, $(\mathbf{E}_T^+)^\dagger = \mathbf{E}_T^-$.

Střední hodnota kvadrátu (92) vyjádřená přes kreační a anihilační složky je

$$\begin{aligned} \langle \psi | \mathbf{E}_T(\mathbf{r}) \mathbf{E}_T(\mathbf{r}) | \psi \rangle &= \langle \psi | (\mathbf{E}_T^+(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_T^-(\mathbf{r})) (\mathbf{E}_T^+(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_T^-(\mathbf{r})) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \mathbf{E}_T^+(\mathbf{r}) \mathbf{E}_T^+(\mathbf{r}) | \psi \rangle + \langle \psi | \mathbf{E}_T^-(\mathbf{r}) \mathbf{E}_T^-(\mathbf{r}) | \psi \rangle \\ &+ \langle \psi | \mathbf{E}_T^-(\mathbf{r}) \mathbf{E}_T^+(\mathbf{r}) | \psi \rangle + \langle \psi | \mathbf{E}_T^+(\mathbf{r}) \mathbf{E}_T^-(\mathbf{r}) | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (96)$$

Pouze poslední má kreační oprátory vpravo od operátorů anihilačních a může být nenulový i pro stavy bez fotonů. Abychom vakuové příspěvky odstranili, definujeme normální střední hodnotu

$$\begin{aligned} \langle \psi | : \mathbf{E}_T(\mathbf{r}) \mathbf{E}_T(\mathbf{r}) : | \psi \rangle &= \langle \psi | \mathbf{E}_T^+(\mathbf{r}) \mathbf{E}_T^+(\mathbf{r}) | \psi \rangle + \langle \psi | \mathbf{E}_T^-(\mathbf{r}) \mathbf{E}_T^-(\mathbf{r}) | \psi \rangle \\ &+ \langle \psi | \mathbf{E}_T^-(\mathbf{r}) \mathbf{E}_T^+(\mathbf{r}) | \psi \rangle + \langle \psi | \mathbf{E}_T^+(\mathbf{r}) \mathbf{E}_T^-(\mathbf{r}) | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (97)$$

Kvantová energie bez vakuových příspěvků je dána normálními středními hodnotami.

Pokud chceme, aby se klasicky spočtená energie rovnala kvantové hodnotě, musíme najít takovou vlnovou funkci, aby pro každé $|\psi'\rangle$, pro něž $\langle \psi' | \psi \rangle = 0$, platilo buď

$$\langle \psi | \mathbf{E}_T^-(\mathbf{r}) | \psi' \rangle = 0 \quad \text{nebo} \quad \langle \psi' | \mathbf{E}_T^+(\mathbf{r}) | \psi \rangle = 0. \quad (98)$$

Současně požadujeme

$$\langle \psi | \mathbf{B}^-(\mathbf{r}) | \psi' \rangle = 0 \quad \text{nebo} \quad \langle \psi' | \mathbf{B}^+(\mathbf{r}) | \psi \rangle = 0. \quad (99)$$

5.2 Vlastní stav anihilačního operátoru

Rovnice (98) a (99) splňují vlnové funkce $|\psi\rangle \equiv |\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle$, které působením anihilačního operátoru změni pouze fázový faktor a normu,

$$a_{\lambda\mathbf{q}}|\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle = \alpha_{\lambda\mathbf{q}}|\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle \quad \text{neboli} \quad \langle\alpha_{\lambda\mathbf{q}}|a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger = \langle\alpha_{\lambda\mathbf{q}}|\bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}}. \quad (100)$$

Kvantovému stavu popsanému vlnovou funkcí $|\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle$ se říká koherentní stav.

Z rovnice (100) sestrojíme vlnovou funkci koherentního stavu. Napišme si ji v bazi vlastních stavů,

$$|\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} c_N a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger N} |\emptyset\rangle. \quad (101)$$

Dosadíme (101) do levé strany rovnice (100)

$$a_{\lambda\mathbf{q}}|\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} c_N a_{\lambda\mathbf{q}} a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger N} |\emptyset\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} N c_N a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger N-1} |\emptyset\rangle. \quad (102)$$

Použili jsme $a_{\lambda\mathbf{q}} a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger N} = a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger N} a_{\lambda\mathbf{q}} + N a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger N-1}$ a působení anihilačního operátoru na vakuum $a_{\lambda\mathbf{q}}|\emptyset\rangle = 0$. Rozvoj (102) představuje levou stranu (100). Na pravé straně (100) jsou koeficienty c_N pouze vynásobeny konstantou $\alpha_{\lambda\mathbf{q}}$. Srovnáním koeficientů pro $(N-1)$ -fotonový příspěvek na obou stranách najdeme

$$N c_N = \alpha_{\lambda\mathbf{q}} c_{N-1}, \quad \text{což řeší} \quad c_N = \frac{\alpha_{\lambda\mathbf{q}}^N}{N!} c_0, \quad (103)$$

kde c_0 je nultý člen a současně normovací konstanta. Suma (101) s koeficienty (103) má součet

$$|\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle = c_0 \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(\alpha_{\lambda\mathbf{q}} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger)^N}{N!} |\emptyset\rangle = c_0 e^{\alpha_{\lambda\mathbf{q}} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger} |\emptyset\rangle. \quad (104)$$

Ještě spočteme normu c_0 ,

$$\begin{aligned} 1 = \langle\alpha_{\lambda\mathbf{q}}|\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle &= \bar{c}_0 c_0 \sum_N \frac{\bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}}^N \alpha_{\lambda\mathbf{q}}^N}{N! N!} \langle\emptyset|a_{\lambda\mathbf{q}}^N a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger N}|\emptyset\rangle \\ &= \bar{c}_0 c_0 \sum_N \frac{(\bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}} \alpha_{\lambda\mathbf{q}})^N}{N!} \\ &= \bar{c}_0 c_0 e^{\bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}} \alpha_{\lambda\mathbf{q}}}. \end{aligned} \quad (105)$$

Pro jednoduchost bereme c_0 reálné, takže $c_0 = e^{-\frac{1}{2}\bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}}}$. Výsledná vlnová funkce koherentního stavu je

$$|\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle = e^{-\frac{1}{2}\bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}} + \alpha_{\lambda\mathbf{q}}a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger} |\emptyset\rangle. \quad (106)$$

Vlnové funkce dvou koherentních stavů o různých vlastních číslech $\alpha_{\lambda\mathbf{q}} \neq \beta_{\lambda\mathbf{q}}$ na sebe nejsou kolmé.¹¹ Projekce stavu (106) na jiný stav $\langle\beta_{\lambda\mathbf{q}}| = \langle\emptyset| e^{-\frac{1}{2}\bar{\beta}_{\lambda\mathbf{q}}\beta_{\lambda\mathbf{q}} + \bar{\beta}_{\lambda\mathbf{q}}a_{\lambda\mathbf{q}}}$ je rovna

$$\begin{aligned} \langle\beta_{\lambda\mathbf{q}}|\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle &= e^{-\frac{1}{2}(\bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}} + \bar{\beta}_{\lambda\mathbf{q}}\beta_{\lambda\mathbf{q}})} \langle\emptyset| e^{\bar{\beta}_{\lambda\mathbf{q}}a_{\lambda\mathbf{q}}} e^{\alpha_{\lambda\mathbf{q}}a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger} |\emptyset\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}(\bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}} + \bar{\beta}_{\lambda\mathbf{q}}\beta_{\lambda\mathbf{q}})} \sum_{M,N} \frac{\bar{\beta}_{\lambda\mathbf{q}}^M \alpha_{\lambda\mathbf{q}}^N}{M! N!} \langle\emptyset| a_{\lambda\mathbf{q}}^M a_{\lambda\mathbf{q}}^{\dagger N} |\emptyset\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}(\bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}} + \bar{\beta}_{\lambda\mathbf{q}}\beta_{\lambda\mathbf{q}})} \sum_N \frac{(\bar{\beta}_{\lambda\mathbf{q}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}})^N}{N!} \\ &= e^{-\frac{1}{2}(\bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}} + \bar{\beta}_{\lambda\mathbf{q}}\beta_{\lambda\mathbf{q}})} e^{\bar{\beta}_{\lambda\mathbf{q}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}}} \\ &= e^{-\frac{1}{2}(|\alpha_{\lambda\mathbf{q}} - \beta_{\lambda\mathbf{q}}|^2 + i(\bar{\beta}_{\lambda\mathbf{q}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}} - \bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}}\beta_{\lambda\mathbf{q}}))}. \end{aligned} \quad (107)$$

Překryv vlnových funkcí $|\langle\beta_{\lambda\mathbf{q}}|\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle|^2 = e^{-|\alpha_{\lambda\mathbf{q}} - \beta_{\lambda\mathbf{q}}|^2}$ klesá exponenciálně s kvadrátem vzdálenosti vlastních čísel v komplexní rovině. Z výrazu (107) je zřejmé, že koherentní stavy netvoří ortonormální basi v Hilbertově prostoru. To trochu ztěžuje jejich použití, protože nemůžeme rozkládat vlnové funkce do koherentních stavů pouhým vložením relace úplnosti (rozklad operátorové jedničky v žádané basi) do skalárních nebo maticových součinů.

5.3 Operátor posuvu

Nakonec si koherentní stav přepíšeme do často užívaného tvaru. Za tím účelem vložíme před ket vakua operátor, který na něj působí stejně jako identita, $e^{\beta a_{\lambda\mathbf{q}}} |\emptyset\rangle = |\emptyset\rangle$, takže

$$\begin{aligned} |\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle &= e^{-\frac{1}{2}\bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}}} e^{\alpha_{\lambda\mathbf{q}}a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger} |\emptyset\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}\bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}}} e^{\alpha_{\lambda\mathbf{q}}a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger} e^{\beta a_{\lambda\mathbf{q}}} |\emptyset\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}\bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}}} e^{-\frac{1}{2}\beta\alpha_{\lambda\mathbf{q}}} e^{(\alpha_{\lambda\mathbf{q}}a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger + \beta a_{\lambda\mathbf{q}})} |\emptyset\rangle. \end{aligned} \quad (108)$$

¹¹Pro Hermitovský operátor $A = A^\dagger$ je kolmost dvou vlastních stavů s různými vlastními čísly nutná, neboť z $A|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ sdružeností plyne $\langle\alpha|A = \langle\alpha|\alpha$. Potom $\langle\beta|A|\alpha\rangle = \alpha\langle\beta|\alpha\rangle$, ale i $\langle\beta|A|\alpha\rangle = \beta\langle\beta|\alpha\rangle$. Pro $\alpha \neq \beta$ lze oba vztahy splnit jen když $\langle\beta|\alpha\rangle = 0$. Tento důkaz nelze použít pro vlastní stavy anihilačního operátoru, protože ten není Hermitovský, $a \neq a^\dagger$.

Při úpravě jsme použili identitu¹²

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]} \quad (109)$$

a komutátor $[a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger, a_{\lambda\mathbf{q}}] = -1$. Volbou $\beta = -\bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}}$ zjednodušíme výraz pro koherentní stav na

$$|\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle = e^{(\alpha_{\lambda\mathbf{q}} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger - \bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}} a_{\lambda\mathbf{q}})} |\emptyset\rangle. \quad (110)$$

Podle výrazu (110) vzniká koherentní stav působením operátoru

$$\mathcal{D}_\alpha = e^{(\alpha a^\dagger - \bar{\alpha} a)} \quad (111)$$

na vakuum. Tento operátor je unitární, neboť argument $\alpha a^\dagger - \bar{\alpha} a$ je anti-hermitovský operátor. Operátor \mathcal{D}_α se nazývá operátor posuvu, neboť

$$\mathcal{D}_\alpha^\dagger a \mathcal{D}_\alpha = a + \alpha \quad \text{a} \quad \mathcal{D}_\alpha^\dagger a^\dagger \mathcal{D}_\alpha = a^\dagger + \bar{\alpha}. \quad (112)$$

Čtenář si může vyzkoušet, že operátory \mathcal{D} a identitu (109) lze výhodně použít třeba pro výpočet skalárního součinu (107).

¹²Pro důkaz této identity zavedeme operátor $U_\tau = e^{A+\tau B}$. Zjevně $U_0 = e^A$ a $U_1 = e^{A+B}$. Pro $\delta \ll 1$ je

$$\begin{aligned} U_{\tau+\delta} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (A + \tau B + \delta B)^n \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (A + \tau B)^n + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{m=0}^{n-1} (A + \tau B)^{n-1-m} \delta B (A + \tau B)^m \\ &= U_\tau + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{m=0}^{n-1} (A + \tau B)^{n-1} \delta B + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{m=0}^{n-1} m (A + \tau B)^{n-2} [\delta B, A + \tau B] \\ &= U_\tau + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} n (A + \tau B)^{n-1} \delta B + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{n(n-1)}{2} (A + \tau B)^{n-2} [\delta B, A + \tau B] \\ &= U_\tau + U_\tau \delta B + U_\tau \frac{1}{2} [\delta B, A + \tau B] = U_\tau \left(1 + \delta B + \delta \frac{1}{2} [B, A] \right). \end{aligned}$$

Rozložili jsme exponentu do řady a zachovali členy do prvního řádu v δ . Nultý řád je triviální. V prvním řádu prokomutujeme operátory δB napravo. Komutátor $[\delta B, A + \tau B]$ je číslo, které můžeme vytknout za součin operátorů. Je-li δB na m -té pozici zprava, dostaneme přeuspořádáním m komutátorů.

Pro $\delta = 1/N$ vyjádříme $U_1 = U_0 + \frac{1}{N} + \frac{1}{N} + \dots + \frac{1}{N}$, kde malé oprava je přidána N -krát,

$$U_1 = U_0 \left(1 + \frac{1}{N} \left(B + \frac{1}{2} [B, A] \right) \right)^N.$$

V limitě nekonečně mnoha kroků, $N \rightarrow \infty$, přechází mocnina na exponentu

$$U_1 = U_0 e^{B + \frac{1}{2}[B,A]},$$

neboli

$$e^{A+B} = e^A e^{B + \frac{1}{2}[B,A]}.$$

5.4 Vztah koherentního stavu a klasického pole

Pozorovatelná hodnota elektrického pole odpovídající koherentnímu stavu (100) je

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_T(\mathbf{r}) &= \langle \alpha_{\lambda\mathbf{q}} | \mathbf{E}_T(\mathbf{r}) | \alpha_{\lambda\mathbf{q}} \rangle \\
&= -i \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon}} \langle \alpha_{\lambda\mathbf{q}} | \left(\mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}}(\mathbf{r}) a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger - \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r}) a_{\lambda\mathbf{q}} \right) | \alpha_{\lambda\mathbf{q}} \rangle \\
&= -i \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon}} \left(\mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}} - \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \alpha_{\lambda\mathbf{q}} \right). \tag{113}
\end{aligned}$$

Podobně můžeme vyhodnotit i magnetické pole.

Vzhledem k tomu, že elektrické pole osciluje s frekvencí $\omega_{\mathbf{q}} = cq$, musí se měnit i koherentní stav. Časovou závislost koherentního stavu spočteme z evolučního operátoru

$$\begin{aligned}
|\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle_t &= e^{-i\frac{1}{\hbar}H_T t} |\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle \\
&= e^{-i\frac{1}{\hbar}H_T t} e^{-\frac{1}{2}\bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}}} e^{\alpha_{\lambda\mathbf{q}}a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger} |\emptyset\rangle \\
&= e^{-\frac{1}{2}\bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}}} e^{\alpha_{\lambda\mathbf{q}}a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger e^{-i\omega_{\mathbf{q}}t}} e^{-i\frac{1}{\hbar}H_T t} |\emptyset\rangle \\
&= |\alpha_{\lambda\mathbf{q}} e^{-i\omega_{\mathbf{q}}t}\rangle. \tag{114}
\end{aligned}$$

Nejprve jsme vybrali počáteční podmínku tím, že jsme ztotožnili počáteční stav v čase $t = 0$ se stavem $|\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle$. Hamiltonián nezávisí na čase, takže evoluční operátor je jednoduchou exponentou s Hamiltoniánu násobeného časem. Další vyhodnocení výrazu používá rozpis koherentního stavu do base stavů s ostrým počtem fotonů a komutaci kreačního operátoru s Hamiltoniánem (82), ze které plyne $e^{-i\frac{1}{\hbar}H_T t} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger = a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger e^{-i\frac{1}{\hbar}(H_T + \omega_{\mathbf{q}})t} = a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger e^{-i\omega_{\mathbf{q}}t} e^{-i\frac{1}{\hbar}H_T t}$. Fázový faktor, který doprovází anihilační operátor, přidružíme k vlastnímu číslu. Nakonec použijeme $H_T |\emptyset\rangle = 0$, takže $e^{-i\frac{1}{\hbar}H_T t} |\emptyset\rangle = |\emptyset\rangle$.

Časově závislá pozorovatelná hodnota elektrického pole tedy je

$$\mathcal{E}_T(\mathbf{r}, t) = -i \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon}} \left(\mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \bar{\alpha}_{\lambda\mathbf{q}} e^{i\omega_{\mathbf{q}}t} - \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \alpha_{\lambda\mathbf{q}} e^{-i\omega_{\mathbf{q}}t} \right). \tag{115}$$

Vynásobíme-li (115) funkcí $\mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ a integrujeme přes objem, najdeme, že hodnoty $\alpha_{\lambda\mathbf{q}}$ jsou úměrné Fourierovským koeficientům elek-

trického pole,

$$\mathcal{E}_{\lambda\mathbf{q}} = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon}} (\bar{\alpha}_{\lambda-\mathbf{q}}e^{i\omega_{\mathbf{q}}t} - \alpha_{\lambda\mathbf{q}}e^{-i\omega_{\mathbf{q}}t}). \quad (116)$$

Tento vztah nám dovoluje přiřadit vlastní čísla k Fourierovským složkám elektrického pole. Pro přiřazení je nutné znát i časovou závislost pole. Ještě pohodlnější je přiřazení k potenciálu

$$\mathcal{A}_{\lambda\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}} (\bar{\alpha}_{\lambda-\mathbf{q}}e^{i\omega_{\mathbf{q}}t} + \alpha_{\lambda\mathbf{q}}e^{-i\omega_{\mathbf{q}}t}). \quad (117)$$

Vlnovou funkci systému, jehož klasická a kvantová energie jsou si rovny, můžeme tedy přímo vyjádřit z Fourierových složek elektrického pole. Tyto stavy jsou vhodné pro popis elektromagnetického záření, které je téměř klasické.

5.5 A-representace koherentního stavu

Podívejme se, jak koherentní stav vypadá v \mathbf{A} -representaci, kdy amplituda vektorového potenciálu hraje úlohu souřadnice harmonického oscilátoru.

Kvantový stav najdeme ze Schrödingerových rovnic

$$(a_{\lambda\mathbf{q}} - \alpha_{\lambda\mathbf{q}})|\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle = 0, \quad a_{\lambda-\mathbf{q}}|\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle = 0, \quad (118)$$

které můžeme přepsat na

$$(a_{\lambda\mathbf{q}} + a_{\lambda-\mathbf{q}} - \alpha_{\lambda\mathbf{q}})|\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle = 0, \quad i(a_{\lambda\mathbf{q}} - a_{\lambda-\mathbf{q}} - \alpha_{\lambda\mathbf{q}})|\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\rangle = 0. \quad (119)$$

Vyjádríme-li tyto rovnice pomocí proměnných x a y , najdeme, že diferenciální rovnice jsou totožné s rovnicemi (77), pokud zaměníme x a y za

$$x' = x - \sqrt{\frac{2\hbar}{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}} \quad \text{a} \quad y' = y + i\sqrt{\frac{2\hbar}{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}}. \quad (120)$$

Vlnová funkce v těchto proměnných¹³

$$\begin{aligned} \langle \{\mathbf{A}\} | \alpha_{\lambda\mathbf{q}} \rangle &\equiv \Psi_{\lambda\pm\mathbf{q}}^{\alpha_{\lambda\mathbf{q}}} = \frac{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}{\pi\hbar} e^{-\frac{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}{4\hbar}(x'^2+y'^2)} \\ &= \frac{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}{\pi\hbar} e^{-\frac{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}{\hbar}\left(A_{\lambda\mathbf{q}} - \sqrt{\frac{2\hbar}{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\right)A_{\lambda-\mathbf{q}}} \end{aligned} \quad (121)$$

¹³

$$x'^2 + y'^2 = \left(x - \sqrt{\frac{2\hbar}{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\right)^2 + \left(y + i\sqrt{\frac{2\hbar}{\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}}\alpha_{\lambda\mathbf{q}}\right)^2$$

má očekávaný tvar. Maximum amplitudy vektorového potenciálu je posunuto na pozorovatelnou hodnotu. Koherentní stav je rozmazán kolem měřené hodnoty stejným způsobem jako vakuový stav kolem nuly.

6 Stlačené stavy

Při zavádění koherentních stavů jsme hledali kvantový stav, jehož kvadrát elektrického pole má pouze nutné fluktuační dané fluktuačními pole ve vakuovém stavu. V rozkladu do amplitud najdeme fluktuační

$$\begin{aligned}\Delta \mathbf{E}_T^2(\mathbf{r}) &= \langle \alpha | \mathbf{E}_T^2(\mathbf{r}) | \alpha \rangle - |\langle \alpha | \mathbf{E}_T(\mathbf{r}) | \alpha \rangle|^2 \\ &= \sum_{\lambda \mathbf{q}} \mathbf{f}_{\lambda \mathbf{q}}(\mathbf{r}) \mathbf{f}_{\lambda - \mathbf{q}}(\mathbf{r}) \frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon} \\ &= 2 \sum_{\lambda \mathbf{q}} \frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}}}{2\Omega \epsilon}.\end{aligned}\quad (122)$$

Příspěvek jednoho modu k fluktuačním pole v koherentním stavu je tedy $\hbar \omega_{\mathbf{q}}/2\Omega \epsilon$.

Je možné najít stavy s ještě nižšími fluktuačními elektrického pole. Těmto stavům se říká (squeezed states) stlačené stavy.

6.1 Stlačené vakuum

Pro vybravý mod $\lambda \mathbf{q}$ zavedeme operátor stlačení

$$\mathcal{S}_\zeta = e^{\frac{1}{2}\bar{\zeta}a^2 - \frac{1}{2}\zeta a^{\dagger 2}}, \quad (123)$$

kde $\zeta = s e^{i\vartheta}$ je komplexní parametr stlačení. Tento operátor je unitární, neboť $\mathcal{S}_\zeta^\dagger = \mathcal{S}_{-\zeta}$, takže $\mathcal{S}_\zeta^\dagger \mathcal{S}_\zeta = 1$. Indexy modu pro jednoduchost nepíšeme.

Bez důkazu uvádíme, že stav vzniklý působením operátoru stlačení na vakuum má rozklad do vlastních stavů Hamiltoniánu

$$\begin{aligned}|\zeta\rangle &= \mathcal{S}_\zeta |\emptyset\rangle = \frac{1}{\sqrt{\text{sh}s}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sqrt{(2n)!}}{n!} \left(-\frac{1}{2}e^{i\vartheta} \text{th}s\right)^n |2n\rangle. \\ &= \left(A_{\lambda \mathbf{q}} + A_{\lambda - \mathbf{q}} - \sqrt{\frac{2\hbar}{\epsilon \omega_{\mathbf{q}}}} \alpha_{\lambda \mathbf{q}}\right)^2 + \left(-i(A_{\lambda \mathbf{q}} - A_{\lambda - \mathbf{q}}) + i\sqrt{\frac{2\hbar}{\epsilon \omega_{\mathbf{q}}}} \alpha_{\lambda \mathbf{q}}\right)^2 \\ &= 4 \left(A_{\lambda \mathbf{q}} - \sqrt{\frac{2\hbar}{\epsilon \omega_{\mathbf{q}}}} \alpha_{\lambda \mathbf{q}}\right) A_{\lambda - \mathbf{q}}.\end{aligned}\quad (124)$$

Použili jsme definice x a y dané rovnicemi (74).

Tento stav se nazývá stlačené vakuum.

Rozklad (124) nebudeme potřebovat. K vyhodnocení pozorovatelných veličin budeme používat operátorovou identitu¹⁴

$$e^{-A} B e^A = B + [B, A] + \frac{1}{2!} [[B, A], A] + \dots \quad (125)$$

Označíme $\hat{L}_\zeta B = [B, \frac{1}{2}\bar{\zeta}a^2 - \frac{1}{2}\zeta a^{\dagger 2}]$. Přímoú komutací najdeme, že působení \hat{L}_ζ zaměňuje kreační a anihilační operátory,

$$\hat{L}_\zeta a = -\zeta a^\dagger \quad \hat{L}_\zeta a^\dagger = -\bar{\zeta} a. \quad (126)$$

Tento jednoduchý cyklický vztah dovoluje vyhodnotit libovolný řád komutátoru. Pro sudé řády platí

$$\hat{L}_\zeta^{2n} a = \bar{\zeta}^n \zeta^n a = s^{2n} a \quad (127)$$

a pro liché řády

$$\hat{L}_\zeta^{2n+1} a = -\zeta^{n+1} \bar{\zeta}^n a^\dagger = -e^{i\vartheta} s^{2n+1} a^\dagger. \quad (128)$$

Každou operaci musíme rozložit na sudé a liché členy, které vyhodnotíme odděleně. Působení na anihilační operátor je¹⁵

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_\zeta^\dagger a \mathcal{S}_\zeta &= e^{\hat{L}_\zeta} a \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} s^{2n} a - e^{i\vartheta} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} s^{2n+1} a^\dagger \\ &= \text{chs } a - e^{i\vartheta} \text{shs } a^\dagger. \end{aligned} \quad (129)$$

Komplexním sdružením nebo obdobou provedených úprav najdeme

$$\mathcal{S}_\zeta^\dagger a^\dagger \mathcal{S}_\zeta = \text{chs } a^\dagger - e^{-i\vartheta} \text{shs } a. \quad (130)$$

¹⁴Označíme $\hat{L}B = [B, A]$, neboli $[[B, A], A] = \hat{L}^2 B$. Potom z rozkladu n -tého komutátoru do binomických čísel,

$$\hat{L}^n B = \sum_{m=0}^n \binom{n}{m} (-A)^m B A^{n-m} \quad \text{kde} \quad \binom{n}{m} = \frac{n!}{m!(n-m)!},$$

plyne, že pravá strana (125) je rovna levé,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{L}^n B = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{1}{m!} (-A)^m B \frac{1}{(n-m)!} A^{n-m} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} (-A)^m B \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} A^j = e^{-A} B e^A.$$

¹⁵Používá zkrácené značení hyperbolických funkcí

$$\text{shs} = \frac{e^s - e^{-s}}{2} \quad \text{a} \quad \text{chs} = \frac{e^s + e^{-s}}{2}.$$

Nyní se můžeme podívat na pozorovatelné. Střední hodnota elektrického pole ve stlačeném vakuu je nutně nulová, neboť stlačení mění pouze sudé vlastní stavy, viz (124), zatímco pole vyžaduje elementy mezi sudými a lichými stavy. Jelikož jsme rozklad (124) nedokázali, snadno se přesvědčíme o nulovém poli přímým dosazením,

$$\begin{aligned}
\langle \zeta | \mathbf{E}_T | \zeta \rangle &= \langle \emptyset | \mathcal{S}_\zeta^\dagger \mathbf{E}_T \mathcal{S}_\zeta | \emptyset \rangle \\
&= -i \sqrt{\frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon}} \left(\mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}} \langle \emptyset | \mathcal{S}_\zeta^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger \mathcal{S}_\zeta | \emptyset \rangle - \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}} \langle \emptyset | \mathcal{S}_\zeta^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}} \mathcal{S}_\zeta | \emptyset \rangle \right) \\
&= -i \sqrt{\frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon}} \left(\mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}} \left(\text{chs} \langle \emptyset | a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger | \emptyset \rangle - e^{-i\vartheta} \text{shs} \langle \emptyset | a_{\lambda\mathbf{q}} | \emptyset \rangle \right) \right. \\
&\quad \left. - \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}} \left(\text{chs} \langle \emptyset | a_{\lambda\mathbf{q}} | \emptyset \rangle - e^{i\vartheta} \text{shs} \langle \emptyset | a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger | \emptyset \rangle \right) \right) \\
&= 0. \tag{131}
\end{aligned}$$

Stlačení vakua nezmění střední hodnotu pole, ale projeví se již na jeho fluktuacích. Výpočet je zdlouhavý, ale přímočarý

$$\begin{aligned}
\Delta \mathbf{E}_T^2(\mathbf{r}) &= \langle \zeta | \mathbf{E}_T^2(\mathbf{r}) | \zeta \rangle - |\langle \zeta | \mathbf{E}_T(\mathbf{r}) | \zeta \rangle|^2 \\
&= \langle \zeta | \mathbf{E}_T^2(\mathbf{r}) | \zeta \rangle \\
&= \langle \emptyset | \mathcal{S}_\zeta^\dagger \mathbf{E}_T(\mathbf{r}) \mathcal{S}_\zeta \mathcal{S}_\zeta^\dagger \mathbf{E}_T(\mathbf{r}) \mathcal{S}_\zeta | \emptyset \rangle \\
&= -\frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon} \langle \emptyset | \left(\mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}} \mathcal{S}_\zeta^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger \mathcal{S}_\zeta - \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}} \mathcal{S}_\zeta^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}} \mathcal{S}_\zeta \right)^2 | \emptyset \rangle \\
&= -\frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon} \langle \emptyset | \left(\mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}} \left(\text{chs} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger - e^{-i\vartheta} \text{shs} a_{\lambda\mathbf{q}} \right) \right. \\
&\quad \left. - \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}} \left(\text{chs} a_{\lambda\mathbf{q}} - e^{i\vartheta} \text{shs} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger \right) \right)^2 | \emptyset \rangle \\
&= \frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon} \langle \emptyset | a_{\lambda\mathbf{q}} \left(\mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}} e^{-i\vartheta} \text{shs} + \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}} \text{chs} \right) \\
&\quad \times \left(\mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}} \text{chs} + \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}} e^{-i\vartheta} \text{shs} \right) a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger | \emptyset \rangle \\
&= \frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}}}{2\epsilon} \left(\mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}} e^{-i\vartheta} \text{shs} + \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}} \text{chs} \right) \left(\mathbf{f}_{\lambda-\mathbf{q}} \text{chs} + \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}} e^{-i\vartheta} \text{shs} \right) \\
&= \frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}}}{2\Omega\epsilon} \left(\text{ch}^2 s + e^{-2i\vartheta} \text{sh}^2 s + 2 \cos \mathbf{q}\mathbf{r} e^{-i\vartheta} \text{shschs} \right). \tag{132}
\end{aligned}$$

První řádek je definice. Ve druhém řádku využíváme, že střední hodnota pole je nulová. Ve třetím řádku dosazujeme stlačený stav a

mezi operátory pole vkládáme jedničku $\mathcal{S}_\zeta \mathcal{S}_\zeta^\dagger = 1$. Ve čtvrtém řádku dosujeme rozklad pole do modů (zde pouze jeden mod). V pátém řádku je provedena transformace kreačních a anihilačních operátorů podle (129) a (130). V šestém řádku jsou vyloučeny nulové členy $a|\emptyset\rangle = 0$ a $\langle\emptyset|a^\dagger = 0$. V sedmém řádku je vyhodnocen maticový element $\langle\emptyset|aa^\dagger|\emptyset\rangle = 1$. V osmém řádku jsou dosazeny normované vlny.

S výsledným tvarem fluktuace (132) si lze hrát pro různé hodnoty parametrů. Omezíme se na případ $\cos \mathbf{qr} = -1$ a $\vartheta = 0$. Potom $\Delta \mathbf{E}_T^2(\mathbf{r}) = e^{-2s}$, což je méně než fluktuace ve vakuu. Toto potlačení je vykoupeno nárůstem fluktuací v sousedních bodech, kde $\cos \mathbf{qr} = 1$, takže $\Delta \mathbf{E}_T^2(\mathbf{r}) = e^{2s}$.

6.2 Stlačený koherentní stav

Stlačené vakuum slouží jako výchozí stav pro stlačený koherentní stav,

$$|\alpha, \zeta\rangle = \mathcal{D}_\alpha \mathcal{S}_\zeta |\emptyset\rangle. \quad (133)$$

Rozklad tohoto stavu do stavů s ostrým počtem částic je úmorně dlouhý a nebudeme ho ani uvádět.

Pro výpočty pozorovatelných veličin opět poslouží transformace anihilačního operátoru

$$\mathcal{S}_\zeta^\dagger \mathcal{D}_\alpha^\dagger a \mathcal{D}_\alpha \mathcal{S}_\zeta = \mathcal{S}_\zeta^\dagger (a + \alpha) \mathcal{S}_\zeta = \text{chs } a - e^{i\vartheta} \text{shs } a^\dagger + \alpha \quad (134)$$

odvozená z (112) a (129), a sdružený vztah pro kreační operátor

$$\mathcal{S}_\zeta^\dagger \mathcal{D}_\alpha^\dagger a^\dagger \mathcal{D}_\alpha \mathcal{S}_\zeta = \mathcal{S}_\zeta^\dagger (a^\dagger + \bar{\alpha}) \mathcal{S}_\zeta = \text{chs } a^\dagger - e^{-i\vartheta} \text{shs } a + \bar{\alpha}. \quad (135)$$

Z transformačních vztahů snadno najdeme i Schrödingerovu rovnici pro vlnovou funkci. Základní rovnici pro vakuum $a|\emptyset\rangle = 0$, vynásobíme transformačními operátory $\mathcal{S}_\zeta \mathcal{D}_\alpha a|\emptyset\rangle = 0$. Mezi anihilační operátor a ket vložíme jedničku,

$$\begin{aligned} 0 &= \mathcal{S}_\zeta \mathcal{D}_\alpha a \mathcal{S}_\zeta^\dagger \mathcal{D}_\alpha^\dagger \mathcal{D}_\alpha \mathcal{S}_\zeta |\emptyset\rangle \\ &= \mathcal{S}_{-\zeta}^\dagger \mathcal{D}_{-\alpha}^\dagger a \mathcal{S}_{-\zeta} \mathcal{D}_{-\alpha} |\alpha, \zeta\rangle \\ &= (\text{chs } a + e^{i\vartheta} \text{shs } a^\dagger + \alpha) |\alpha, \zeta\rangle. \end{aligned} \quad (136)$$

Použili jsme definici stlačeného koherentního stavu (133), a vztahy pro inverzní operátory, $\mathcal{D}_\alpha^\dagger = \mathcal{D}_{-\alpha}$ a $\mathcal{S}_\zeta^\dagger = \mathcal{S}_{-\zeta}$. Další postup je obdobný výpočtu vlnové funkce vakua. Rovnici (136) zleva promítneme na vektor $\langle \{\mathbf{A}\} |$ a dosadíme kreační a anihilační operátory v \mathbf{A} -representaci.¹⁶

Stlačené koherentní stavy nejsou pouhou teoretickou hříčkou, nebo stavy připravenými za náročných experimentálních podmínek. Vznikají sami ve velmi výkonných laserech užívaných v současnosti pro krátkočasová měření. Teoretické popisy krátkočasové odezvy tuto skutečnost bohužel téměř vždy opomíjejí.

7 Smíšené stavy volného elektromagnetického pole

Doposud jsem se zabývali elektromagnetickým polem, jehož hodnoty známe natolik přesně, že můžeme stanovit jeho vlnovou funkci. Jinými slovy, předpokládali jsme, že o poli víme vše. Takový předpoklad je vhodný pro radiové vlny nebo světlo velmi stabilního laseru.

Většina zdrojů ale přesné stanovení elektromagnetického pole nedovoluje. Tepelné sálání je směsí nahodile vyzářených vln o různých vlnových číslech a polarizacích. Odrazem od povrchu kovu můžeme vybrat jednu z polarizací, ale světlo zůstane směsí vlnových čísel. Průchod temnou trubičkou vybere jen vlnová čísla v malém rozmezí směrů, ale zůstane směsí frekvencí. Difrakcí na mřížce (třeba krystalu pro Roentgenovy paprsky) vybereme velmi úzkou oblast vlnových čísel včetně frekvencí, užší než u světla z laseru, ale příspěvky jednotlivých modů v této úzké oblasti mají nahodilé fáze a jejich příspěvky k pozorovanému poli se vzájemně ruší. Nemáme vyhráno ani když dokážeme vyfiltrovat jediný mod $\lambda \mathbf{q}$, neboť jeho $1, 2, \dots, N, \dots$ -fotonové stavy mají obecně nahodilé fáze.

Pokud je naše znalost pole zatížena neznalostí některého z parametrů, nezbyvá nám, než jej pokládat za nahodilý a v teoretických předpovědích se omezit na střední hodnoty měřitelných veličin. Předpokládáme, že vlnová funkce může nabýt libovolné hodnoty $|\Psi\rangle$ s pravděpodobností ρ_Ψ . Systém je s jistotou v nějakém stavu, takže $\sum_\Psi \rho_\Psi = 1$.

¹⁶Výpočet vlnové funkce je vhodné cvičení, při kterém si čtenář vyzkouší jak poskládat řadu střípků dosud odvozených rovnic. I bez odvození je však zjevné, že jak efektivní souřadnice x , tak jí přidružený impuls $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ mají ve stlačeném stavu jiné koeficienty než ve vakuu. Díky tomu odpovídají stlačené stavy harmonickému oscilátoru se změněnou tuhostí.

Je-li nějaký stav $|\Phi\rangle$ vyloučen, pak prostě $\rho_\Phi = 0$. Střední hodnota měřitelné veličiny X je

$$\mathcal{X} = \sum_{\Psi} \rho_{\Psi} \langle \Psi | X | \Psi \rangle. \quad (137)$$

7.1 Matice hustoty

Součet přes všechny možné stavy pole představuje značně rozsáhlou sumu. I pro diskrétní vlnové vektory máme nekonečně modů, každý mod má nekonečně stavů, a navíc, libovolná lineární kombinace ze dvou již započtených stavů, $|\Xi\rangle = c_{\Psi}|\Psi\rangle + c_{\Phi}|\Phi\rangle$, představuje nový stav. Pokud máme součet (137) úspěšně vyhodnotit, musíme ho zjednodušit.

Abychom se zbavili součtů přes všechny možné lineární kombinace a mohli počítat pouze přes stavy báze, zavedeme tzv. matici hustoty

$$\hat{\rho} = \sum_{\Psi} |\Psi\rangle \rho_{\Psi} \langle \Psi|. \quad (138)$$

Střední hodnota měřitelné veličiny X je tedy formálně rovna stopě (Trace) součinu operátoru X s maticí hustoty

$$\mathcal{X} = \mathbf{Tr}(\hat{\rho}X) = \sum_{\psi, \phi \in \text{baze}} \langle \phi | \hat{\rho} | \psi \rangle \langle \psi | X | \phi \rangle = \sum_{\psi, \phi \in \text{baze}} \rho_{\phi\psi} X_{\psi\phi}. \quad (139)$$

Jak je naznačeno, tuto stopu již můžeme vyhodnotit v libovolné bázi. V dalším budeme uvažovat pouze rozvoje do báze a nebudeme tuto skutečnost u sum připomínat. Při rozvoje do báze musíme započíst i nediagonální elementy matice hustoty.

7.2 Tepelné záření

Všechny materiály sálají a jsou-li dostatečně horké je část sálaného záření ve viditelné oblasti. Podívejme se, jak popsat sálané vlny.

Jestliže je námi sledovaná část prostoru obklopena tělesy o stejné teplotě T – třeba uvnitř pece – záření je v teplotní rovnováze se svým okolím a má teplotní rozdělení. Rovnovážné rozdělení nezávisí na čase, takže je vhodné jej rozvíjet do stacionárních stavů, tedy vlastních stavů Hamiltoniánu $|\{N\}\rangle$.

Časová závislost vlastního stavu je

$$|\{N\}_t\rangle = e^{-i\omega_{\{N\}}t}|\{N\}\rangle, \quad \text{kde} \quad \omega_{\{N\}} = \sum_{\lambda\mathbf{q}} N_{\lambda\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{q}}. \quad (140)$$

Pro vlastní stavy Hamiltoniánu se časová závislost daná fázovým faktorem zruší, $|\{N\}_t\rangle\langle\{N\}_t| = |\{N\}\rangle\langle\{N\}|$. Pro kvantové stavy vzniklé lineární kombinací dvou nebo více vlastních stavů s různými energiemi $E_{\{N\}} = \hbar\omega_{\{N\}}$ se časová závislost nezruší.¹⁷ Lineární kombinace stavů s různou energií tedy nemohou přispívat ke stacionární matici hustoty. Díky tomuto omezení je matice hustoty diagonální v reprezentaci vlastních stavů Hamiltoniánu.

Podle Boltzmannova rozdělení pravděpodobnost obsazení stavu klesá exponenciálně s energií měřenou na škále teploty

$$\langle\{N\}|\hat{\rho}|\{N\}\rangle = Z e^{-\frac{E_{\{N\}}}{k_{\text{B}}T}}. \quad (141)$$

Protože nediagonální elementy jsou nulové, můžeme z Boltzmannova rozdělení sestavit matici hustoty

$$\hat{\rho} = Z \sum_{\{N\}} |\{N\}\rangle e^{-\frac{E_{\{N\}}}{k_{\text{B}}T}} \langle\{N\}| = Z e^{-\frac{H_{\text{T}}}{k_{\text{B}}T}} = \frac{e^{-\frac{H_{\text{T}}}{k_{\text{B}}T}}}{\mathbf{Tr}\left(e^{-\frac{H_{\text{T}}}{k_{\text{B}}T}}\right)}. \quad (142)$$

Použili jsme, že $|\{N\}\rangle$ tvoří úplnou bázi vlastních stavů Hamiltoniánu, $H_{\text{T}} = \sum_{\{N\}} |\{N\}\rangle E_{\{N\}} \langle\{N\}|$. Stopa ve jmenovateli poskytuje normu Z , zjevně platí $\mathbf{Tr}\hat{\rho} = 1$.

V teplotní rovnováze jsou střední hodnoty elektrického a magnetického pole nulové, $\mathcal{E}^{\text{T}} = \mathbf{Tr}(\hat{\rho}\mathbf{E}^{\text{T}}) = 0$ a $\mathcal{B} = \mathbf{Tr}(\hat{\rho}\mathbf{B}) = 0$. Podobně jako u čistých stavů nulová pole plynou z nulových polí vlastních stavů Hamiltoniánu $\langle\{N\}|a_{\lambda\mathbf{q}}|\{N\}\rangle = 0$. Nenulová pole jsou možná jen pro stavy s nenulovými nediagonálními elementy matice hustoty.

7.3 Energie tepelného záření

Střední hodnoty kvadrátů elektrického a magnetického pole, a tedy i střední energie, jsou v teplotní rovnováze nenulové. Jak známo, ener-

¹⁷ Třeba funkce (88), $|\Psi_t\rangle = e^{-iN\omega t}c_N|N\rangle + e^{-i(N-1)\omega t}c_{N-1}|N-1\rangle$, dává

$$|\Psi_t\rangle\langle\Psi_t| = |c_N|^2|N\rangle\langle N| + |c_{N-1}|^2|N-1\rangle\langle N-1| + c_N\bar{c}_{N-1}e^{-i\omega t}|N\rangle\langle N-1| + \bar{c}_N c_{N-1}e^{i\omega t}|N-1\rangle\langle N|$$

gie tepelného záření měla historický význam a otevřela celou kvantovou fyziku. Přepočtíme si tento starý problém moderním formalizmem druhého kvantování.

Hustota energie záření je

$$\mathcal{H}_T = \mathbf{Tr}(\hat{\rho}H_T) = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}}n_{\lambda\mathbf{q}}. \quad (143)$$

Dosadili jsme Hamiltonián (41), čímž jsme energii rozložili do příspěvků jednotlivých modů. Každý mod přispívá úměrně střednímu počtu fotonů v modu

$$n_{\lambda\mathbf{q}} = \mathbf{Tr}(\hat{\rho} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}}). \quad (144)$$

Spočteme střední počet fotonů. Přímo z definice (144) plyne¹⁸

$$\begin{aligned} n_{\lambda\mathbf{q}} &= \frac{1}{Z} \mathbf{Tr} \left(e^{-\frac{H_T}{k_B T}} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}} \right) \\ &= \frac{1}{Z} \mathbf{Tr} \left(a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger e^{-\frac{H_T + \hbar\omega_{\mathbf{q}}}{k_B T}} a_{\lambda\mathbf{q}} \right) \\ &= e^{-\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{k_B T}} \frac{1}{Z} \mathbf{Tr} \left(a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger e^{-\frac{H_T}{k_B T}} a_{\lambda\mathbf{q}} \right) \\ &= e^{-\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{k_B T}} \frac{1}{Z} \mathbf{Tr} \left(e^{-\frac{H_T}{k_B T}} a_{\lambda\mathbf{q}} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger \right) \\ &= e^{-\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{k_B T}} \frac{1}{Z} \mathbf{Tr} \left(e^{-\frac{H_T}{k_B T}} (a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}} + 1) \right) \\ &= e^{-\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{k_B T}} (n_{\lambda\mathbf{q}} + 1). \end{aligned} \quad (145)$$

Z posledního řádku (145) dostaneme, že střední počet fotonů je dán Bose-Einsteinovým rozdělením

$$n_{\lambda\mathbf{q}} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{k_B T}} - 1}. \quad (146)$$

Z Bose-Einsteinova rozdělení dopočítáme hustotu energie (143). Dosadíme frekvenci $\omega_{\mathbf{q}} = cq$ a nahradíme sumu integrálem. Ani frekvence ani střední počet fotonů nezávisí na polarizaci, takže součet přes λ vnese faktor 2. Frekvence nezávisí na směru vlnového vektoru, takže

¹⁸Nejprve jsme dosadili (142) do (144). Ve druhém řádku jsme použili komutaci (82). Ve třetím řádku je vytknut číselný faktor před stopou. Ve čtvrtém řádku je použita rotace operátorů pod stopou $\mathbf{Tr}(ABC) = \mathbf{Tr}(BCA)$. V pátém řádku jsme dosadili komutační relaci (35). V šestém řádku jsme použili první řádek a normu matice hustoty.

integrace po směrech přinese faktor $4\pi q^2$. Substitucí $x = \frac{\hbar c q}{k_B T}$ dostaneme integrál $\int_0^\infty dx x^3 / (e^x - 1) = \pi^4/15$. Odsud najdeme, že hustota energie elektromagnetického pole je úměrná čtvrté mocnině teploty

$$\mathcal{H}_T = \sum_{\lambda \mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} n_{\lambda \mathbf{q}} = \sum_{\lambda} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar c q}{e^{\frac{\hbar c q}{k_B T}} - 1} = \frac{\pi^2 k_B^4 T^4}{15 \hbar^3 c^3}. \quad (147)$$

7.4 Vedení tepla sáláním

Rovnovážné rozdělení se ustaví jen tehdy, je-li celý prostor obklopen tělesy o stejné teplotě. Podívejme se ale na případ, kdy z jedné strany je stěna o teplotě T_1 a z druhé je stěna o teplotě T_2 .

Pro jednoduchost uvažujeme stěny rovnoběžné a položíme je rovnoběžně s rovinou $y - z$. Stěna o T_1 leží vlevo od stěny T_2 , takže její záření letí v kladném směru. Obě stěny jsou dokonale černé, tj. neodráží žádné záření.

Záření v kladném směru $q_x > 0$ odpovídá teplotě levé stěny, v záporném směru $q_x < 0$ teplotě pravé stěny,

$$\begin{aligned} n_{\lambda \mathbf{q}} &= \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}}}{k_B T_1}} - 1} && \text{pro } q_x > 0, \\ n_{\lambda \mathbf{q}} &= \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}}}{k_B T_2}} - 1} && \text{pro } q_x < 0. \end{aligned} \quad (148)$$

V tomto rozdělení mají jednotlivé mody teplotní rozdělení, ale celkové rozdělení není rovnovážné.

Tok energie ve směru x je součtem energetických kvant od jednotlivých modů. Rychlost fotonu je c a její složka ve směru x je $v_x = c \frac{q_x}{q}$. Celkový tok tepla jednotkou plochy tedy je¹⁹

$$\mathcal{Q}^{\text{tepla}} = \sum_{\lambda \mathbf{q}} c \frac{q_x}{q} \hbar \omega_{\mathbf{q}} n_{\lambda \mathbf{q}} = \sum_{\lambda} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar c^2 q_x}{e^{\frac{\hbar c q}{k_B T}} - 1} = \frac{\pi^2 k_B^4 (T_1^4 - T_2^4)}{60 \hbar^3 c^3}. \quad (149)$$

Veličina $\sigma = \frac{\pi^2 k_B^4}{60 \hbar^3 c^3} = 5.6705 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{K}^4)$ se nazývá Stefan-Boltzmannův koeficient.

¹⁹Oproti výpočtu energie, kde úhlová integrace je $\int d\mathbf{q} \dots = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\theta \cos \theta \int_0^\infty dq q^2 \dots = 4\pi \int_0^\infty dq q^2 \dots$, zde pro $q_x = q \sin \theta > 0$ máme $\int_{q_x > 0} d\mathbf{q} \frac{q_x}{q} \dots = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \cos \theta \sin \theta \int_0^\infty dq q^2 \dots = \pi \int_0^\infty dq q^2 \dots$. Výpočet pro $q_x < 0$ je analogický.

7.5 Monochromatické světlo z tepelného zdroje

Mezi dvěma stěnami není rovnovážné rozdělení fotonů, ale jeho části $q_x > 0$ a $q_x < 0$ mají charakter teplotního rozdělení. Podívejme se, jak se zachová informace o teplotě zdroje pokud svazek proženeme soustavou, která zanechá fotony pouze v jediném modu $\lambda\mathbf{q}$. Takovou soustavou může být úzký otvor – ten vybere jediný směr vlnových vektorů, hranol – ten vybere jedinou barvu, a dvojlomný krystal nebo polarizační zrcátko – ty vyberou jednu polarizaci.

I ideálně monochromatické polarizované světlo si pamatuje teplotu zdroje. Filtrováním původního teplotního rozdělení odstraníme všechny fotony z jiných modů, takže

$$\hat{\rho} = Z \sum_{N_{\lambda\mathbf{q}}} |N_{\lambda\mathbf{q}}\rangle e^{-\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}N_{\lambda\mathbf{q}}}{k_{\text{B}}T}} \langle N_{\lambda\mathbf{q}}| = Z e^{-\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{k_{\text{B}}T} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}}}. \quad (150)$$

Normu Z spočteme ze stopy

$$\frac{1}{Z} = \mathbf{Tr} \left(e^{-\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{k_{\text{B}}T} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}}} \right) = \sum_{N_{\lambda\mathbf{q}}=0}^{\infty} e^{-\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}N_{\lambda\mathbf{q}}}{k_{\text{B}}T}} = \frac{1}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{k_{\text{B}}T}}}. \quad (151)$$

Matice hustoty dokonale monochromatického a polarizovaného světla z tepelného zdroje tedy je

$$\hat{\rho} = \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{k_{\text{B}}T}} \right) e^{-\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{k_{\text{B}}T} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}}}. \quad (152)$$

Reálné filtry nejsou ideální. Působním filtrů obvykle snížíme počet fotonů vybraného svazku. Tím vlastně zvýšíme podíl vakového stavu na celkovém rozdělení, takže rozdělení (151) musíme nahradit realističtějším

$$\hat{\rho} = (1 - S)|\emptyset\rangle\langle\emptyset| + S \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{k_{\text{B}}T}} \right) e^{-\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{k_{\text{B}}T} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}}}. \quad (153)$$

Toto světlo dává nulová střední elektrická a magnetická pole, nenulové jsou pouze střední hodnoty jejich kvadrátů. Energie tohoto světla je $\mathcal{H}_{\text{T}} = S\hbar\omega_{\mathbf{q}}n_{\lambda\mathbf{q}}$, kde Bose-Einsteinovo rozdělení (146) závisí na teplotě zdroje.

Jak vidno, teplota zdroje určuje poměr jedno-, dvou-, . . . -fotonových složek. Neurčuje jejich amplitudu, tedy poměr k 0-fotonovému stavu.

8 Spontání emise fotonu excitovaným atomem

Dosud jsme uvažovali elektromagnetické pole, které nějak vzniká případně zaniká kdesi v okolí našeho vzorku. Naším cílem teď bude popsat vznik (emisi) záření na zdroji uvnitř vzorku.

Při srážkách atomů v plynu mohou elektrony jejich obalů převzít část kinetické energie a přejít do n -tého vybuzeného stavu ψ_n s energií E_n . Vybuzený atom není stabilní a časem přejde na nějaký nižší stav ψ_m s energií $E_m < E_n$ nebo zpět do základního stavu ψ_1 . Při přechodu na nižší stav se uvolní energie, která je vyzářena ve formě fotonu do okolí. Podívejme se, jak taková emise fotonu probíhá.

Jako počáteční stav celého systému v čase $t = 0$ vezmeme jeden atom ve stavu ψ_n a nebudeme uvažovat žádné elektromagnetické záření v okolí. Počáteční vlnová funkce je tedy součin funkce atomu a elektromagnetického vakua a její časový vývoj je popsán Schrödingerovou rovnicí

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = H |\Psi\rangle, \quad |\Psi\rangle_{t=0} = |\psi_n\rangle |\emptyset\rangle. \quad (154)$$

Schrödingerova rovnice (154) má snadné formální řešení,

$$|\Psi\rangle = \theta(t) e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |\psi_n\rangle |\emptyset\rangle. \quad (155)$$

Skoková funkce ($\theta(t) = 1$ pro $t > 0$ a $\theta(t) = 0$ pro $t < 0$) pouze připomíná skutečnost, že řešení má smysl jen pro časy po vybuzení atomu. Protože nedokážeme nalézt diagonální reprezentaci Hamiltoniánu, nelze toto řešení použít bez dalších přibližných úprav.

Úpravy vlnové funkce provedeme ve Fourierově obrazu

$$|\Psi\rangle_E = \int dt e^{\frac{i}{\hbar} E t} |\Psi\rangle = \int_0^\infty dt e^{\frac{i}{\hbar} (E-H)t} |\psi_n\rangle |\emptyset\rangle = \frac{1}{E-H} i\hbar |\psi_n\rangle |\emptyset\rangle. \quad (156)$$

Aby byla zaručena konvergence integrálu, má energie malou kladnou imaginární část, tj. $\text{Im } E > 0$ a $\text{Im } E \rightarrow 0$. Matematické manipulace se zlomkem nazývaným buď resolventa nebo Greenova funkce jsou pohodlnější než manipulace s exponentou.

8.1 Metoda projekčních operátorů

Pro začátek nás bude zajímat pouze projekce vlnové funkce na svoji počáteční hodnotu $\langle \emptyset | \langle \psi_n | \Psi \rangle$. Z Fourierova rozkladu (156) je zřejmé, že musíme vyhodnotit element resolventy $\langle \emptyset | \langle \psi_n | \frac{1}{E-H} | \psi_n \rangle | \emptyset \rangle$.

Výhodný zápis poskytují projekční operátory

$$P = |\psi_n\rangle\langle\emptyset|\langle\emptyset|\langle\psi_n|, \quad Q = 1 - P. \quad (157)$$

Podle nich rozčleníme Hamiltonián na čtyři části,

$$H = (P + Q)H(P + Q) = H_P + H_Q + H_{PQ} + H_{QP}. \quad (158)$$

Budeme používat značení $H_P = PHP$ pro počáteční stav, $H_Q = QHQ$ pro podprostor všech stavů vyjma počátečního a $H_{PQ} = PHQ$ a $H_{QP} = QHP$ pro členy, které je spojují.

Spojující členy H_{PQ} a H_{QP} umožňují přechod z počátečního stavu do jiného koncového stavu. To je patrné, když spojující členy položíme rovny nule,²⁰

$$G^0 = \frac{1}{E - H_P - H_Q} = \frac{P}{E - H_P} + \frac{Q}{E - H_Q}. \quad (159)$$

Pokud dosadíme do rozkladu (156) hrubé přiblížení $\frac{1}{E-H} \approx G^0$ dostaneme, že vybuzený stav je stacionární, $|\Psi\rangle \approx e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |\psi_n\rangle | \emptyset \rangle$.

Spojující členy Hamiltoniánu budeme chápat jako poruchu, ve které zlomek rozvineme. Vyjdeme z identity

$$\frac{1}{E - H} = \frac{1}{E - H_P - H_Q} + \frac{1}{E - H_P - H_Q} (H_{PQ} + H_{QP}) \frac{1}{E - H}, \quad (160)$$

kterou snadno ověříme vynásobením $E - H$ zprava a $E - H_P - H_Q$ zleva. Identitu přepíšeme ve zkráceném značení

$$G = G^0 + G^0 (H_{PQ} + H_{QP}) G. \quad (161)$$

Tuto identitu promítneme na počáteční stav (násobíme projektorem P z obou stran)

$$G_P = G_P^0 + G_P^0 H_{PQ} G_{QP}. \quad (162)$$

²⁰Zlomek rozvineme do geometrické řady,

$$(P + Q)G^0 = \frac{P}{E} + \frac{Q}{E} + (P + Q)\frac{1}{E}(H_P + H_Q)\frac{1}{E} + (P + Q)\frac{1}{E}(H_P + H_Q)\frac{1}{E}(H_P + H_Q)\frac{1}{E} + \dots$$

Z definice projektorů je zřejmé, že $PQ = 0$. Odtud plyne $PH_Q = 0$, $H_Q P = 0$ a $H_P H_Q = 0$, takže po vynásobení projektorem P , respektivně Q , zůstanou pouze členy s H_P , respektivně H_Q . Každou řadu sečteme zvlášť.

Potřebujeme spojující element resolventy G_{QP} . Ten dostaneme když vynásobíme identitu (161) zleva Q a zprava P,

$$G_{QP} = G_Q^0 H_{QP} G_P. \quad (163)$$

Využili jsme, že $QG^0P = 0$. Nyní pouze dosadíme (163) do (162)

$$G_P = G_P^0 + G_P^0 H_{PQ} G_Q^0 H_{QP} G_P. \quad (164)$$

Rovnice (164) je algebraický vztah pro G_P . Ten vyřešíme a do výsledku dosadíme ze (159)

$$G_P = \frac{G_P^0}{1 - G_P^0 H_{PQ} G_Q^0 H_{QP}} = \frac{P}{E - E_n - H_{PQ} G_Q^0 H_{QP}}. \quad (165)$$

Převodli jsme problém výpočtu funkce G_P na výpočet funkce Σ_n určující velikost opravy

$$H_{PQ} G_Q^0 H_{QP} = |\psi_n\rangle\langle\emptyset| \Sigma_n \langle\emptyset| \langle\psi_n| = \Sigma_n P. \quad (166)$$

Index n připomíná, že projektor P vybírá n -tý stav atomu. Funkce Σ_n opravuje energii atomu. Proto se jí říká buď vlastní energie nebo častěji anglicky selfenergie.

8.2 Doba života vybuzeného stavu

Selfenergie popisuje i zánik počátečního stavu. Podívejme se jak. Pravděpodobnost, že v čase t je atom ještě ve vybuzeném stavu, je rovna kvadrátu amplitudy vlnové funkce $|\langle\emptyset|\langle\psi_n|\Psi\rangle|^2$. Spočteme tuto amplitudu ze selfenergie.

Časovou závislost vlnové funkce získáme zpětnou Fourierovou transformací

$$|\Psi\rangle = \int dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} |\Psi\rangle_E = \oint dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \frac{1}{E - H} i\hbar |\psi_n\rangle\langle\emptyset|, \quad (167)$$

kde kruhový integrál se uzavírá po dolní komplexní polorovině. Po promítnutí na počáteční stav dostaneme

$$\begin{aligned} \langle\emptyset|\langle\psi_n|\Psi\rangle &= \oint dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \langle\emptyset|\langle\psi_n|\frac{i\hbar}{E - H}|\psi_n\rangle\langle\emptyset| \\ &= \oint dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} G_P. \end{aligned} \quad (168)$$

Pro odvození druhého tvaru jsme mezi počáteční stav a zlomek vložili identitu $1 = P + Q$ a využili, že $P|\psi_n\rangle|\mathcal{O}\rangle = |\psi_n\rangle|\mathcal{O}\rangle$ a $Q|\psi_n\rangle|\mathcal{O}\rangle = 0$.

Přesný výpočet resolventy G_P nebo selfenergie Σ_n je příliš obtížný, ale můžeme určit její rozumné přiblížení. Je-li selfenergie nulová, tedy $G_P \approx G_P^0$, vybuzený stav je stabilní a je dán jediným pólem resolventy $E \approx E_n$. Můžeme očekávat, že selfenergie je pouze opravou tohoto pólu, takže opravený pól ε_n je nulou (neboli kořenem) jmenovatele resolventy, $\varepsilon_n - E_n - \Sigma_n(\varepsilon_n) = 0$. Odtud

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{O} | \langle \psi_n | \Psi \rangle &= i\hbar \oint dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \frac{1}{E - E_n - \Sigma_n(E)} \\
&\approx i\hbar \oint dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \frac{1}{E - E_n - \Sigma_n(\varepsilon_n)} \\
&= i\hbar \oint dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \frac{1}{E - \varepsilon_n} \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}.
\end{aligned} \tag{169}$$

Je zřejmé, že reálná část selfenergie opravuje vazebnou energii elektronu v n -tém stavu, $\text{Re } \varepsilon_n = E_n + \text{Re } \Sigma_n$. Budeme považovat energie stavů $\text{Re } \varepsilon_n$ za změřené hodnoty a reálnou část selfenergie nebudeme uvažovat.

Doba života τ_n elektronu v n -tém vybuzeném stavu je dána exponenciálním útlumem pravděpodobnosti jeho výskytu v počátečním stavu $p_n = e^{-t/\tau_n}$. Z kvantové interpretace pravděpodobnosti výskytu částice ve stavu $p_n = |\langle \mathcal{O} | \langle \psi_n | \Psi \rangle|^2 = e^{\frac{2}{\hbar} \text{Im } \varepsilon_n t}$ plyne, že doba života je nepřímo úměrná imaginární části selfenergie

$$\tau_n = -\frac{\hbar}{2 \text{Im } \varepsilon_n} = -\frac{\hbar}{2 \text{Im } \Sigma_n}. \tag{170}$$

Přidejme poznámku o poruchovém rozvoji. Doba života vystupuje v exponentě časové závislosti vlnové funkce. Rozvineme-li časovou závislost podle řádů $e^{-t/\tau} = 1 - t/\tau + t^2/2\tau^2 - \dots$, vidíme, že exponenciální útlum vyžaduje nekonečný řád v $1/\tau$ a tedy i nekonečný řád v síle interakce. Hodnotu rychlosti útlumu však stačí spočítat v nejnižším nenulovém řádu.

8.3 Jedno-fotonová emise

Chceme-li se dozvědět dobu života excitovaného stavu, musíme spočítat alespoň přibližnou hodnotu selfenergie (166). V nejjednodušším přiblížení se omezíme na jedno-fotonovou emisi.

Resolventa G_Q^0 je obecně velmi složitá, neboť obsahuje všechny zbývající stavy soustavy atom-elektromagnetické pole včetně jejich vzájemných interakcí. Abychom ji zjednodušili, omezíme se při výpočtu selfenergie na druhý řád elektron-fotonové interakce. Jelikož spojující členy $H_{PQ} = H'_{PQ}$ a $H_{QP} = H'_{QP}$ jsou úměrné elektron-fotonové interakci, stačí nám resolventa G_Q^0 v nultém řádu interakce

$$\begin{aligned}
G_Q^0 &\approx \frac{Q}{E - H_e - H_T} \\
&= \sum_{m \neq n} |\psi_m\rangle |\emptyset\rangle \frac{1}{E - E_m} \langle \emptyset | \langle \psi_m | \\
&+ \sum_m \sum_{\lambda \mathbf{q}} |\psi_m\rangle |1_{\lambda \mathbf{q}}\rangle \frac{1}{E - E_m - \hbar \omega_{\mathbf{q}}} \langle 1_{\lambda \mathbf{q}} | \langle \psi_m | \\
&+ \sum_m \sum_{\lambda \mathbf{q}} \sum_{\mu \mathbf{k}} |\psi_m\rangle |1_{\lambda \mathbf{q}}, 1_{\mu \mathbf{k}}\rangle \frac{1}{E - E_m - \hbar \omega_{\mathbf{q}} - \hbar \omega_{\mathbf{k}}} \langle 1_{\lambda \mathbf{q}}, 1_{\mu \mathbf{k}} | \langle \psi_m | \\
&+ \dots
\end{aligned} \tag{171}$$

V dipólovém přiblížení se z rozvoje (171) uplatní pouze druhý řádek. Dokažme si toto tvrzení. V selfenergii $P\Sigma_n = H'PQG_Q^0H'QP$ vystupuje resolventa sevřená mezi interakčními Hamiltoniány. Interakční Hamiltonián v dipólovém přiblížení $H' = \mathbf{A}(0)\mathbf{j}$ je součin operátoru vektorového potenciálu působícího pouze na funkci elektromagnetického pole a operátoru proudu $\mathbf{j} = \frac{i}{\hbar}(H_e\mathbf{d} - \mathbf{d}H_e)$ působícího pouze na funkci atomu. Působení vektorového potenciálu (36) na vakuum dá nulové příspěvky od anihilačních operátorů zatímco kreační operátory převedou vakuum na jedno-fotonové stavy,

$$\mathbf{A}(0)|\emptyset\rangle = \sum_{\lambda \mathbf{q}} \mathbf{f}_{\lambda - \mathbf{q}}(0) \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}} a_{\lambda \mathbf{q}}^\dagger |\emptyset\rangle = \sum_{\lambda \mathbf{q}} \mathbf{e}_{\lambda \mathbf{q}} \sqrt{\frac{\Delta \hbar}{(2\pi)^3 2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}} |1_{\lambda \mathbf{q}}\rangle. \tag{172}$$

Ve výrazu (172) jsou zastoupeny pouze stavy z druhého řádku resolventy (171), což jsme chtěli ukázat.

Nyní dokážeme selfenergii vyjádřit explicitně,

$$\begin{aligned}
\Sigma_n &= \langle \emptyset | \langle \psi_n | H' \frac{1}{E - H_e - H_T} H' | \psi_n \rangle | \emptyset \rangle \\
&= \langle \psi_n | \mathbf{j} \langle \emptyset | \mathbf{A}(0) \frac{1}{E - H_e - H_T} \mathbf{A}(0) | \emptyset \rangle \mathbf{j} | \psi_n \rangle \\
&= \sum_{\lambda \mathbf{q} \kappa \mathbf{k}} \frac{\Delta}{(2\pi)^3} \frac{\hbar}{2\epsilon \sqrt{\omega_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{k}}}} \langle \psi_n | \mathbf{j} \mathbf{e}_{\kappa \mathbf{k}} \langle 1_{\kappa \mathbf{k}} | \frac{1}{E - H_e - H_T} | 1_{\lambda \mathbf{q}} \rangle \mathbf{e}_{\lambda \mathbf{q} \mathbf{j}} | \psi_n \rangle \\
&= \sum_{\lambda} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar}{2\epsilon \omega_{\mathbf{q}}} \langle \psi_n | \mathbf{j} \mathbf{e}_{\lambda \mathbf{q}} \frac{1}{E - H_e - \hbar \omega_{\mathbf{q}}} \mathbf{e}_{\lambda \mathbf{q} \mathbf{j}} | \psi_n \rangle \\
&= \sum_m \sum_{\lambda} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\epsilon \hbar \omega_{\mathbf{q}}} |\mathbf{d}_{nm} \mathbf{e}_{\lambda \mathbf{q}}|^2 \frac{(E_n - E_m)^2}{E - E_m - \hbar \omega_{\mathbf{q}}}. \tag{173}
\end{aligned}$$

První řádek jen opakuje definici selfenergie. Ve druhém řádku jsme dosadili přiblížení pro interakční Hamiltonián. Ve třetím řádku je vyhodnoceno působení vektorového potenciálu na vektor vakua podle (172). Ve čtvrtém řádku jsme využili, že fotonový Hamiltonián je diagonální v basi stavů s ostrým počtem částic, takže můžeme vyhodnotit jeho libovolnou funkci $\langle 1_{\kappa \mathbf{k}} | g(H_T) | 1_{\lambda \mathbf{q}} \rangle = g(\hbar \omega_{\mathbf{q}}) \delta_{\lambda \mathbf{q} \kappa \mathbf{k}}$. Pomocí δ odstraníme κ a \mathbf{k} . Sumu přes \mathbf{q} nahradíme integrací podle (19). Po tomto kroku závisí zlomek na jediném operátoru –Hamiltoniánu pro atom. V diagonální reprezentaci $H_e = \sum_m |\psi_m\rangle E_m \langle \psi_m|$ dostaneme maticové elementy proudu $\mathbf{j}_{mn} = \langle \psi_m | \mathbf{j} | \psi_n \rangle$, za které dosadíme (66).

Hodnotu selfenergie potřebujeme znát v pólu resolventy,

$$\Sigma_n \approx \Sigma_n(E_n) = \sum_{m\lambda} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{|\mathbf{d}_{nm} \mathbf{e}_{\lambda \mathbf{q}}|^2}{2\epsilon \hbar \omega_{\mathbf{q}}} \frac{(E_n - E_m)^2}{E_n - E_m - \hbar \omega_{\mathbf{q}} + i0}. \tag{174}$$

Člen $i0$ připomíná, že energie E musí mít nekonečně malou kladnou imaginární část. Imaginární část selfenergie podle (174) je²¹

$$\text{Im } \Sigma_n = - \sum_{m\lambda} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{|\mathbf{d}_{nm} \mathbf{e}_{\lambda \mathbf{q}}|^2}{2\epsilon} (E_n - E_m) \pi \delta(E_n - E_m - \hbar \omega_{\mathbf{q}}). \tag{175}$$

Na součtu přes polarizaci λ již závisí pouze projekce dipólů, takže můžeme tento součet zjednodušit. Polarizační vektory spolu se směrovým vektorem hybnosti \mathbf{q}/q tvoří úplnou basi, neboli libovolný vektor

²¹ Použijeme Landaův rozklad zlomku blízko reálné osy na hlavní hodnotu a δ funkci

$$\frac{1}{x + i0} = \frac{\wp}{x} - i\pi \delta(x).$$

V součinu s δ funkcí je $\hbar \omega_{\mathbf{q}} = E_n - E_m$.

\mathbf{d} můžeme v této basi rozložit

$$\mathbf{d} = \frac{\mathbf{q}}{q^2}(\mathbf{q}\mathbf{d}) + \sum_{\lambda} \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}\mathbf{d}). \quad (176)$$

Vynásobíme-li skalárně tento rozklad vektorem \mathbf{d} , najdeme

$$\sum_{\lambda} |\mathbf{d}_{nm}\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}|^2 = d_{mn}^2 - |\mathbf{d}_{nm}\mathbf{q}|^2/q^2 = d_{mn}^2(1 - z^2), \quad (177)$$

kde $d_{mn} = |\mathbf{d}_{nm}|$ a z je cosinus úhlu mezi dipólem a hybností. Nyní snadno dokončíme integraci

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_n} &= -\frac{2}{\hbar} \text{Im} \Sigma_n \\ &= \frac{\pi}{(2\pi)^3 \epsilon \hbar} \sum_m (E_n - E_m) d_{mn}^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 dz (1 - z^2) \\ &\quad \times \int_0^{\infty} q^2 dq \delta(E_n - E_m - \hbar cq) \\ &= \frac{1}{3\pi \epsilon \hbar^4 c^3} \sum_{m < n} (E_n - E_m)^3 d_{mn}^2. \end{aligned} \quad (178)$$

Integrace δ funkce v (178) je nenulová pouze když $E_m < E_n$. To znamená, že stav n může spadnout pouze do nižšího stavu. Tuto podmínku jsme nahradili jednodušším vyjádřením $m < n$.

8.4 Doba života p -stavu vodíku

Pro názornost ze vzorce (178) odhadneme dobu života vybuzeného stavu. Za vybuzený stav vezmeme p -stav vodíku, jehož vazebná energie je $E_2 = -\frac{1}{4} 13.5 \text{ eV} = -5.4 \cdot 10^{-19} \text{ J}$. Tento p -stav může spadnout pouze do s -stavu s energií $E_1 = -13.5 \text{ eV} = -21.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$.

Vlnové funkce s a p_z stavů jsou

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_B^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_B}}, \\ \psi_2 &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_B^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a_B} e^{-\frac{r}{2a_B}} \cos \theta, \end{aligned} \quad (179)$$

kde r je vzdálenost elektronu od jádra a $\theta \in (0, \pi)$ je úhel od osy z . Volba souřadné soustavy je libovolná, takže nemusíme jiné p -stavy uvažovat.

Dipól ve směru osy z je dán integrálem

$$\begin{aligned}
d_{12} &= e \langle \psi_1 | r \cos \theta | \psi_2 \rangle \\
&= e \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \psi_1 r \cos \theta \psi_2 \\
&= e \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \cos^2 \theta \\
&\quad \times \int_0^\infty r^2 dr r \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_B^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_B}} \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_B^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a_B} e^{-\frac{r}{2a_B}} \\
&= 4\sqrt{2} \left(\frac{2}{3}\right)^5 e a_B \\
&\approx 0.745 e a_B,
\end{aligned} \tag{180}$$

kde $a_B = 0.53 \text{ \AA} = 5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ je Bohrov poloměr. Ostatní vektorové složky dipólu jsou nulové.

Dosadíme-li $\epsilon = 10^7 / (4\pi c^2) \text{ F/m}$, $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$, $\hbar = 10^{-34} \text{ Js}$ a $e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ a hodnoty energií a dipólu do (178), dostaneme

$$\frac{1}{\tau_2} = \frac{1}{3\pi \epsilon \hbar^4 c^3} (E_1 - E_0)^3 d_{12}^2 = 10^9 \text{ s}^{-1}, \tag{181}$$

takže doba života je 10^{-9} s .

Je zajímavé srovnat dobu života p -stavu s jeho Newtonovským popisem. Představíme-li si elektron jako klasickou kuličku kroužící kolem jádra, jeho pohyb je dán rovnováhou přitažlivé a odstředivé síly, $\frac{e^2}{4\pi\epsilon r^2} = mr \left(\frac{2\pi}{T}\right)^2$, kde T je doba oběhu. Bohrovo kvantování orbit požaduje, aby moment hybnosti byl celým násobkem Planckovy konstanty, $mvr = m\frac{2\pi}{T}r^2 = n\hbar$, kde $n = 1$ pro základní stav a $n = 2$ pro stav vybuzený. Tyto úvahy vedou ke správným vazebným energiím a klasické vzdálenosti elektronů $r = n^2 a_B$ jsou také rozumným odhadem kvantových hodnot. Klasické rychlosti $v = \frac{n\hbar}{mr} = \frac{\hbar}{na_B m}$ pak dávají dobu oběhu $T = \frac{2\pi r}{v} = n^3 \frac{2\pi a_B^2 m}{\hbar} = n^2 \cdot 1.76 \cdot 10^{-16} \text{ s}$. Elektron v p -stavu tedy více než milionkrát zakrouží než spadne do s -stavu. Tomu odpovídá i ryze kvantové srovnání. Imaginární část selfenergie $\text{Im} \Sigma_1 = -\hbar/2\tau_1 = 5 \cdot 10^{-26} \text{ J} = 3 \cdot 10^{-7} \text{ eV}$ je více než miliónkrát menší než odstup energií.

9 Šířka spektrální čáry

Přechod atomu z vybuzeného stavu do nižšího je provázen vyzářením fotonu. Podívejme, jaké spektrum fotonů budeme pozorovat.

9.1 Přírozená šířka čáry

Konečná doba života vybuzeného stavu se projeví na energetickém spektru vyzářených fotonů. Pravděpodobnost, že atom skončí v nižším stavu m , zatímco je vyzářen foton do modu $\lambda\mathbf{q}$ je úměrná kvadrátu elementu vlnové funkce $|\langle 1_{\lambda\mathbf{q}}|\langle\psi_m|\psi\rangle|^2$. Podobně jako pro počáteční stav, tento element spočteme ze zpětného Fourierova rozkladu (167) promítnutého tentokrát na koncový stav

$$\langle 1_{\lambda\mathbf{q}}|\langle\psi_m|\Psi\rangle = \oint dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \langle 1_{\lambda\mathbf{q}}|\langle\psi_m|\frac{i\hbar}{E-H}|\psi_n\rangle|\mathcal{O}\rangle. \quad (182)$$

Maticový element zlomku přísluší spojujícímu elementu resolventy

$$\langle 1_{\lambda\mathbf{q}}|\langle\psi_m|\frac{1}{E-H}|\psi_n\rangle|\mathcal{O}\rangle = \langle 1_{\lambda\mathbf{q}}|\langle\psi_m|G_{\text{QP}}|\psi_n\rangle|\mathcal{O}\rangle \equiv G_{\lambda\mathbf{q}m,\mathcal{O}n}, \quad (183)$$

který spočteme ve stejném přiblížení jako selfenergii,

$$G_{\text{QP}} = G_{\text{Q}}^0 H' G_{\text{P}} \approx \frac{\text{Q}}{E - H_{\text{e}} - H_{\text{T}}} \mathbf{A}(0)\mathbf{j} G_{\text{P}}. \quad (184)$$

Resolventu G_{Q}^0 jsme nahradili podle (171) přiblížením pro neinteragující atom a světlo. Interakční Hamiltonián bereme v dipólovém přiblížení. Nakonec ještě resolventu G_{P} dosadíme v pólovém přiblížení,

$$G_{\lambda\mathbf{q}m,\mathcal{O}n} = \frac{1}{E - E_m - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} \langle 1_{\lambda\mathbf{q}}|\mathbf{A}(0)|\mathcal{O}\rangle \langle\psi_m|\mathbf{j}|\psi_n\rangle \frac{1}{E - E_n + i\frac{\hbar}{2\tau_n}}. \quad (185)$$

Proud v dipólovém přiblížení $\langle\psi_m|\mathbf{j}|\psi_n\rangle = \frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)\mathbf{d}_{mn}$ a operátor vektorového potenciálu (36), tedy $\langle 1_{\lambda\mathbf{q}}|\mathbf{A}(0)|\mathcal{O}\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}}\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}\sqrt{\frac{\Delta}{(2\pi)^3}}$, dají

$$G_{\lambda\mathbf{q}m,\mathcal{O}n} = \frac{i}{\hbar} \frac{E_m - E_n}{E - E_m - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}} \sqrt{\frac{\Delta}{(2\pi)^3}} \frac{\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}\mathbf{d}_{mn}}{E - E_n + i\frac{\hbar}{2\tau_n}}. \quad (186)$$

Pomocí identity $\frac{1}{E-a}\frac{1}{E-b} = \frac{1}{a-b}\left(\frac{1}{E-a} - \frac{1}{E-b}\right)$ od sebe oddělíme póly resolventy

$$G_{\lambda\mathbf{q}m,\emptyset n} = C \left(\frac{1}{E - E_m - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} - \frac{1}{E - E_n + i\frac{\hbar}{2\tau_n}} \right), \quad (187)$$

kde

$$C = \frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}} \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} \mathbf{d}_{mn} \sqrt{\frac{\Delta}{(2\pi)^3}} \frac{E_m - E_n}{E_m + \hbar\omega_{\mathbf{q}} - E_n + i\frac{\hbar}{2\tau_n}}. \quad (188)$$

Zpětnou Fourierovou transformací resolventy dostaneme časovou závislost elementu vlnové funkce

$$\langle 1_{\lambda\mathbf{q}} | \langle \psi_m | \Psi \rangle = \oint dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} G_{\lambda\mathbf{q}m,\emptyset n} = C \left(e^{-\frac{i}{\hbar}(E_m - \hbar\omega_{\mathbf{q}})t} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t - \frac{t}{2\tau_n}} \right). \quad (189)$$

Rozdíl exponent vymizí pro $t \rightarrow 0$, takže na počátku je obsazení jednofotonových stavů nulové pro všechny mody. Tím jsme jen ověřili, že řešení správně splňuje počáteční podmínku.

Pro časy podstatně delší než doba života vybuzeného stavu $t \gg \tau_n$ je tlumená exponenta zanedbatelná a vlnová funkce je úměrná pouze netlumenému členu. Kvadrát amplitudy pak je

$$|\langle 1_{\lambda\mathbf{q}} | \langle \psi_m | \Psi \rangle|^2 = |C|^2 = \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\epsilon\hbar\omega_{\mathbf{q}}} \frac{|\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} \mathbf{d}_{mn}|^2 (E_m - E_n)^2}{(E_m + \hbar\omega_{\mathbf{q}} - E_n)^2 + \frac{\hbar^2}{4\tau_n^2}}. \quad (190)$$

Dosadili jsme $\Delta = dq_x dq_y dq_z = d\mathbf{q}$.

Důležité je, že pro dlouhé časy přispívá pouze pól funkce $G_{\mathbf{Q}}^0$. To nám dovoluje vyhodnotit dlouhočasovou limitu i když nepoužijeme pólové přiblížení,

$$|\langle 1_{\lambda\mathbf{q}} | \langle \psi_m | \Psi \rangle|^2 = \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\epsilon\hbar\omega_{\mathbf{q}}} \frac{|\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} \mathbf{d}_{mn}|^2 (E_m - E_n)^2}{(E_m + \hbar\omega_{\mathbf{q}} - E_n)^2 + (\text{Im}\Sigma_n(E_m + \hbar\omega_{\mathbf{q}}))^2}. \quad (191)$$

Vraťme se k výkladu odvozeného výsledku. Kvadrát amplitudy představuje pravděpodobnost, že do infinitesimálního intervalu vlnových vektorů $(q_x, q_x + dq_x) \times (q_y, q_y + dq_y) \times (q_z, q_z + dq_z)$ byl vyzářen foton. Rozdělení vyzářených fotonů je

$$p_{\lambda\mathbf{q}} = \frac{1}{2\epsilon\hbar\omega_{\mathbf{q}}} \frac{|\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} \mathbf{d}_{mn}|^2 (E_m - E_n)^2}{(E_m + \hbar\omega_{\mathbf{q}} - E_n)^2 + \frac{\hbar^2}{4\tau_n^2}}. \quad (192)$$

Podle jmenovatele vidíme, že nejpravděpodobnější jsou fotony s energií $\hbar\omega_{\mathbf{q}} = E_n - E_m$. Pokud se energie fotonu od této hodnoty liší o méně než $\hbar/2\tau_n$, je pravděpodobnost emise stále ještě velká. Pozorovaná spektrální čára má tedy konečnou šířku. Není-li zapojen žádný další mechanismus rozšíření čáry, je čára Lorentzovská²² a její šířka je nepřímo úměrná době života vybuzeného stavu.

Všimněte si vztahu mezi selfenergií a pravděpodobnostmi přechodů do jednotlivých koncových stavů. Imaginární část selfenergie je součtem přes všechny koncové stavy. Koncové stavy pro výpočet tvaru čáry jsou tedy v selfenergii vnitřními stavy – stavy do nichž můžeme rozložit resolventu. Čtenář se může sám přesvědčit, že přiblížení, které jsme použili pro výpočet doby života, je konsistentní s přiblížením použitým pro výpočet spektra emitovaných fotonů. Integrace přes všechny konečné stavy $\sum_m \sum_{\lambda\mathbf{q}} |\langle 1_{\lambda\mathbf{q}} | \langle \psi_m | \Psi \rangle|^2 = \sum_m \sum_{\lambda} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} p_{\lambda\mathbf{q}} = 1$ je rovna jedné právě když $\frac{\hbar}{2\tau_n} = -\text{Im} \Sigma_n$ je dáno výrazem (175). Použijte $\frac{1}{x^2+a^2} \rightarrow \frac{1}{a}\pi\delta(x)$ pro malá a .

9.2 Teplotní rozšíření spektrální čáry

V reálném plynu se atomy či molekuly pohybují s teplotním rozdělením rychlostí. Pohyb ve směru vyzářeného fotonu vede na Dopplerovo zvýšení jeho frekvence, pohyb proti směru záření frekvenci snižuje. Z původně úzké čáry se tak stane čára širší.

Pro jednoduchost budeme v této kapitole uvažovat, že přirozená šířka čáry je malá ve srovnání s Dopplerovským a srážkovým rozšířením. Spektrální čáru bez těchto oprav pak můžeme nahradit δ funkcí, neboť z $i\frac{\hbar}{2\tau_n} \rightarrow i0$ plyne

$$p_{\lambda\mathbf{q}} \rightarrow \frac{\pi\tau_n}{\hbar\epsilon} |\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}\mathbf{d}_{mn}|^2 (E_n - E_m)\delta(E_m + \hbar\omega_{\mathbf{q}} - E_n). \quad (193)$$

Pravděpodobnost, že atom o hmotnosti m v plynu o hustotě n a teplotě T má rychlost \mathbf{v} je dána Maxwellovým rozdělením

$$f(\mathbf{v}) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m\mathbf{v}^2}{2k_B T}}. \quad (194)$$

Rozdělení (194) je normováno na interval rychlostí $n = \int d\mathbf{v} f$. Zde $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ J/K je Boltzmannova konstanta.

²²Lorentzovské rozdělení pravděpodobnosti má tvar $\frac{2a}{x^2+a^2}$.

Dopplerovu změnu frekvence pohybem atomu lze spočítat řadou postupů od záření letícího zdroje, přes Lorentzovu transformaci z letící do laboratorní soustavy, až po zákony zachování energie a hybnosti. Nejpohodlnější jsou zákony zachování. Před vyzářením fotonu má atom hybnost $m\mathbf{v}$, po vyzáření $m\mathbf{u}$. Jak jsme si ukázali (43), foton v modu $\lambda\mathbf{q}$ nese hybnost $\hbar\mathbf{q}$. Zákon zachování hybnosti požaduje

$$m\mathbf{v} = m\mathbf{u} + \hbar\mathbf{q}. \quad (195)$$

Odpovídající změna kinetické energie atomu je

$$\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 - \frac{1}{2}m\mathbf{u}^2 = \hbar\mathbf{q}\mathbf{v} - \frac{\hbar^2\mathbf{q}^2}{2m}. \quad (196)$$

Poslední člen (196) je zanedbatelný.²³

Změna kinetické energie přispívá k energetické bilanci záření. Počáteční energie je součet kinetické energie $\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2$ a energie vybuzeného stavu E_n . Koncová energie je součet energie fotonu $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$, kinetické energie $\frac{1}{2}m\mathbf{u}^2$ a energie koncového stavu atomu E_m . Zákon zachování energie

$$\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + E_n = \hbar\omega_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2}m\mathbf{u}^2 + E_m \quad (197)$$

pak zahrnuje Dopplerův posun frekvence

$$\hbar\omega_{\mathbf{q}} = E_n - E_m + \hbar\mathbf{q}\mathbf{v}. \quad (198)$$

Vliv tepelného pohybu na spektrální čáru spočteme jako rozdělení všech možných Dopplerovsky posunutých frekvencí. Nejprve zahrneme vliv rychlosti atomu na jeho čáru tak, že opraveným zákonem zachování energie nahradíme argument δ funkce ve výrazu (193). Takto posunuté čáry pak vystředujeme přes rychlosti atomů,

$$p_{\lambda\mathbf{q}} = \int d\mathbf{v} f(\mathbf{v}) \frac{\pi\tau_n}{\hbar\epsilon} |\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}\mathbf{d}_{mn}|^2 (E_n - E_m) \delta(E_m + \hbar\omega_{\mathbf{q}} - E_n - \hbar\mathbf{v}\mathbf{q}). \quad (199)$$

Výpočet dokončíme obvyklými kroky. Označíme $q = |\mathbf{q}|$ a projekci rychlosti do směru \mathbf{q} jako v , tj, $\mathbf{v}\mathbf{q} = vq$. Zbývající dvě vektorové

²³Foton viditelného světla má energii přibližně $\hbar\omega_{\mathbf{q}} \sim 1 \text{ eV} \sim 10^{-19} \text{ J}$, takže nese hybnost řádu $\hbar|\mathbf{q}| = \hbar\frac{\omega_{\mathbf{q}}}{c} \sim 3 \cdot 10^{-27} \text{ Ns}$. Atom při pokojové teplotě $T = 300 \text{ K}$ má tepelnou energii $\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 \sim k_B T \sim 10^{-20} \text{ J}$. Odpovídající rychlost je $v_{\text{th}} \sim 10^3 \text{ m/s}$. Tepelná hybnost $p_{\text{th}} = mv_{\text{th}} \sim 10^{-23} \text{ Ns}$ je o čtyři řády větší než hybnost fotonů. Proto můžeme zanedbat $\hbar^2\mathbf{q}^2 \ll 2m\mathbf{v}\mathbf{q}$.

složky rychlosti nemají vliv na δ funkci a zbavíme se jich integrací,

$$\begin{aligned}
p_{\lambda\mathbf{q}} &= \frac{\pi\tau_n}{\hbar\epsilon} |\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}\mathbf{d}_{mn}|^2 (E_n - E_m) \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \\
&\quad \times \int dv e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}} \delta(E_m + \hbar c q - E_n - \hbar v q) \\
&= \frac{\pi\tau_n}{\hbar\epsilon} |\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}\mathbf{d}_{mn}|^2 (E_n - E_m) \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \frac{1}{\hbar q} e^{-\frac{m}{2k_B T} \left(c - \frac{E_n - E_m}{\hbar q}\right)^2}.
\end{aligned} \tag{200}$$

Výraz (200) poskytuje explicitní rozdělení fotonů, není však pohodlný pro vyhodnocení měřených čar. Jeho zjednodušení využívá, že exponenta rychle vymírá pro $\hbar c q \neq E_n - E_m$. To nám dovoluje přibližně krátit $(E_m - E_n)/\hbar q \approx c$ v předfaktoru exponenty. Nejdůležitější je přiblížení v argumentu exponenty, kde použijeme rozvoj kolem bodu maxima $c - \frac{E_n - E_m}{\hbar q} \approx (\hbar c q - E_n + E_m) \frac{c}{E_n - E_m}$. Potom má pravděpodobnost vyzáření fotonu do modu $\lambda\mathbf{q}$ tvar jednoduchého Maxwellova rozdělení

$$p_{\lambda\mathbf{q}} = \frac{\pi\tau_n c}{\hbar\epsilon} |\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}\mathbf{d}_{mn}|^2 \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} e^{-\frac{mc^2}{2k_B T(E_n - E_m)^2} (\hbar c q - E_n - E_m)^2}. \tag{201}$$

Šířka teplotně rozšířené čáry vzhlede k proměnné $\hbar c q$ je podle (201) rovna

$$\omega_{\text{th}} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \sqrt{\frac{mc^2}{2k_B T}}. \tag{202}$$

Pro $2k_B T \sim 10^{-20}$ J, $m \sim 10^{-26}$ kg a $E_n - E_m \sim 10^{-19}$ J dostaneme $\omega_{\text{th}} \sim 10^8$ s⁻¹. Tato hodnota je menší než přirozená šířka čáry vodíku, ale ne podstatně. To ukazuje na skutečnost, že vzájemný vztah obou příspěvků není jednoznačný a závisí jak na vlastnostech plynu tak na sledované čáře.

9.3 Srážkové rozšíření spektrální čáry

Kromě přímočarého teplotního pohybu prodělávají atomy srážky. Při nich mění směr a rychlost a tím i Dopplerův posun frekvencí. Mimo změnu frekvence přinášejí srážky i nahodilou změnu fáze vlnové funkce, která opět vede na rozmazání spektrální čáry.

Atomy plynu se srážejí s četností, která závisí na jejich srážkovém průřezu, teplotě a hustotě. Atom, který právě prodělal srážku, se pohybuje volným prostorem po dobu t_c než se znovu srazí. Čas t_c volného letu je nahodilý. Pravděpodobnost $p_c(t_c)$, že atom přežije dobu t_c bez srážky, exponenciálně ubývá

$$p_c(t_c) = \frac{1}{\tau_c} e^{-\frac{t_c}{\tau_c}}. \quad (203)$$

Při srážce se změní směr letu atomu, takže záření před a po srážce přispívá k různým modům. Musíme proto dobu, kdy atom vysílá záření do sledovaného modu, omezit střední dobou letu. Abychom mohli toto omezení zavést, nepoužijeme oddělení pólů, ale převedeme vlnovou funkci (182) na konvoluci podle času,²⁴

$$\begin{aligned} \langle 1_{\lambda\mathbf{q}} | \langle \psi_m | \Psi \rangle &= \int dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} G_{\lambda\mathbf{q}m, \emptyset n} \\ &= C' \frac{i}{\hbar} \int dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \frac{1}{E - E_m - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} \frac{1}{E - E_n + i\frac{\hbar}{2\tau_n}} \\ &= C' \int_0^t dt' e^{-\frac{i}{\hbar}(E_m + \hbar\omega_{\mathbf{q}})(t-t')} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t' - \frac{t'}{2\tau_n}}. \end{aligned} \quad (204)$$

Označili jsme energeticky nezávislou část výrazu

$$C' = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}} \sqrt{\frac{\Delta}{(2\pi)^3}} (E_m - E_n) \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} \mathbf{d}_{mn}. \quad (205)$$

V konvoluci (204) člen $e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t'}$ popisuje časovou změnu fáze vlnové funkce počátečního stavu $|\psi_n\rangle|\emptyset\rangle$. Můžeme si představit, že v okamžiku t' dojde k přechodu systému do koncového stavu $|1_{\lambda\mathbf{q}}\rangle|\psi_m\rangle$. Činitel $e^{-\frac{i}{\hbar}(E_m + \hbar\omega_{\mathbf{q}})(t-t')}$ pak popisuje časovou změnu fáze v koncovém stavu. Vymírání počátečního stavu je popsáno exponentou $e^{-\frac{t'}{2\tau_n}}$. Srážky jsou jen další mechanismus vymírání počátečního stavu, takže jejich účinek na záření započteme záměnou $\frac{1}{\tau}$ za

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_n} + \frac{1}{\tau_c}. \quad (206)$$

²⁴O správnosti úpravy se lze jednoduše přesvědčit integrací po časech t a t' . Méně zřejmé je, jak taková úprava člověka napadne. Je založena na obecné Fourierově transformaci konvoluce $\int d\omega e^{-i\omega t} a_\omega b_\omega = \int dt' a(t-t')b(t')$.

Rozdělení fotonů při započtení srážek je tedy Lorentzovské,²⁵

$$p_{\lambda\mathbf{q}} = \frac{1}{2\epsilon\hbar\omega_{\mathbf{q}}} \frac{|\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}\mathbf{d}_{mn}|^2(E_m - E_n)^2}{(E_m + \hbar\omega_{\mathbf{q}} - E_n)^2 + \frac{\hbar^2}{4\tau^2}}. \quad (207)$$

Pouze vzroste šířka čáry podle (206).

10 Vynucené přechody atomu

Emise fotonu z atomu je prototypem přeměny energie hmoty na energii záření. Opačným procesem je zachycení fotonu, tedy přeměna energie záření na energii hmoty. Při popisu těchto opačných procesů musíme uvažovat nenulovou energii elektromagnetického pole v počáteční podmínce.

Počáteční hodnota elektromagnetického pole může být všelijaká. Uvnitř pece nebo nějaké dutinky je atom vystaven tepelnému záření. V prostoru je vystaven směsi tepelných záření ze svého okolí. V plynu na vybraný atom dopadá záření emitované z dalších podobných atomů plynu. Nejčastěji však na atom záměrně svítíme a to buď lampou nebo laserem. Je zřejmé, že nemůžeme pokrýt všechny kombinace polí, kterým jsou atomy při pokusech vystavovány. Podívejme se alespoň na některé.

10.1 Absorpce a stimulovaná emise

Uvažujme nejprve, že elektromagnetické pole je ve stavu s ostrým počtem fotonů $|\{N\}\rangle$ a atom je ve stavu $|\psi_n\rangle$. Počáteční hodnota vlnové funkce tedy je $|\{N\}\rangle|\psi_n\rangle$. Tyto stavy jsou vlastními stavy částečných Hamiltoniánů $H_e|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ a $H_T|\{N\}\rangle = E_{\text{ph}}|\{N\}\rangle$,

²⁵Tento výsledek můžeme odvodit také tak, že okamžikem srážky přerušíme možnost přechodu do koncového stavu a spočteme střední hodnotu konečného stavu přes všechny hodnoty doby volného letu. Pro $t \gg t_c$ pak máme

$$\begin{aligned} \left\langle \langle 1_{\lambda\mathbf{q}} | \langle \psi_m | \Psi \rangle \right\rangle &= C' \frac{1}{2\tau_c} \int_0^\infty dt_c e^{-\frac{t_c}{2\tau_c}} \int_0^{t_c} dt' e^{-\frac{i}{\hbar}(E_m + \hbar\omega_{\mathbf{q}})(t-t')} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t' - \frac{t'}{2\tau_n}} \\ &= C' \int_0^\infty dt' e^{-\frac{i}{\hbar}(E_m + \hbar\omega_{\mathbf{q}})(t-t')} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t' - t' \left(\frac{1}{2\tau_n} + \frac{1}{2\tau_c}\right)}. \end{aligned}$$

Možnost vyzářit foton v okamžiku t' jsme omezili na časy $t' < t_c$ horní integrační mezí. Čas t_c bereme za náhodný a přes možné hodnoty střeďujeme. Při střeďování jsme použili $\frac{1}{2\tau_c}$, neboť pravděpodobnost p_c odpovídá vymírání kvadrátu vlnové funkce. Při úpravě jsme provedli integraci po částech.

$E_{\text{ph}} = \sum_{\lambda\mathbf{q}} N_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}}$. Energii počátečního stavu vůči neinteragujícím elektronům a poli, označíme $E_{\text{in}} = E_n + E_{\text{ph}} + i0$.

Budeme postupovat podobně jako při emisi. K počátečnímu stavu zavedeme projekční operátor $\mathbf{P} = |\{N\}\rangle|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\langle\{N\}|$ a jeho doplněk $\mathbf{Q} = 1 - \mathbf{P}$. Při odvození selfenergie jsme nevyužívali vlastnosti počátečního stavu, resolventa a selfenergie odvozené v kapitole 8.1 tedy platí i pro tento případ. Stačí vyhodnotit selfenergii

$$\begin{aligned}\Sigma_n &= \langle\{N\}|\langle\psi_n|H'\frac{1}{E_{\text{in}} - H_e - H_{\text{T}}}H'|\psi_n\rangle|\{N\}\rangle \\ &= \langle\psi_n|\mathbf{j} \langle\{N\}|\mathbf{A}(0)\frac{1}{E_{\text{in}} - H_e - H_{\text{T}}}\mathbf{A}(0)|\{N\}\rangle\mathbf{j}|\psi_n\rangle \\ &= \sum_m \mathbf{j}_{nm} \langle\{N\}|\mathbf{A}(0)\frac{1}{E_{\text{in}} - E_m - H_{\text{T}}}\mathbf{A}(0)|\{N\}\rangle\mathbf{j}_{mn}. \quad (208)\end{aligned}$$

Úpravy jsou obdobné jako při výpočtu (173). První řádek připomíná, jak je příslušná selfenergie zavedena. Ve druhém je dosazen interakční Hamiltonián. Ve třetím řádku je elektronový Hamiltonián rozvinut podle vlastních stavů a použity maticové elementy oprátoru proudu $\mathbf{j}_{mn} = \langle\psi_m|\mathbf{j}|\psi_n\rangle$. Pokračujeme úpravami fotonové části

$$\begin{aligned}\Sigma_n &= \sum_{m\lambda\mathbf{q}\kappa\mathbf{k}} \frac{\Delta}{(2\pi)^3} \frac{\hbar}{2\epsilon\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{k}}}} \mathbf{j}_{nm} \mathbf{e}_{\kappa\mathbf{k}} \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} \mathbf{j}_{mn} \\ &\quad \times \langle\{N\}|\left(a_{\kappa\mathbf{k}}^\dagger + a_{\kappa-\mathbf{k}}\right) \frac{1}{E_{\text{in}} - E_m - H_{\text{T}}}\left(a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger + a_{\lambda-\mathbf{q}}\right)|\{N\}\rangle \\ &= \sum_{m\lambda\mathbf{q}} \frac{\Delta}{(2\pi)^3} \frac{\hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}} |\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}\mathbf{j}_{nm}|^2 \langle\{N\}|\left(a_{\lambda-\mathbf{q}}^\dagger \frac{1}{E_{\text{in}} - E_m - H_{\text{T}}} a_{\lambda-\mathbf{q}} \right. \\ &\quad \left. + a_{\lambda\mathbf{q}} \frac{1}{E_{\text{in}} - E_m - H_{\text{T}}} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger\right)|\{N\}\rangle \\ &= \sum_{m\lambda} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}} |\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}\mathbf{j}_{nm}|^2 \left(\frac{N_{\lambda-\mathbf{q}}}{E_{\text{in}} - E_m - E_{\text{ph}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{N_{\lambda\mathbf{q}} + 1}{E_{\text{in}} - E_m - E_{\text{ph}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} \right) \\ &= \sum_{m\lambda} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\epsilon\hbar\omega_{\mathbf{q}}} |\mathbf{d}_{nm}\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}|^2 (E_n - E_m)^2 \\ &\quad \times \left(\frac{N_{\lambda-\mathbf{q}}}{E_n - E_m + \hbar\omega_{\mathbf{q}} + i0} + \frac{N_{\lambda\mathbf{q}} + 1}{E_n - E_m - \hbar\omega_{\mathbf{q}} + i0} \right). \quad (209)\end{aligned}$$

V prvním řádku jsou dosazeny vektorové potenciály ve druhém kvan-

tování (36) s rozepsanými funkcemi rovinných vln (22). Ve druhém řádku využíváme, že stavy $a_{\kappa\mathbf{k}}^\dagger|\{N\}\rangle$ a $a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger|\{N\}\rangle$ jsou na sebe kolmé pokud $\kappa\mathbf{k} \neq \lambda\mathbf{q}$. Ve třetím řádku nejprve použijeme vlastnosti stavů s ostrým počtem, $H_{\text{T}}a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger|\{N\}\rangle = (E_{\text{ph}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}})a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger|\{N\}\rangle$ a podobně $H_{\text{T}}a_{\lambda\mathbf{q}}|\{N\}\rangle = (E_{\text{ph}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}})a_{\lambda\mathbf{q}}|\{N\}\rangle$ a také $\langle\{N\}|a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{q}}|\{N\}\rangle = N_{\lambda\mathbf{q}}$ a $\langle\{N\}|a_{\lambda\mathbf{q}} a_{\lambda\mathbf{q}}^\dagger|\{N\}\rangle = N_{\lambda\mathbf{q}} + 1$. Nakonec nahradíme sumu integrálem. Ve čtvrtém řádku jsou maticové elementy proudu vyjádřeny v dipólovém tvaru (66) a je dosazena počáteční energie.

Elektromagnetické vakuum je také vlastním stavem s ostrým počtem fotonů – prostě pro $|\{N\}\rangle = |\emptyset\rangle$ je $N_{\lambda\mathbf{q}} = 0$ pro všechny mody. Dosadíme-li vakuum do selfenergie (209), první člen v závorce (209) zanikne zatímco druhý člen přechází na selfenergii (174). Z toho je patrné, že druhý člen (209) popisuje emisi fotonu. Oproti emisi fotonu ve vakuu, je pravděpodobnost zvýšena faktorem $N_{\lambda\mathbf{q}} + 1$. Příspěvků úměrnému počtu fotonů se říká stimulovaná, na rozdíl od emise spontánní, která existuje i v elektromagnetickém vakuu.

První člen (209) je velký když $E_m \approx E_n + \hbar\omega_{\mathbf{q}}$. Foton je tedy pohlcen a elektron při přechodu energii získá. Tento proces se nazývá záchytem fotonu nebo absorpcí světla. Díky absorpci má i základní stav atomu konečnou dobu života, pokud jsou v jeho okolí elektromagnetické vlny. Absorpce a stimulovaná emise jsou přechody vynucené interakcí atomu s fotony.

10.2 Přechody vynucené elektromagnetickým polem ve stacionárním smíšeném stavu

Snadno si představíme, že je-li elektromagnetické pole ve stacionárním smíšeném stavu popsán středními hustotami fotonů $n_{\lambda\mathbf{q}}$ v modech, počty fotonů v selfenergii (209) pouze přejdou na střední hodnoty. Selfenergie má pak tvar

$$\begin{aligned} \Sigma_n = & \sum_{m\lambda} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\epsilon\hbar\omega_{\mathbf{q}}} |\mathbf{d}_{nm}\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}|^2 (E_n - E_m)^2 \\ & \times \left(\frac{n_{\lambda-\mathbf{q}}}{E_n - E_m + \hbar\omega_{\mathbf{q}} + i0} + \frac{n_{\lambda\mathbf{q}} + 1}{E_n - E_m - \hbar\omega_{\mathbf{q}} + i0} \right). \end{aligned} \quad (210)$$

Úplný důkaz této záměny vyžaduje použít některou z náročných metod kvantové statistiky. Necháme raději výraz (210) k věření.

10.3 Vypálení díry do spektrální čáry

Doba života excitovaného stavu vypovídá o velikosti jeho dipólového momentu. V principu můžeme dobu života změřit ze šířky spektrální čáry, ve skutečnosti je čára rozšířena řadou dalších mechanismů, jako je například srážkové rozšíření. Pro zářiče v pevném stavu srážkové rozšíření odpadá, šířku čáry ale ovlivňují nahodilé potenciály v okolí měřené molekuly. Vliv těchto nahodilých polí lze vyloučit metodou známou jako vypalování díry do spektrální čáry.

Popišme si nejprve absorpční spektrum pro molekuly v nahodilém poli. Předpokládáme, že teplota je dostatečně nízká, takže všechny molekuly jsou v základním stavu o energii E_1 . Na molekuly svítíme světlem o frekvenci $\omega_{\mathbf{q}}$. Tímto světlem molekuly mohou přecházet do vybuzeného stavu s energií $E_2 \approx E_1 + \hbar\omega_{\mathbf{q}}$.

Díky nahodilým potenciálům je rozdíl energií $E_{\Delta} = E_2 - E_1$ pro každou molekulu trochu jiný. Zavedeme distribuci molekul o daném energetickém rozdílu. Je-li v systému dN molekul, jejichž rozdíl energií leží v intervalu $(E_{\Delta}, E_{\Delta} + dE_{\Delta})$, pak pravděpodobnost $F(E_{\Delta})$, že molekula má energetický rozdíl E_{Δ} je

$$F(E_{\Delta}) = \frac{1}{N} \frac{dN}{dE_{\Delta}}, \quad (211)$$

kde N je celkový počet molekul v systému.²⁶

Chceme-li popsat pravděpodobnost záchytu fotonu $\lambda_{\mathbf{q}}$ molekulami, musíme sečíst příspěvky jednotlivých intervalů energií,

$$p_{\lambda_{\mathbf{q}}} = \int dE_{\Delta} F(E_{\Delta}) \frac{1}{2\epsilon \hbar \omega_{\mathbf{q}}} \frac{|\mathbf{e}_{\lambda_{\mathbf{q}}} \mathbf{d}_{12}|^2 E_{\Delta}^2}{(E_{\Delta} - \hbar \omega_{\mathbf{q}})^2 + \frac{\hbar^2}{4\tau^2}}. \quad (212)$$

Použili jsme vzorec pro záchyt fotonu s obsazením $n_{\lambda_{\mathbf{q}}} = 1$ v měřeném modu a nula jinde.

Pokud jsou nahodilá pole silná, je přirozená šířka čáry malá proti šířce distribuce rozdíl energií a pod integrálem můžeme použít přibliž-

²⁶Zjevně

$$N = \int dN = N \int F(E_{\Delta}) dE_{\Delta},$$

takže F je normována na jedničku.

žení nekonečně úzké čáry,

$$\frac{\frac{\hbar}{\tau}}{(E_{\Delta} - \hbar\omega_{\mathbf{q}})^2 + \frac{\hbar^2}{4\tau^2}} \approx 2\pi\delta(E_{\Delta} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}), \quad (213)$$

pro které

$$p_{\lambda\mathbf{q}} = F(\hbar\omega_{\mathbf{q}}) \frac{\pi}{\epsilon} |\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}\mathbf{d}_{12}|^2 \hbar\omega_{\mathbf{q}}. \quad (214)$$

Jako vidno, šířka absorpční čáry odráží roztyl energetických rozdílů a v této limitě nedovoluje určit přirozenou šířku čáry.

Předpokládejme, že se molekula po zachycení fotonu natolik změní, že nedokáže přejít zpět do základního stavu. Pak dvě měření prováděná za sebou nepovedou na stejný výsledek, neboť každým měřením se změní distribuce F . Toho jevu se užívá k vyloučení vlivu nahodilých polí.

Vyjdeme z dosud neosvětleného vzorku, na kterém slabým světlem naměříme pomocí absorpční čáry a vztahu (214) distribuci F . Pak vzorek osvětlíme světlem o jediné ostré frekvenci ω_0 a polarizaci \mathbf{e}_0 . Počet fotonů v tomto modu je dán hustotou energie světla $U = \hbar\omega_0 n_0$.

Pravděpodobnost, že molekula s rozdílem energií E_{Δ} zachytí foton z osvitu je

$$p_{1 \rightarrow 2}(E_{\Delta}) = \frac{n_0}{2\epsilon\hbar\omega_0} \frac{|\mathbf{e}_0\mathbf{d}_{12}|^2 E_{\Delta}^2}{(E_{\Delta} - \hbar\omega_0)^2 + \frac{\hbar^2}{4\tau^2}} \approx \frac{n_0}{2\epsilon} \frac{|\mathbf{e}_0\mathbf{d}_{12}|^2 \hbar\omega_0}{(E_{\Delta} - \hbar\omega_0)^2 + \frac{\hbar^2}{4\tau^2}}. \quad (215)$$

S touto pravděpodobností molekula ubude z původní distribuce,

$$\frac{\partial F(E_{\Delta}, t)}{\partial t} = -p_{1 \rightarrow 2}(E_{\Delta})F(E_{\Delta}, t), \quad (216)$$

neboli

$$F(E_{\Delta}, t) = F(E_{\Delta}, 0) e^{-p_{1 \rightarrow 2}t}. \quad (217)$$

Pro krátké osvity lze exponentu rozvinout do nejnižšího řádu a pro změnu distribuce $\delta F = F(t) - F(0)$ najdeme

$$\delta F = -F(E_{\Delta}, 0) p_{1 \rightarrow 2}t = F(\hbar\omega_0, 0) \frac{n_0 t}{2\epsilon} \frac{|\mathbf{e}_0\mathbf{d}_{12}|^2 \hbar\omega_0}{(E_{\Delta} - \hbar\omega_0)^2 + \frac{\hbar^2}{4\tau^2}}. \quad (218)$$

Jak vidíme, úbytek molekul s rozdílem energií v okolí energie osvitu odráží přirozenou šířku čáry.

Při dalším měření slabým světlem²⁷ se objeví změna na absorpční čáře. Podle (212) je změna pravděpodobnosti záchytu

$$\begin{aligned}
\delta p_{\lambda\mathbf{q}} &= \int dE_{\Delta} \delta F(E_{\Delta}) \frac{1}{2\epsilon \hbar\omega_{\mathbf{q}}} \frac{|\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}\mathbf{d}_{12}|^2 E_{\Delta}^2}{(E_{\Delta} - \hbar\omega_{\mathbf{q}})^2 + \frac{\hbar^2}{4\tau^2}}. \\
&= - \int dE_{\Delta} F(\hbar\omega_0, 0) \frac{n_0 t}{2\epsilon} \frac{|\mathbf{e}_0\mathbf{d}_{12}|^2 \hbar\omega_0}{(E_{\Delta} - \hbar\omega_0)^2 + \frac{\hbar^2}{4\tau^2}} \\
&\quad \times \frac{1}{2\epsilon \hbar\omega_{\mathbf{q}}} \frac{|\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}\mathbf{d}_{12}|^2 E_{\Delta}^2}{(E_{\Delta} - \hbar\omega_{\mathbf{q}})^2 + \frac{\hbar^2}{4\tau^2}}. \\
&= -F(\hbar\omega_0, 0) \frac{n_0 t}{4\epsilon^2} |\mathbf{e}_0\mathbf{d}_{12}|^2 |\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}\mathbf{d}_{12}|^2 \omega_0^2 \tau^2 \\
&\quad \times \int dE_{\Delta} \frac{\frac{\hbar}{\tau}}{(E_{\Delta} - \hbar\omega_0)^2 + \frac{\hbar^2}{4\tau^2}} \frac{\frac{\hbar}{\tau}}{(E_{\Delta} - \hbar\omega_{\lambda\mathbf{q}})^2 + \frac{\hbar^2}{4\tau^2}} \\
&= -F(\hbar\omega_0, 0) \frac{n_0 t}{4\epsilon^2} |\mathbf{e}_0\mathbf{d}_{12}|^2 |\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}}\mathbf{d}_{12}|^2 \omega_0^2 \tau^2 \frac{2 \frac{\hbar}{\tau}}{(\hbar\omega_0 - \hbar\omega_{\lambda\mathbf{q}})^2 + \frac{\hbar^2}{\tau^2}}.
\end{aligned} \tag{219}$$

Z rovnice (219) je vidět, že osvit vypálí do absorpční čáry Lorentzovskou díru, jejíž šířka je dvakrát větší než přirozená šířka čáry. Z vypálené díry lze tedy stanovit přirozenou šířku čáry.

10.4 Stimulovaná emise versus absorpce

Z odvození (209) vidíme, že při stimulované emise vzroste počet fononů v tom modu, který emisi stimuloval. Procesem stimulované emise proto může narůstat energie v jednom modu, což se využívá u laserů. Nárůst energie ve stimulujícím modu lze ukázat postupem podobným rozboru šířky čáry v kapitole (9.1).

Jako počáteční stav si zvolíme stav s ostrým počtem fotonů v jediném modu $|N_{\lambda\mathbf{q}}\rangle$ a atomární stav $|\psi_n\rangle$. Předpokládaným koncovým stavem je $|(N+1)_{\lambda\mathbf{q}}\rangle|\psi_m\rangle$. Podobně jako v rovnici (182) v kapitole (9.1) hledáme příslušný maticový element

$$\langle(N+1)_{\lambda\mathbf{q}}|\langle\psi_m|\Psi\rangle = \oint dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \langle(N+1)_{\lambda\mathbf{q}}|\langle\psi_m|\frac{i\hbar}{E-H}|\psi_n\rangle|N_{\lambda\mathbf{q}}\rangle. \tag{220}$$

²⁷Slabé světlo nemění distribuci.

Opět jako ve výrazu (183) potřebujeme element resolventy

$$\langle (N+1)_{\lambda\mathbf{q}} | \langle \psi_m | \frac{1}{E-H} | \psi_n \rangle | N_{\lambda\mathbf{q}} \rangle = G_{(N+1)_{\lambda\mathbf{q}}m, N_{\lambda\mathbf{q}}n}, \quad (221)$$

který spočteme v přiblížení (184),

$$G_{(N+1)_{\lambda\mathbf{q}}m, N_{\lambda\mathbf{q}}n} = \frac{\langle (N+1)_{\lambda\mathbf{q}} | \mathbf{A}(0) | N_{\lambda\mathbf{q}} \rangle}{E - E_m - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} \frac{\langle \psi_m | \mathbf{j} | \psi_n \rangle}{E - E_n + i\frac{\hbar}{2\tau_n}}. \quad (222)$$

Výraz se liší od (185) pouze maticovým elementem operátoru vektorového potenciálu (36), který je nyní roven $\langle (N+1)_{\lambda\mathbf{q}} | \mathbf{A}(0) | N_{\lambda\mathbf{q}} \rangle = \sqrt{N_{\lambda\mathbf{q}} + 1} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}} \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\Delta}{(2\pi)^3}}$. Pravděpodobnost zvýšení počtu fotonů z N na $N+1$ je

$$p_{\lambda\mathbf{q}}^{N \rightarrow N+1} = (N+1) N_n p_{\lambda\mathbf{q}}, \quad (223)$$

kde $p_{\lambda\mathbf{q}}$ je pravděpodobnost spontánní emise jedním atomem (192) a N_n je počet atomů ve stavu $|\psi_n\rangle$.

Opačným procesem je útlum elektromagnetického pole absorpcí fotonů. Při absorpci přejde atom ze stavu $|\psi_m\rangle$ na stav $|\psi_n\rangle$ a pole z $|N_{\lambda\mathbf{q}}\rangle$ na $|(N-1)_{\lambda\mathbf{q}}\rangle$. Odpovídající maticový element resolventy

$$\langle (N-1)_{\lambda\mathbf{q}} | \langle \psi_n | \frac{1}{E-H} | \psi_m \rangle | N_{\lambda\mathbf{q}} \rangle = G_{(N-1)_{\lambda\mathbf{q}}n, N_{\lambda\mathbf{q}}m}, \quad (224)$$

který spočteme opět v přiblížení (184),

$$G_{(N-1)_{\lambda\mathbf{q}}n, N_{\lambda\mathbf{q}}m} = \frac{\langle (N-1)_{\lambda\mathbf{q}} | \mathbf{A}(0) | N_{\lambda\mathbf{q}} \rangle}{E - E_n - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} \frac{\langle \psi_n | \mathbf{j} | \psi_m \rangle}{E - E_m + i\frac{\hbar}{2\tau_m}}. \quad (225)$$

Maticový element $\langle (N-1)_{\lambda\mathbf{q}} | \mathbf{A}(0) | N_{\lambda\mathbf{q}} \rangle = \sqrt{N_{\lambda\mathbf{q}}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}} \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\Delta}{(2\pi)^3}}$ dává pravděpodobnost snížení počtu fotonů z N na $N-1$

$$p_{\lambda\mathbf{q}}^{N \rightarrow N-1} = N N_m p_{\lambda\mathbf{q}}. \quad (226)$$

V rovnováze o teplotě T jsou počty atomů ve stavech n a m dány Boltzmannovým rozdělením $N_n = Z e^{-\frac{E_n}{k_B T}}$ a $N_m = Z e^{-\frac{E_m}{k_B T}}$. Procesy absorpce a emise jsou také vyrovnány $p_{\lambda\mathbf{q}}^{N \rightarrow N+1} = p_{\lambda\mathbf{q}}^{N+1 \rightarrow N}$, neboť počet fotonů se v rovnováze nemění. Rovnost absorpční a emisní četnosti je možná jen když $(N+1)N_n = NN_m$. Rozdíl atomárních energií je

přibližně energie fotonu $E_n - E_m \approx \hbar\omega_{\mathbf{q}}$, takže $\frac{N_m}{N_n} = e^{\frac{E_n - E_m}{k_B T}} \approx e^{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{k_B T}}$. Odtud dostaneme Bose-Einsteinovo rovnovážné rozdělení $N = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{k_B T}} - 1}$.

Pokud vyvedeme počty různě vybuzených atomů z rovnováhy, automaticky vyvedeme z rovnováhy i rozdělení fotonů. Pokud se nám podaří dosáhnout tak zvané inverzní populace, kdy $N_n > N_m$, bude emise rychlejší než absorpce, $p_{\lambda\mathbf{q}}^{N \rightarrow N+1} > p_{\lambda\mathbf{q}}^{N \rightarrow N-1}$, takže počet fotonů sledovaného modu poroste.²⁸ V tomto režimu pracují lasery.

11 Interakce atomu s koherentním světlem

Podívejme se interakci jednoho atomu se světlem laseru. Zatím jsme odvodili pouze pravděpodobnost, že atom vyzáří nebo zachytí foton. Časový průběh záhytu či vyzáření světla jsme nezkoumali. Tomu se budeme věnovat v této kapitole. Přechod atomu budeme popisovat kvantově – klasický popis atomu nemůže poskytnout ostré barevné čáry. Elektromagnetické pole však popíšeme jako klasické vnější pole.

Pro pohodlný popis využijeme několik zjednodušení:

- Koherentní světlo lze nahradit nekvantovaným elektromagnetickým polem. Toto přiblížení se nazývá klasickým popisem pole. Tímto přiblížením se elektromagnetické pole vnějším parametrem Schrödingerovy rovnice pro atom.
- Atom má pouze dva stavy. Můžeme si je představovat jako s a p stav atomu vodíku. Toto přiblížení je založeno na zkušenosti z předchozí kapitoly, že stavy nezapojené do přechodu ovlivňují proces pouze prostřednictvím opravy k energii stavu prostřednictvím selfenergie.

Žádné z těchto zjednodušení není nezbytné a budeme schopni je v případě potřeby nahradit obecnějšími předpoklady.

11.1 Klasický popis světla laseru

Systém v čistém kvantovém stavu je popsán vlnovou funkcí celého systému atom-světlo, kterou označíme $|\Psi\rangle$ a budeme hledat její časovou

²⁸ Neuvažovali jsme únik fotonů povrchem, útlum světla na nečistotách ap. Tyto jevy přispívají k absorpci.

závislost. Na počátku v čase $t = 0$ předpokládáme, že světlo ještě nedoletělo k atomu, takže vlnová funkce systému je součin vlnové funkce atomu $|\psi_0\rangle$ a koherentního stavu $|\alpha\rangle$, tj. $|\Psi_0\rangle = |\psi_0\rangle|\alpha\rangle$.

Formálně je časová závislost dána vztahem

$$|\Psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} |\Psi_0\rangle, \quad (227)$$

kde Hamiltonián je součet Hamiltoniánu světla, elektronů atomu a interakčního členu, $H = H_T + H_e + H_I$. Jako obvykle je třeba vztah (227) převést na řešitelné rovnice. Naším cílem bude vyloučit pohybové rovnice pro světlo.

Nejprve potlačíme časovou závislost světla²⁹

$$|\tilde{\Psi}\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}H_T t} |\Psi\rangle. \quad (228)$$

Další transformací převedeme koherentní stav formálně na elektromagnetické vakuum³⁰

$$|\Psi_\alpha\rangle = \mathcal{D}_\alpha^\dagger |\tilde{\Psi}\rangle = \mathcal{D}_\alpha^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}H_T t} |\Psi\rangle. \quad (229)$$

Časový vývoj transformované vlnové funkce je následující

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_\alpha\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{D}_\alpha^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}H_T t} |\Psi\rangle \\ &= \mathcal{D}_\alpha^\dagger i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{\frac{i}{\hbar}H_T t} |\Psi\rangle \\ &= \mathcal{D}_\alpha^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}H_T t} \left(-H_T + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) |\Psi\rangle \\ &= \mathcal{D}_\alpha^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}H_T t} (-H_T + H) |\Psi\rangle \\ &= \mathcal{D}_\alpha^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}H_T t} (-H_T + H) e^{-\frac{i}{\hbar}H_T t} \mathcal{D}_\alpha |\Psi_\alpha\rangle. \end{aligned} \quad (230)$$

V prvním řádku jsme pouze dosadili transformovanou vlnovou funkci z (229). Operátor posuvu nezávisí na čase, takže komutuje s časovou derivací, jak ukazuje druhý řádek. Ve třetím řádku je provedena derivace na transformaci časové závislosti světla. Ve čtvrtém řádku použijeme Schrödingerovu rovnici $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = H|\Psi\rangle$. V posledním řádku je vlnová funkce sestrojena z inverse vztahu (229).

²⁹ Tento krok je podobný jako potlačení časových závislostí vlnových funkcí v Diracově reprezentaci.

³⁰ Koherentní stav vyrobíme z vakua operátorem posuvu $|\alpha\rangle = \mathcal{D}_\alpha |\emptyset\rangle$. Vynásobíme-li rovnici inverzním operátorem, převedeme koherentní stav na vakuum $\mathcal{D}_\alpha^\dagger |\alpha\rangle = \mathcal{D}_\alpha^\dagger \mathcal{D}_\alpha |\emptyset\rangle = |\emptyset\rangle$.

Označíme transformovaný Hamiltonián

$$\begin{aligned}
H_\alpha &= \mathcal{D}_\alpha^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}H_{\text{T}}t} (H - H_{\text{T}}) e^{-\frac{i}{\hbar}H_{\text{T}}t} \mathcal{D}_\alpha \\
&= \mathcal{D}_\alpha^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}H_{\text{T}}t} (H_e + H_{\text{I}}) e^{-\frac{i}{\hbar}H_{\text{T}}t} \mathcal{D}_\alpha \\
&= H_e + \mathcal{D}_\alpha^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}H_{\text{T}}t} H_{\text{I}} e^{-\frac{i}{\hbar}H_{\text{T}}t} \mathcal{D}_\alpha.
\end{aligned} \tag{231}$$

Nejprve jsme použili, že Hamiltonián je složen ze tří částí. Pak skutečnost, že obě transformace působí pouze na operátory elektromagnetického pole a elektronový Hamiltonián na nich nezávisí.

Nakonec použijeme skutečnost, že interakční Hamiltonián nějak závisí na kreačních a anihilačních operátorech, $H_{\text{I}} \equiv H_{\text{I}}[a, a^\dagger]$. Transformace působí pouze na tyto operátory

$$\mathcal{D}_\alpha^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}H_{\text{T}}t} a e^{-\frac{i}{\hbar}H_{\text{T}}t} \mathcal{D}_\alpha = \mathcal{D}_\alpha^\dagger a e^{i\omega_0 t} \mathcal{D}_\alpha = (a + \alpha) e^{i\omega_0 t}. \tag{232}$$

a sdruženě

$$\mathcal{D}_\alpha^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}H_{\text{T}}t} a^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}H_{\text{T}}t} \mathcal{D}_\alpha = (a^\dagger + \bar{\alpha}) e^{-i\omega_0 t}. \tag{233}$$

Odtud dostaneme výsledný transformovaný Hamiltonián

$$H_\alpha = H_e + H_{\text{I}}[(a + \alpha) e^{i\omega_0 t}, (a^\dagger + \bar{\alpha}) e^{-i\omega_0 t}]. \tag{234}$$

V klasickém popisu světla zanedbáme kvantové fluktuace pole kolem jeho koherentní hodnoty,

$$H_\alpha^{\text{kl}} = H_e + H_{\text{I}}[\alpha e^{i\omega_0 t}, \bar{\alpha} e^{-i\omega_0 t}]. \tag{235}$$

Toto zanedbání je podobné tomu, jako když v nepřítomnosti laserového signálu zcela opomineme, že atom interaguje se světlem. Pro vlastnosti, u kterých lze ignorovat, že může dojít ke spontánnímu vyzařování energie, je zanedbání fluktuací přípustné.

Složitými transformacemi jsme se dopracovali výsledku, který asi čtenář očekával. Klasické přiblížení znamená, že vektorový potenciál vstupující do interakčního Hamiltoniánu bereme jako číselnou funkci, nikoli jako operátor,

$$H_\alpha^{\text{kl}} \equiv H_{\text{A}}. \tag{236}$$

11.2 Dvouhladinový model a přiblížení rotující vlnou

Každý atom má nekonečně mnoho excitovaných hladin a ty navíc navazují na energie, při kterých je jeden nebo více elektronů uvolněno.

Označíme-li vázané stavy $|\mu\rangle$ a stavy s jedním uvolněným elektronem o hybnosti \mathbf{k} jako $|\mu, \mathbf{k}\rangle$, pak i Hamiltonián jednoho atomu s maximálně jedním odtrženým elektronem je poměrně rozsáhlá veličina

$$\begin{aligned} H_{\mathbf{A}} &= \sum_{\mu\nu} |\mu\rangle H_{\mu\nu} \langle\nu| \\ &+ \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sum_{\mu\nu} (|\mu\rangle H_{\mu\nu\mathbf{k}} \langle\nu\mathbf{k}| + |\nu\mathbf{k}\rangle \bar{H}_{\mu\nu\mathbf{k}} \langle\mu|) \\ &+ \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \sum_{\mu\nu} |\mu\mathbf{p}\rangle H_{\mu\mathbf{p}\nu\mathbf{k}} \langle\nu\mathbf{k}|. \end{aligned} \quad (237)$$

Předpokládáme, že známe diagonální podobu tohoto Hamiltoniánu za nepřítomnosti světla, pro $\mathbf{A} = 0$. Vektorový potenciál propojuje různé hladiny.

Pokud nás zajímá přechod mezi dvěma blízkými hladinami, můžeme další hladiny zanedbat. Místo téměř plného Hamiltoniánu (237) bereme jednoduchý modelový Hamiltonián

$$H_{\mathbf{A}} = |s\rangle E_s \langle s| + |p\rangle E_p \langle p| + |s\rangle \mathbf{A} \mathbf{j}_{sp} \langle p| + |p\rangle \mathbf{A} \mathbf{j}_{ps} \langle s|. \quad (238)$$

Značením podsouváme, že se jedná o s a p stavy atomu. Není to nutné, mohou to být libovolné stavy. Budeme pouze předpokládat, že stav označený s leží energeticky pod stavem p , tedy $E_s < E_p$.

Pokud světlo rozložíme do modů

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^- + \mathbf{A}^+ = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon\omega_{\mathbf{q}}}} \mathbf{f}_{\lambda\mathbf{q}}(0) (\bar{\alpha}_{\lambda-\mathbf{q}} e^{i\omega_{\mathbf{q}}t} + \alpha_{\lambda\mathbf{q}} e^{-i\omega_{\mathbf{q}}t}) \quad (239)$$

dostaneme interakční člen jako součet příspěvků přes kladné frekvence \mathbf{A}^- a záporné frekvence \mathbf{A}^+ . Každá ze složek má jinou úlohu. Složka \mathbf{A}^- , která vznikla z anihilačního operátoru a popisuje pohlcení fotonu atomem, vyhodí elektron ze stavu s do stavu p . Naopak, \mathbf{A}^+ shodí elektron z p do s . Příspěvky, ve kterých se složka \mathbf{A}^+ pokouší převést ze stavu s do stavu p a přitom mu bere energii můžeme vyloučit. Stejně tak je zanedbatelný příspěvek \mathbf{A}^- k přechodu z p do s . Zjednodušený Hamiltonián tedy zní

$$H_{\mathbf{A}} = |s\rangle E_s \langle s| + |p\rangle E_p \langle p| + |s\rangle \mathbf{A}^+ \mathbf{j}_{sp} \langle p| + |p\rangle \mathbf{A}^- \mathbf{j}_{ps} \langle s|. \quad (240)$$

Toto zanedbání se nazývá přiblížení rotující vlnou. Přestože vektorový potenciál v tomto přiblížení není reálný ale komplexní, Hamiltonián je Hermitovský.

Nakonec ještě drobné přiblížení, kterým si ušetříme psaní. Jako interakci uvažujeme pouze dipólový člen lineární ve vektorovém potenciálu

$$\frac{E_s - E_p}{i\hbar} \mathbf{A}^+ \approx i\omega_{\mathbf{q}} \mathbf{A}^+ = -\frac{\partial \mathbf{A}^+}{\partial t} = \mathbf{E}^+. \quad (241)$$

Frekvence přispívajících modů jsou totiž velmi blízké rozdílu energií obou hladin, $\hbar\omega_{\lambda\mathbf{q}} \approx E_p - E_s$, jinak nemá přiblížení dvouhladinovým modelem smysl.

Výsledný modelový Hamiltonián je

$$H_{\mathbf{A}} = |s\rangle E_s \langle s| + |p\rangle E_p \langle p| + |s\rangle \mathbf{E}^+ \mathbf{d}_{sp} \langle p| + |p\rangle \mathbf{E}^- \mathbf{d}_{ps} \langle s|. \quad (242)$$

Přehlednější je maticový zápis

$$H_{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} E_s & \mathbf{E}^+ \mathbf{d}_{sp} \\ \mathbf{E}^- \mathbf{d}_{ps} & E_p \end{pmatrix}. \quad (243)$$

11.3 Rabiho oscilace

V přiblížení druhého řádu jsme spočetli, že vlivem pole může elektron přeskočit ze stavu s do stavu p , ale i naopak. Pokud je vnější pole silné, budou probíhat oba procesy a budou se mísit nebo střídát. Jak takové neustálé přechody mezi stavy probíhají si spočteme z dvouhladinového modelu.

Pro jednoduchost uvažujeme světlo laseru, které je náhle zapnuto v čase $t = 0$ a pak svítí s neměnnou frekvencí a intenzitou

$$\mathbf{E}^+ \mathbf{d}_{sp} = V e^{-i\omega_0 t} \quad \text{pro} \quad t > 0. \quad (244)$$

Jako počáteční podmínku vezmeme atom ve stavu s .

Budeme tedy řešit časovou Schrödingerovu rovnici

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_s \\ \psi_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_s & V e^{-i\omega_0 t} \\ V e^{i\omega_0 t} & E_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_s \\ \psi_p \end{pmatrix}, \quad (245)$$

neboli soustavu dvou rovnic

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_s &= E_s \psi_s + V e^{-i\omega_0 t} \psi_p \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_p &= E_p \psi_p + V e^{i\omega_0 t} \psi_s. \end{aligned} \quad (246)$$

Časová závislost Hamiltonánu je nepříjemná komplikace rovnice. V přiblížení rotující vlny ji lze odstranit substitucí

$$\tilde{\psi}_p = e^{-i\omega_0 t} \psi_p, \quad (247)$$

kterou soustava (246) přejde na soustavu s konstantními koeficienty³¹

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_s &= E_s \psi_s + V \tilde{\psi}_p \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}_p &= (E_p - \hbar\omega_0) \tilde{\psi}_p + V \psi_s. \end{aligned} \quad (248)$$

Řešení soustavy předpokládáme ve tvaru

$$\psi \equiv \begin{pmatrix} \psi_s \\ \tilde{\psi}_p \end{pmatrix} = e^{-i\omega_a t} \psi^a + e^{-i\omega_b t} \psi^b, \quad (249)$$

kde ψ^ν s $\nu = a, b$ nezávisí na čase a představují dvě nezávislá řešení soustavy

$$\begin{aligned} \hbar\omega_\nu \psi_s^\nu &= E_s \psi_s^\nu + V \tilde{\psi}_p^\nu \\ \hbar\omega_\nu \tilde{\psi}_p^\nu &= (E_p - \hbar\omega_0) \tilde{\psi}_p^\nu + V \psi_s^\nu. \end{aligned} \quad (250)$$

Soustava má řešení jen když

$$\hbar\omega_{a,b} = E_c \pm \sqrt{V^2 + \Delta^2}. \quad (251)$$

Zde $E_c = \frac{1}{2}(E_s + E_p - \hbar\omega_0)$ je střední frekvence a $\Delta = \frac{1}{2}(E_p - E_s - \hbar\omega_0)$ je rozladění světla vůči energii přechodu.

Pro velké kladné rozladění $\Delta \gg |V|$ jde $\sqrt{V^2 + \Delta^2} \rightarrow \Delta$ a $\hbar\omega_a \rightarrow E_p - \hbar\omega_0$ odpovídá kmitům stavu p zatímco $\hbar\omega_b \rightarrow E_s$ odpovídá stavu s . Pro velké záporné rozladění $\Delta \ll -|V|$ jde $\sqrt{V^2 + \Delta^2} \rightarrow -\Delta$ a role prohodí, $\hbar\omega_a \rightarrow E_s$ zatímco $\hbar\omega_b \rightarrow E_p - \hbar\omega_0$. Pro malá rozladění jsou stavy promíchány.

Ještě musíme řešení nastavit na počáteční hodnotu v $t = 0$, kdy předpokládáme atom na dolní hladině, tj. $\psi_s = 1$ a $\tilde{\psi}_p = \psi_p = 0$. To nám dvě podmínky

$$\psi_s^a + \psi_s^b = 1 \quad \text{a} \quad \psi_p^a + \psi_p^b = 0. \quad (252)$$

³¹ Přiblížení rotující vlnou je nutné. Pokud bychom v Hamiltoniánu zachovali celý vektorový potenciál, po substituci by zanedbané členy oscillovaly s frekvencí $2\omega_0$.

Vzájemný poměr s a p složek v řešeních je dán soustavou (250),³²

$$\psi_p^a = -\frac{V}{\Delta - \sqrt{V^2 + \Delta^2}}\psi_s^a \quad \psi_p^b = -\frac{V}{\Delta + \sqrt{V^2 + \Delta^2}}\psi_s^b. \quad (253)$$

S počáteční podmínkou (252) z těchto vztahů plyne

$$\psi_s^a = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\Delta}{\sqrt{V^2 + \Delta^2}} \right) \quad \psi_s^b = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\Delta}{\sqrt{V^2 + \Delta^2}} \right). \quad (254)$$

Je-li $\Delta \gg |V|$ je a -řešení blízké p stavu a má malou amplitudu, zatímco b -řešení je blízké s stavu a má amplitudu blízko jedné. Pro $\Delta \ll -|V|$ se role prohodí, takže řešení blízké stavu s má vždy větší amplitudu.

Kvadrát amplitudy vlnové funkce ve stavu je

$$|\psi_s|^2 = |e^{-i\omega_a t}\psi_s^a + e^{-i\omega_b t}\psi_s^b|^2 = 1 - \frac{V^2}{V^2 + \Delta^2} \sin^2 \left(\frac{1}{2}\omega_{\text{Rabi}}t \right), \quad (255)$$

kde

$$\omega_{\text{Rabi}} = \frac{2}{\hbar} \sqrt{V^2 + \Delta^2} \quad (256)$$

je Rabiho frekvence. Pravděpodobnost, že najdeme atom ve stavu s tedy klesá a stoupá s periodou danou Rabiho frekvencí. Obsazení stavu p nemusíme počítat, je dáno normou $|\psi_p|^2 + |\psi_s|^2 = 1$.

Srovnejme Rabiho oscilace s popisem přechodů pomocí pravděpodobnosti ve druhém řádu síly interakce, neboli ve druhém řádu velikosti elektrického pole. Zanedbáme-li konečnou šířku čáry, pak podle (209) přechod nastane jen když je světlo přesně naladěno, $\Delta = 0$. Jelikož jsme zanebdali spontánní přechody, je pravděpodobnost přechodů dolů $p \rightarrow s$ a nahoru $s \rightarrow p$ stejná. Rovnováha se tedy ustaví pro poloviční zaplnění obou hladin.

V neporuchovém výrazu (255) jsou přechody možné i při konečném rozladění. Nedojde k ustavení rovnováhy, ale obsazení se neustále přelévá mezi stavy s a p . Frekvence přelévání – Rabiho frekvence – je nenulová i když je světlo přesně naladěno na počáteční a koncový stav. V tomto případě může světlo stav s úplně vyprázdnit, což je ve druhém řádu vyloučeno.

³²Použijeme třeba druhou rovnici a nakonec dosadíme za frekvenci $\omega_{a,b}$.

12 Optická Blochova rovnice

Popis atomu vlnovou funkcí je omezen na čisté kvantové stavy. Abychom popis rozšířili i na stavy smíšené, zavedeme redukovanou matici hustoty.

Měřitelná veličina \mathcal{S} je dána maticovým elementem

$$\mathcal{S} = \langle \psi | S | \psi \rangle = S_{ss} \psi_s \bar{\psi}_s + S_{sp} \psi_p \bar{\psi}_s + S_{ps} \psi_s \bar{\psi}_p + S_{pp} \psi_p \bar{\psi}_p = \mathbf{Tr}(\rho_\psi S). \quad (257)$$

Pro čistý stav ψ je systém tedy popsán maticí

$$\rho_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} \psi_s \bar{\psi}_s & \psi_s \bar{\psi}_p \\ \psi_p \bar{\psi}_s & \psi_p \bar{\psi}_p \end{pmatrix}. \quad (258)$$

O systému říkáme, že je ve smíšeném stavu, když skutečný stav neznáme, ale může určit pravděpodobnost w_ψ , se kterou by to stav ψ mohl být. Pro měřitelnou veličinu pak můžeme určit pouze střední hodnotu přes všechny možné stavy,

$$\mathcal{S} = \sum_\psi w_\psi \langle \psi | S | \psi \rangle = \sum_\psi w_\psi \mathbf{Tr}(\rho_\psi S) = \mathbf{Tr}(\rho S). \quad (259)$$

Smíšený stav je tedy popsán redukovanou maticí

$$\rho = \sum_\psi w_\psi \rho_\psi = \begin{pmatrix} \rho_{ss} & \rho_{sp} \\ \rho_{ps} & \rho_{pp} \end{pmatrix}. \quad (260)$$

Tato matice se nezadáva výčtem pravděpodobností, ale hodnotou maticových elementů.

Elementy redukované matice hustoty mají přímočarou interpretaci pro velký soubor atomů. Vezměme si N atomů v objemu Ω . Počty atomů ve stavech s a p jsou

$$N_s = N \rho_{ss} \quad N_p = N \rho_{pp}. \quad (261)$$

Nediagonální element dává konečnou hodnotu dipólu $\mathbf{d} = \mathbf{Tr}(\rho \mathbf{d})$. Ta je spojena s polarizací systému $\mathcal{P} = \mathcal{D} - \epsilon \mathcal{E}$

$$\mathcal{P} = \frac{N}{\Omega} \mathbf{Tr}(\rho \mathbf{d}) = \frac{N}{\Omega} 2\text{Re}(\rho_{sp} \mathbf{d}_{ps}). \quad (262)$$

V klasickém přiblížení je $\mathcal{E} \equiv \mathbf{E}$.

Vyjádříme-li permitivitu prostředí ϵ přes permitivitu vakua $\epsilon_0 \equiv \epsilon$ a susceptibilitu χ vztahem $\epsilon = \epsilon(1 + \chi)$, potom pro isotropní prostředí,

kde polarizace a elektrické pole mají stejný směr můžeme susceptibilitu najít z polarizace,³³

$$\chi = \frac{\mathcal{P}^+}{\mathbf{E}^+} = \frac{N}{\Omega} \rho_{sp} \frac{\mathbf{d}_{ps}}{\mathbf{E}^+} = \frac{N}{\Omega} \frac{\rho_{sp}}{V} e^{i\omega_0 t} |\mathbf{d}_{ps}|^2. \quad (263)$$

12.1 Blochova rovnice

Ze Schrödingerovy rovnice $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$ a její sdružené podoby $-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\psi| = \langle\psi| H$, dostaneme Blochovu rovnici

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \frac{1}{i\hbar} (H\rho - \rho H). \quad (264)$$

Na rozdíl od Schrödingerovy rovnice, do Blochovy rovnice lze započítat přechody, ať již spontánní či vynucené tepelným šumem elektromagnetického pole v okolí. Navíc můžeme snadno započíst i vliv srážek na záření.

Při přechodu $p \rightarrow s$ zanikne atom ve stavu p a přibude atom ve stavu s . Tento proces má charakteristický převrácený čas

$$\gamma_p = \frac{1}{2\tau_p} (n + 1), \quad \text{kde} \quad n = \frac{1}{e^{\frac{1}{k_B T} (E_p - E_s)} - 1} \quad (265)$$

je Bose-Einsteinova distribuce fotonů pro energii přechodu a τ_p je doba života pro spontánní emisi ze stavu p do stavu s . Přechod ze stavu s do p má rychlost $\gamma_s = \frac{1}{2\tau_p} n$.

Pokud na plyn nesvítí laser, je rozdělení atomů mezi stavy s a p dáno bilančními rovnicemi

$$\frac{\partial}{\partial t} N_s = 2\gamma_p N_p - 2\gamma_s N_s \quad \frac{\partial}{\partial t} N_p = 2\gamma_s N_s - 2\gamma_p N_p. \quad (266)$$

Protože neuvažujeme žádné procesy mimo stavy s a p , součet atomů s v těchto stavech se s časem nemění, $\frac{\partial}{\partial t} (N_s + N_p) = 0$. Rovnováha se ustaví když $\frac{\partial}{\partial t} N_s = 0$, takže poměr obsazení

$$\frac{N_p^{\text{eq}}}{N_s^{\text{eq}}} = \frac{\gamma_s}{\gamma_p} = \frac{n}{n + 1} = e^{-\frac{1}{k_B T} (E_p - E_s)} \quad (267)$$

splňuje princip detailní rovnováhy. Z podmínky $N_s^{\text{eq}} + N_p^{\text{eq}} = N$ pak dostaneme

$$N_s^{\text{eq}} = \frac{N}{1 + e^{-\frac{1}{k_B T} (E_p - E_s)}}, \quad N_p^{\text{eq}} = \frac{N e^{-\frac{1}{k_B T} (E_p - E_s)}}{1 + e^{-\frac{1}{k_B T} (E_p - E_s)}}. \quad (268)$$

³³ Použijeme, že $V e^{-i\omega_0 t} = \mathbf{d}_{sp} \mathbf{E}^+$.

Použijeme-li vztah $N_p = N - N_s$ k vyloučení N_p z první rovnice (266), a podobně vyloučíme N_s ze druhé rovnice, můžeme pak tyto rovnice přepsat pomocí rovnovážných rozdělení

$$\frac{\partial}{\partial t} N_s = 2\gamma (N_s^{\text{eq}} - N_s) \quad \frac{\partial}{\partial t} N_p = 2\gamma (N_p^{\text{eq}} - N_p), \quad (269)$$

kde rychlost relaxace je

$$\gamma = \gamma_s + \gamma_p = \frac{1}{2\tau_s} (2n + 1). \quad (270)$$

Relaxaci plynu k rovnovážnému rozdělení můžeme skloubit s Blochovou rovnicí,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \frac{1}{i\hbar} (H\rho - \rho H) + 2\gamma (\rho^{\text{eq}} - \rho). \quad (271)$$

Kromě přechodů mezi stavy lze zahrnout i vliv srážek atomů na matici hustoty. Uvažujme pouze elastické srážky, při kterých se zachovává součet kinetických energií atomů, takže nedojde k přechodu mezi s a p stavy atomů. Přestože nenastane přechod, redukovaná matice se srážkou změní. Po dobu srážky je energie stavu E_s působením narážejícího atomu pozměněna na $E_s + \delta E_s$, takže celková fáze stavu $e^{i\phi_s} = e^{i \int E_s dt}$ se změní o veličinu $e^{i\delta\phi_s} = e^{i \int \delta E_s dt}$, která je v podstatě náhodná. Podobně nahodile se změní i fáze stavu p . Změna fází se vykrátí na diagonálních členech matice hustoty, což odpovídá tomu, že nedochází k přechodům mezi stavy. Mimodiagonální členy ale nahodilým posunem rozdílové fáze $e^{i\delta(\phi_s - \phi_p)}$ vymírají. Označíme

$$\rho^d = \begin{pmatrix} \rho_{ss} & 0 \\ 0 & \rho_{pp} \end{pmatrix} \quad (272)$$

a vymírání mimodiagonálních členů přidáme do Blochovy rovnice

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \frac{1}{i\hbar} (H\rho - \rho H) + 2\gamma (\rho^{\text{eq}} - \rho) + 2\gamma_c (\rho^d - \rho). \quad (273)$$

Přepíšme si Blochovu rovnici do složek

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{ss} &= \frac{V}{i\hbar} e^{-i\omega_0 t} \rho_{ps} - \frac{\bar{V}}{i\hbar} e^{i\omega_0 t} \rho_{sp} - 2\gamma (\rho_{ss} - \rho_{ss}^{\text{eq}}) \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho_{sp} &= \left(\frac{E_s - E_p}{i\hbar} - 2\gamma - 2\gamma_c \right) \rho_{sp} - \frac{V}{i\hbar} e^{-i\omega_0 t} \rho_{ss} + \frac{V}{i\hbar} e^{-i\omega_0 t} \rho_{pp}. \end{aligned} \quad (274)$$

Zbývající dvě rovnice nahradí norma $\rho_{ss} + \rho_{pp} = 1$ a samosdruženost $\rho_{ps} = \bar{\rho}_{sp}$.

Předchozí odvození bez defázování srážkami předpokládá útlum mimodiagonálních členů s rychlostí 2γ , tedy $|\rho_{sp}| \sim e^{-2\gamma t}$. Z časového vývoje ale víme, že spontánní emisí a vynucenými přechody vlnové funkce klesají jako $|\psi_s| \sim e^{-\gamma_s t}$ a $|\psi_p| \sim e^{-\gamma_p t}$. Mimodiagonální členy nejsou doplňovány přechody, pouze koherentním vývojem vlnové funkce. Pokles mimodiagonálních členů je tedy zhruba $|\rho_{sp}| \sim |\psi_s||\psi_p| \sim e^{-(\gamma_s+\gamma_p)t} = e^{-\gamma t}$. Nejsou-li srážkové příspěvky přítomny, můžeme vzít $\gamma_c = -\frac{1}{2}\gamma$ a touto zápornou četností napravit nadhodnocený útlum mimodiagonálních členů.

Opět koeficienty soustavy (274) závisejí na čase. Této časové závislosti se zbavíme zavedením mimodiagonálních elementů ve tvaru

$$\rho_{sp} = e^{-i\omega_0 t} \tilde{\rho}_{sp} \quad \rho_{ps} = e^{i\omega_0 t} \tilde{\rho}_{ps}. \quad (275)$$

Soustava (274) tím přejde na

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{ss} &= \frac{V}{i\hbar} \tilde{\rho}_{ps} - \frac{\bar{V}}{i\hbar} \tilde{\rho}_{sp} - 2\gamma(\rho_{ss} - \rho_{ss}^{\text{eq}}) \\ \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}_{sp} &= \left(\frac{E_s - E_p + \hbar\omega_0}{i\hbar} - 2\gamma - 2\gamma_c \right) \tilde{\rho}_{sp} - \frac{V}{i\hbar} \rho_{ss} + \frac{V}{i\hbar} \rho_{pp}. \end{aligned} \quad (276)$$

Zařazení útlumových mechanismů značně mění chování systému pro dlouhé časy. Bez útlumu řešení věčně osciluje, s útlumem nabývá stacionární hodnoty. Pro pomalá měření spektrálních vlastností je stacionární řešení odpovídajícím popisem.

12.2 Spektrální čáry v susceptibilitě

Ve stacionárním režimu jsou časové derivace nulové a Blochova rovnice (276) se zjednoduší na dvě rovnice pro dvě neznámé³⁴

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{V}{i\hbar} \tilde{\rho}_{ps} - \frac{\bar{V}}{i\hbar} \tilde{\rho}_{sp} - 2\gamma(\rho_{ss} - \rho_{ss}^{\text{eq}}) \\ 0 &= \left(\frac{E_s - E_p + \hbar\omega_0}{i\hbar} - 2\gamma - 2\gamma_c \right) \tilde{\rho}_{sp} - \frac{V}{i\hbar} \rho_{ss} + \frac{V}{i\hbar} \rho_{pp}. \end{aligned} \quad (277)$$

³⁴V soustavě se vyskytuje ještě $\rho_{pp} = 1 - \rho_{ss}$ a $\tilde{\rho}_{ps} = \bar{\tilde{\rho}}_{sp}$. Při výpočtu komplexně sdruženého elementu $\bar{\tilde{\rho}}_{sp}$ je třeba komplexně sdružit druhou rovnici ze sady (277).

Soustava má řešení, jehož mimodiagonální prvek je

$$\tilde{\rho}_{sp} = -V(2\rho_{ss}^{\text{eq}} - 1) \frac{E_s - E_p + \hbar\omega_0 - 2i\hbar(\gamma + \gamma_c)}{(E_s - E_p + \hbar\omega_0)^2 + 4\hbar^2(\gamma + \gamma_c)^2 + 4V^2 \left(1 + \frac{\gamma_c}{\gamma}\right)}. \quad (278)$$

Susceptibilitu spočteme podle vzorce (263),

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{N}{\Omega} \frac{\tilde{\rho}_{sp}}{V} |\mathbf{d}_{ps}|^2 \\ &= -\frac{N}{\Omega} |\mathbf{d}_{ps}|^2 (2\rho_{ss}^{\text{eq}} - 1) \\ &\quad \times \frac{E_s - E_p + \hbar\omega_0 - 2i\hbar(\gamma + \gamma_c)}{(E_s - E_p + \hbar\omega_0)^2 + 4\hbar^2(\gamma + \gamma_c)^2 + 4V^2 \left(1 + \frac{\gamma_c}{\gamma}\right)}. \end{aligned} \quad (279)$$

Imaginární část susceptibility má maximum pro $\hbar\omega_0 = E_p - E_s$. Velkou hodnotu má i v blízkém okolí daném šířkou spektrální čáry.

Spektrální čára má šířku

$$\frac{1}{2\tau} = \sqrt{(\gamma + \gamma_c)^2 + \frac{V^2}{\hbar^2} \left(1 + \frac{\gamma_c}{\gamma}\right)}. \quad (280)$$

Pro slabá pole $V \rightarrow 0$ se vztah (280) zjednoduší na $\frac{1}{2\tau} \rightarrow \gamma + \gamma_c$. Započteme-li kompensaci nadhodnoceného útlumu mimodiagonálních členů, dostaneme $\gamma_c = -\frac{1}{2}\gamma + \gamma'_c$, neboli $\frac{1}{\tau} \rightarrow \gamma + 2\gamma'_c$. Toto je přepis vztahu (206) přes parametry Blochovy rovnice. Parametry Blochovy rovnice tak můžeme ztotožnit s předchozí teorií, $\gamma = \frac{1}{\tau_n}$ a $\gamma'_c = \frac{1}{2\tau_c}$.

Pro silné světlo se spektrální čára rozšíří.³⁵ Pro hodně silná pole je šířka čáry úměrná Rabiho frekvenci přesně naladěného pole.

Rozšíření čáry je jeden z příkladů nelineární odezvy systému na světlo. Blochova rovnice je oblíbená v teorii laserové spektroskopie právě pro snadný popis nelineárních jevů.

12.3 Saturace a oscilace

Blochovu rovnici můžeme používat k výpočtu přechodového chování krátce po zapnutí pulsu. Předpokládejme, že řešení se skládá z již diskutovaného stacionárního řešení a exponenciálních členů

$$\rho = \rho^{\text{st}} + \rho^a e^{\lambda_a t} + \rho^b e^{\lambda_b t} + \rho^c e^{\lambda_c t}. \quad (281)$$

³⁵Neznám správný český název tohoto jevu. Anglický název je *power broadening*.

Amplituda stacionárního členu je dána rovnicí, především detailní rovnováhou mezi emisemi a absorbcemi z tepelného šumu. Amplitudy přidaných členů mohou být jakákoli, jsou určeny pouze počáteční podmínkou.

Po odečtení stacionárního řešení dostaneme ze sady (276) tři sady rovnic,

$$\begin{aligned}\lambda^\nu \rho_{ss}^\nu &= \frac{V}{i\hbar} \tilde{\rho}_{ps}^\nu - \frac{\bar{V}}{i\hbar} \tilde{\rho}_{sp}^\nu - 2\gamma \rho_{ss}^\nu \\ \lambda^\nu \rho_{sp}^\nu &= \left(\frac{E_s - E_p + \hbar\omega_0}{i\hbar} - 2\gamma - 2\gamma_c \right) \rho_{sp}^\nu - 2 \frac{V}{i\hbar} \rho_{ss}^\nu,\end{aligned}\quad (282)$$

kde $\nu = a, b, c$. Jako doplňková rovnice je $\tilde{\rho}_{ps}^\nu = \bar{\rho}_{sp}^\nu$. Obsazení stavu p splňuje $\rho_{pp}^\nu = -\rho_{ss}^\nu$.

Rovnice (282) mají nenulové řešení jen když λ splňuje

$$(\lambda + 2\gamma) \left((\lambda + 2\gamma + 2\gamma_c)^2 + 4\Delta^2 \right) = \frac{4V^2}{\hbar^2} (\lambda + 2\gamma + 2\gamma_c), \quad (283)$$

kde $\hbar\Delta = \frac{1}{2}(E_p - E_s - \hbar\omega_0)$ je rozladění již zavedené pod rovnicí (251).

Jako každá kubická rovnice, má (283) analytické řešení, které ale zabere mnoho řádků. Omezíme se proto na systém, kde srážkové rozšíření není důležité³⁶ a můžeme položit $\gamma_c = 0$. Pak můžeme krátit $\lambda + 2\gamma$ a najít kořeny zbývajících kvadratických rovnic, takže

$$\lambda^a = -2\gamma \quad \lambda^{b,c} = -2\gamma \pm 2i\sqrt{\Delta^2 - \frac{V^2}{\hbar^2}}. \quad (284)$$

13 Λ -systémy

Modelem atomu se dvěma energetickými hladinami můžeme popisovat pouze procesy, při kterých je frekvence světla blízká rozdílu energií vybraných hladin. Pokud systém osvítime ještě jinou barvou, je potřeba započíst další hladinu. Tříhladinové modely dovolují popsat nelineární účinek světla jedné barvy na světlo barvy jiné.

Uvažujme plyn atomů se třemi hladinami $E_s < E_d < E_p$. Skrz tento plyn svítí světlo o frekvenci $\hbar\omega \approx E_p - E_s$. Část světla je pohlcena, což

³⁶ Podmínka $\gamma_c = 0$ neznamená, že srážkové rozšíření vůbec neuvažujeme. Pro nulové srážkové rozšíření jednoduchý relaxační čas nadhodnocuje útlum mimodiagonálních členů matice hustoty a jako kompensaci musíme brát $\gamma_c = -\frac{1}{2}\gamma$.

lze vidět ve snížené průzračnosti. Toto pohlcené světlo je pak znovu vyzářeno do okolí, což lze vidět jako luminiscenci.

Pokud na plyn zasvítíme dalším laserovým svazkem světla o frekvenci $\hbar\Omega \approx E_p - E_d$, vzroste průzračnost plynu pro světlo frekvence ω a také klesne luminiscence na této frekvenci. Tento jev se proto nazývá buď opticky indukovaná průzračnost nebo opticky indukovaný temný stav. V této kapitole si spočteme opticky indukovanou průzračnost.

13.1 Indukované rozladění rezonance

Pro Hamiltonián tříhladinového atomu použijeme opět přiblížení rotující vlny. Působící světlo zahrneme jen pro přechod, kde má rezonanční charakter. Podobně jako v rovnici (245) dostaneme efektivní Hamiltonián

$$H = \begin{pmatrix} E_s & ve^{-i\omega t} & \\ ve^{i\omega t} & E_p & Ve^{i\Omega t} \\ & Ve^{-i\Omega t} & E_d \end{pmatrix}. \quad (285)$$

Hladiny jsou uspořádány tak, aby matice měla tridiagonální tvar, takže nejvyšší hladina je umístěna uprostřed matice. Maticové elementy jsou setrojeny z dipólových momentů a elektrického pole. Jejich původ je zřejmý z polohy v Hamiltoniánu.³⁷

Budeme tedy opět řešit časovou Schrödingerovu rovnici

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_s \\ \psi_p \\ \psi_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_s & ve^{-i\omega t} & \\ ve^{i\omega t} & E_p & Ve^{i\Omega t} \\ & Ve^{-i\Omega t} & E_d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_s \\ \psi_p \\ \psi_d \end{pmatrix}, \quad (286)$$

neboli soustavu tří rovnic

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_s &= E_s \psi_s + ve^{-i\omega t} \psi_p \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_p &= E_p \psi_p + ve^{i\omega t} \psi_s + Ve^{i\Omega t} \psi_d \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_d &= E_d \psi_d + Ve^{-i\Omega t} \psi_p. \end{aligned} \quad (287)$$

Časovou závislost Hamiltonánu odstraníme substitucí

$$\tilde{\psi}_s = e^{i\omega t - \frac{i}{\hbar} E_p t} \psi_s, \quad \tilde{\psi}_p = e^{-\frac{i}{\hbar} E_p t} \psi_p, \quad \tilde{\psi}_d = e^{i\Omega t - \frac{i}{\hbar} E_p t} \psi_d, \quad (288)$$

³⁷ Zjevně na průsečíku stavů s a p je element sestrojenný z dipólu \mathbf{d}_{sp} , takže $ve^{-i\omega t} = \mathbf{E}_\omega^+ \mathbf{d}_{sp}$, a podobně pro elementy mezi p a d stavů.

kterou soustava (287) přejde na soustavu s konstantními koeficienty

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}_s &= \delta \tilde{\psi}_s + v \tilde{\psi}_p \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}_p &= v \tilde{\psi}_s + V \tilde{\psi}_d \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}_d &= \Delta \tilde{\psi}_d + V \tilde{\psi}_p, \end{aligned} \quad (289)$$

kde $\delta = E_s - E_p - \hbar\omega$ a $\Delta = E_d - E_p - \hbar\Omega$.

Řešení soustavy předpokládáme ve tvaru

$$\tilde{\psi} \equiv \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_s \\ \tilde{\psi}_p \\ \tilde{\psi}_d \end{pmatrix} = e^{-i\lambda_a t} c_a \tilde{\psi}^a + e^{-i\lambda_b t} c_b \tilde{\psi}^b + e^{-i\lambda_c t} c_c \tilde{\psi}^c, \quad (290)$$

kde $\tilde{\psi}^\nu$ s $\nu = a, b, c$ nezávisí na čase a představují tři nezávislá řešení soustavy

$$\begin{aligned} \hbar \lambda_\nu \tilde{\psi}_s^\nu &= \delta \tilde{\psi}_s^\nu + v \tilde{\psi}_p^\nu \\ \hbar \lambda_\nu \tilde{\psi}_p^\nu &= v \tilde{\psi}_s^\nu + V \tilde{\psi}_d^\nu \\ \hbar \lambda_\nu \tilde{\psi}_d^\nu &= \Delta \tilde{\psi}_d^\nu + V \tilde{\psi}_p^\nu. \end{aligned} \quad (291)$$

Soustava má řešení jen když frekvence vlastních kmitů splňuje seku-lární rovnici

$$(\delta - \hbar\lambda) (\hbar\lambda(\hbar\lambda - \Delta) - V^2) = v^2(\hbar\lambda - \Delta). \quad (292)$$

Nebudeme řešit kubickou rovnici, omezíme se na diskusi přesně na-laděných frekvencí, $\delta = 0$ a $\Delta = 0$. Potom je řešení rovnice (292) jednoduché

$$\lambda_a = 0 \quad \lambda_{b,c} = \pm \frac{1}{\hbar} \sqrt{v^2 + V^2}. \quad (293)$$

Jedna část řešení se s časem nemění a dvě oscilují s opačnými frek-vencemi.

Vlastní vektor $\tilde{\psi}^a$ je řešením soustavy (291) pro $\delta = 0$, $\Delta = 0$ a $\lambda_a = 0$,

$$\begin{aligned} 0 &= v \tilde{\psi}_p^a \\ 0 &= v \tilde{\psi}_s^a + V \tilde{\psi}_d^a \\ 0 &= V \tilde{\psi}_p^a \end{aligned} \quad \text{takže} \quad \tilde{\psi}^a = \begin{pmatrix} \frac{V}{\sqrt{v^2 + V^2}} \\ 0 \\ -\frac{v}{\sqrt{v^2 + V^2}} \end{pmatrix}. \quad (294)$$

Vlastní vektor $\tilde{\psi}^{b,c}$ je řešením soustavy (291) pro $\delta = 0$, $\Delta = 0$ a $\lambda_{b,c} = \pm \frac{1}{\hbar} \sqrt{v^2 + V^2}$,

$$\begin{aligned} \pm \sqrt{v^2 + V^2} \tilde{\psi}_s^{b,c} &= v \tilde{\psi}_p^{b,c} \\ \pm \sqrt{v^2 + V^2} \tilde{\psi}_p^{b,c} &= v \tilde{\psi}_s^{b,c} + V \tilde{\psi}_d^{b,c} \quad \text{takže} \quad \tilde{\psi}^{b,c} = \begin{pmatrix} \frac{v}{\sqrt{2(v^2+V^2)}} \\ \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{V}{\sqrt{2(v^2+V^2)}} \end{pmatrix} \\ \pm \sqrt{v^2 + V^2} \tilde{\psi}_d^{b,c} &= V \tilde{\psi}_p^{b,c} \end{aligned} \quad (295)$$

Koeficienty $c_{a,b,c}$ určíme z počáteční podmínky v $t = 0$. Na počátku je atom v základním stavu $\tilde{\psi} = \psi_s$. Všechny exponenty jsou v $t = 0$ rovny jedné, takže ze $\sqrt{2(v^2+V^2)}\tilde{\psi} = \sqrt{2(v^2+V^2)}\psi_s$ plyne

$$\begin{aligned} \sqrt{2} V c_a + v c_b + v c_c &= \sqrt{2(v^2+V^2)} & c_a &= \frac{V}{\sqrt{v^2+V^2}} \\ \sqrt{(v^2+V^2)}(c_b - c_c) &= 0 & \text{takže} \quad c_b &= \frac{v}{\sqrt{2(v^2+V^2)}} \\ -\sqrt{2} v c_a + V c_b + V c_c &= 0 & c_c &= c_b \end{aligned} \quad (296)$$

Smotujeme-li celé řešení, dostaneme vlnovou funkci

$$\tilde{\psi} = \begin{pmatrix} \frac{V^2}{v^2+V^2} + \frac{v^2}{v^2+V^2} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \sqrt{v^2+V^2} t\right) \\ - i \frac{v}{\sqrt{v^2+V^2}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \sqrt{v^2+V^2} t\right) \\ -\frac{vV}{v^2+V^2} + \frac{vV}{v^2+V^2} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \sqrt{v^2+V^2} t\right) \end{pmatrix}. \quad (297)$$

Řešení (297) má očekávané rysy. Pro $t = 0$ je stav s plně obsazen a toto plné obsazení se vrací s vlastní periodou systému. Obsazení stavů p a d je úměrné síle čerpání ze stavu s . Složitější závislost řešení na síle pole svazující stavy p a d . Čím silnější je tato vazba, tím méně vlnové funkce opustí stav s . Jinými slovy, zapnutí pole s frekvencí Ω vypíná přechody buzené frekvencí ω . Toto je světlem indukovaná průzračnost. Rabiho frekvence přechodů mezi p a d stavy totiž vstoupí do rezonanční podmínky pro přechody mezi s a p stavy, čímž rozhodí původní rezonanční naladění frekvence ω na přechod.

13.2 Stacionární režim

Rozladění rezonance vysvětluje podstatu indukované průzračnosti, nemůže však poskytnout její kvantitativní popis. K tomu je nutné zahrnout alespoň spontánní přechody ze stavu p do stavu s , a s nimi spojenou konečnou dobu života vybuzeného stavu.

Sformulujme si nejprve cíl výpočtu. Rychlost světla v prostředí je dána susceptibilitou $c_{\text{plyn}} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon\mu}} = \frac{c}{\sqrt{1+\chi}}$. Je-li susceptibilita komplexní, světlo je pohlcováno.

Potřebujeme spočítat imaginární část susceptibility χ . Pohlcovaná složka světla se váže na přechod mezi s a p stavem, můžeme tedy použít vzorec (263) bez úprav. Pro lineární přiblížení nám tedy bude stačit najít imaginární část nediagonálního elementu matice hustoty ρ_{sp} v lineárním přiblížení v síle pole v .

Přejdeme od Schrödingerovy rovnice na Blochovu rovnici (271). Tento tvar rovnice platí nezávisle na počtu uvažovaných stavů na atomu. Pro přesný popis bychom měli započíst různé mechanismy relaxace, pro jednoduchost necháme pouze jeden relaxační čas s rovnovážnou distribucí odpovídající základnímu stavu,

$$\rho_{ss}^{\text{eq}} = 1 \quad \text{a ostatní členy nulové.} \quad (298)$$

Transformací

$$\tilde{\rho} = \begin{pmatrix} e^{i\omega t - \frac{i}{\hbar} E_p t} & & & \\ & e^{-\frac{i}{\hbar} E_p t} & & \\ & & e^{i\Omega t - \frac{i}{\hbar} E_p t} & \\ & & & e^{-i\Omega t + \frac{i}{\hbar} E_p t} \end{pmatrix} \rho \begin{pmatrix} e^{-i\omega t + \frac{i}{\hbar} E_p t} & & & \\ & e^{\frac{i}{\hbar} E_p t} & & \\ & & e^{-i\Omega t + \frac{i}{\hbar} E_p t} & \\ & & & e^{i\Omega t - \frac{i}{\hbar} E_p t} \end{pmatrix} \quad (299)$$

přejde Blochova rovnice na rovnici s časově nezávislými koeficienty,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho} &= \frac{1}{i\hbar} (\tilde{H} \tilde{\rho} - \tilde{\rho} \tilde{H}^\dagger) \\ &+ \frac{2}{\hbar} (\gamma_{ps} \tilde{\rho}_{pp} + \gamma_{ps} \tilde{\rho}_{dd}) P_s \\ &+ \frac{2}{\hbar} (\gamma_{sp} \tilde{\rho}_{ss} + \gamma_{dp} \tilde{\rho}_{dd}) P_p \\ &+ \frac{2}{\hbar} (\gamma_{sd} \tilde{\rho}_{ss} + \gamma_{pd} \tilde{\rho}_{pp}) P_d, \end{aligned} \quad (300)$$

kde efektivní Hamiltonián

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \delta - i\gamma_{sp} - i\gamma_{sd} & v & & \\ v & -i\gamma_{ps} - i\gamma_{pd} & V & \\ & V & \Delta - i\gamma_{dp} - i\gamma_{ds} & \\ & & & \end{pmatrix} \quad (301)$$

má reálné členy podle koeficientů Schrödingerovy rovnice (289) a imaginární členy popisují úbytek atomů v jednotlivých stavech. Tento

přepis odpovídá vymírání vlnové funkce doplněné o atomy vracející se do diagonálních členů matice hustoty. Návrat atomů je vyjádřen přes projekční operátory

$$\mathbf{P}_s = |s\rangle\langle s|, \quad \mathbf{P}_p = |p\rangle\langle p|, \quad \mathbf{P}_d = |d\rangle\langle d|, \quad (302)$$

tvořící úplný rozklad jedničky $\mathbf{P}_s + \mathbf{P}_p + \mathbf{P}_d = 1$. Rychlosti přechodů ze stavu s do p je označena γ_{sp} ostatní obdobně. Vzhledem ke spontánním emisím je $\gamma_{sp} \neq \gamma_{ps}$.

Ve stacionární stavu je časová derivace transformované redukované matice hustoty nulová, takže Blochova rovnice se zjednoduší na lineární soustavu algebraických rovnic

$$\begin{aligned} i(\tilde{H}\tilde{\rho} - \tilde{\rho}\tilde{H}^\dagger) &= 2(\gamma_{ps}\tilde{\rho}_{pp} + \gamma_{ds}\tilde{\rho}_{dd}) \mathbf{P}_s \\ &+ 2(\gamma_{sp}\tilde{\rho}_{ss} + \gamma_{dp}\tilde{\rho}_{dd}) \mathbf{P}_p \\ &+ 2(\gamma_{sd}\tilde{\rho}_{ss} + \gamma_{pd}\tilde{\rho}_{pp}) \mathbf{P}_d, \end{aligned} \quad (303)$$

Tato soustava je stále příliš složitá. Omezíme se na lineární odezvu v poli v . Rozložíme proto efektivní Hamiltonián na neporušenou část \tilde{H}_0 a poruchu,

$$\tilde{H}' = \begin{pmatrix} 0 & v & \\ v & 0 & \\ & & 0 \end{pmatrix}. \quad (304)$$

Neporušená část je \tilde{H} pro $v = 0$, takže obsahuje úplné pole V .

Řešení soustavy v nultém řádu pole v ,

$$\begin{aligned} i(\tilde{H}_0\tilde{\rho}^0 - \tilde{\rho}^0\tilde{H}_0^\dagger) &= 2(\gamma_{ps}\tilde{\rho}_{pp}^0 + \gamma_{ds}\tilde{\rho}_{dd}^0) \mathbf{P}_s \\ &+ 2(\gamma_{sp}\tilde{\rho}_{ss}^0 + \gamma_{dp}\tilde{\rho}_{dd}^0) \mathbf{P}_p \\ &+ 2(\gamma_{sd}\tilde{\rho}_{ss}^0 + \gamma_{pd}\tilde{\rho}_{pp}^0) \mathbf{P}_d, \end{aligned} \quad (305)$$

není obtížné, ale jeho úplnou podobu nebudeme potřebovat. Stačí nám vědět, že dojde k nějaké změně diagonálních členů, tedy obsazení stavů spd , a že z mimodiagonálních členů je nenulový pouze $\tilde{\rho}_{dp}^0$.

Lineární opravu $\tilde{\rho}'_{dp}$ k nulovému řešení dostaneme z rovnice

$$\begin{aligned} i(\tilde{H}'\tilde{\rho}^0 - \tilde{\rho}^0\tilde{H}') &= -i(\tilde{H}_0\tilde{\rho}' - \tilde{\rho}'\tilde{H}_0^\dagger) \\ &+ 2(\gamma_{ps}\tilde{\rho}'_{pp} + \gamma_{ds}\tilde{\rho}'_{dd}) \mathbf{P}_s \\ &+ 2(\gamma_{sp}\tilde{\rho}'_{ss} + \gamma_{dp}\tilde{\rho}'_{dd}) \mathbf{P}_p \\ &+ 2(\gamma_{sd}\tilde{\rho}'_{ss} + \gamma_{pd}\tilde{\rho}'_{pp}) \mathbf{P}_d, \end{aligned} \quad (306)$$

Levá strana je nulová pro všechny diagonální elementy. Pro elementy pp a dd je toto tvrzení triviálním důsledkem nulových členů poruchy H' . Pro člen ss plyne nula z nulové hodnoty elementu redukované matice hustoty $\tilde{\rho}_{sp}^0 = 0$. Diagonální elementy rovnice určují diagonální elementy matice hustoty. Našli jsme, že oprava k diagonálním členům matice hustoty je nulová

$$\tilde{\rho}'_{ss} = 0 \quad \tilde{\rho}'_{pp} = 0 \quad \tilde{\rho}'_{dd} = 0. \quad (307)$$

Tím se rovnice (306) zjednoduší na

$$\tilde{H}_0 \tilde{\rho}' - \tilde{\rho}' \tilde{H}_0^\dagger = \tilde{\rho}^0 \tilde{H}' - \tilde{H}' \tilde{\rho}^0. \quad (308)$$

Změnu průzračnosti popisuje susceptibilita χ . Ta je úměrná mimo-diagonálnímu členu $\tilde{\rho}'_{sp} = 0$. Vezmeme tedy nejprve sp element rovnice (308),

$$(\delta - i\Gamma_{sp})\tilde{\rho}'_{sp} - V\tilde{\rho}'_{sd} = v(\tilde{\rho}_{ss}^0 - \tilde{\rho}_{pp}^0). \quad (309)$$

kde zkracujeme značení

$$\begin{aligned} \Gamma_{sp} &= \gamma_{sp} + \gamma_{sd} + \gamma_{ps} + \gamma_{pd} \\ \Gamma_{sd} &= \gamma_{sp} + \gamma_{sd} + \gamma_{dp} + \gamma_{ds}. \end{aligned} \quad (310)$$

K vyřešení hledaného sp členu redukované matice hustoty potřebujeme ještě sd člen. Vezmeme tedy nejprve sd element rovnice (308),

$$(\delta - \Delta - i\Gamma_{sd})\tilde{\rho}'_{sd} - V\tilde{\rho}'_{sp} = 0. \quad (311)$$

Nyní stačí dosadit z (311) do (309)

$$\tilde{\rho}'_{sp} = v(\tilde{\rho}_{ss}^0 - \tilde{\rho}_{pp}^0) \frac{\delta - \Delta - i\Gamma_{sd}}{(\delta - i\Gamma_{sp})(\delta - \Delta - i\Gamma_{sd}) - V^2}. \quad (312)$$

Chování systému je zajímavé tehdy, když mezi stavy s a d dochází pouze k velmi málo pravděpodobným přechodům. Pro stav p dostatečně vysoko nad stavy s a d je pravděpodobnost tepelně stimulované emise zanedbatelná, $\gamma_{sp} = 0$ a $\gamma_{dp} = 0$. Přechod mezi s a d je nepravděpodobný $\gamma_{sd}, \gamma_{ds} \ll \gamma_{pd}, \gamma_{ps}$, takže $\Gamma_{sd} \ll \gamma_{pd}, \gamma_{ps}$. Lze dokonce snadno splnit i $\Gamma_{sd} \ll V$. Potom susceptibilita klesá na zanedbatelnou hodnotu $\sim \Gamma_{sd}V^{-2}$ tehdy, je-li rozladění obou světél shodné. Oblast poklesu susceptibility je velmi úzká a vyžaduje přesné sladění obou laserů. To je ale dostupné.

13.3 Zastavené světlo

Světlem Ω modifikovaná susceptibilita dovoluje měnit pohyb světla frekvence ω plynem za velmi krátkou dobu. Je například možné nechat světlo ω vniknout do plynu a pak osvětlením Ω ze strany světlo ω v plynu natolik zpomalit, že se příslušný jev nazývá zastavením světla.

Z Maxwellovy rovnice v prostředí dostaneme disperzní relaci

$$\varepsilon\mu\omega_{\mathbf{q}}^2 = q^2 \quad \text{neboli} \quad (1 + \chi)\omega_{\mathbf{q}}^2 = c^2q^2. \quad (313)$$

Vlnový balík se pohybuje grupovou rychlostí

$$u = \frac{\partial\omega_{\mathbf{q}}}{\partial q} = \frac{c}{\sqrt{1 + \chi}} \frac{1}{1 + \frac{\omega}{2}(1 + \chi)^{-\frac{3}{2}} \frac{\partial\chi}{\partial\omega}}. \quad (314)$$

Při derivaci vztahu (313) jsme použili, že v dipólovém přiblížení susceptibilita nezávisí na impulzu q .

Imaginární část susceptibility není podstatná pro grupovou rychlost. Potřebujeme tedy reálnou část matice hustoty. Podle vzorce (263) převedevého do veličin, které zde počítáme je rovna

$$\chi = \frac{N}{\Omega} \frac{\tilde{\rho}_{sp}}{v} |\mathbf{d}_{ps}|^2, \quad \text{neboli} \quad \text{Re } \chi = \frac{N}{\Omega} \frac{\text{Re } \tilde{\rho}_{sp}}{v} |\mathbf{d}_{ps}|^2. \quad (315)$$

V lineárním přiblížení ve síle pole v , pro $\Delta = 0$, $\Gamma_{sd} \rightarrow 0$ a pro $\delta \rightarrow 0$ dostaneme

$$\tilde{\rho}_{sp} \approx -v(\tilde{\rho}_{ss}^0 - \tilde{\rho}_{pp}^0) \frac{\delta}{V^2}. \quad (316)$$

Pro přesné naladění $\delta = 0$ je reálná část susceptibility nulová, ale její derivace je nenulová. Potom

$$u = c \frac{1}{1 + \frac{\omega}{2} \frac{\partial \text{Re } \chi}{\partial \omega}}. \quad (317)$$

Podle vzorce (315) vypočteme derivaci

$$\frac{\partial \text{Re } \chi}{\partial \omega} = -\frac{N}{\Omega} \frac{1}{v} |\mathbf{d}_{ps}|^2 \hbar \frac{\partial \text{Re } \tilde{\rho}_{sp}}{\partial \delta} = \frac{N}{\Omega} |\mathbf{d}_{ps}|^2 \hbar \frac{\tilde{\rho}_{ss}^0 - \tilde{\rho}_{pp}^0}{V^2}. \quad (318)$$

Pro správně zvolenou sílu pole zůstanou předpoklady teorie platné a přitom jmenovatel nesmírně vzroste. Grupová rychlost světla může klesnout proti rychlosti světla ve vakuu velmi podstatně.