Univerzita Palackého v Olomouci
Přírodovědecká fakulta

Kvantová mechanika pro kvantovou optiku

Antonín Lukš

Olomouc 2012

Oponent: prof. RNDr. Jan Peřina, DrSc.

Publikace byla připravena v rámci projektu Investice do rozvoje vzdělávání

Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem
a státním rozpočtem České republiky

1. vydání

ISBN 978-80-244-3043-0

NEPRODEJNÉ

Obsah

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Vzdělávání výzkumných pracovníků v Regionálním centru pokročilých technologií a materiálů. CZ.1.07/2.3.00/09.0042 [1]

Kvantová mechanika pro kvantovou optiku

Antonín Lukš

Abstrakt. V příspěvku jsou uvedeny základy kvantové mechaniky v rozsahu nezbytném pro pochopení kvantových jevů v optice. Jsou uvedeny přístupy k řešení spojité pružné struny a optického rezonátoru.

1 Úvod

V tomto vzdělávacím textu se pokusíme podat výklad minima kvantové mechaniky, které již stačí k pochopení jevů kvantové optiky. S určitým omezením alespoň vzdáleně souvisí i to, že výklad je tradiční a že novější věci jsou zmíněny málo.

Kvantová mechanika vznikla během vývoje kvantové fyziky, jejíž základ položil M. Planck (Planck (1900a, b)) [1], [2], na kterého brzy navázal A. Einstein (Einstein (1905)) [3]. Jejich práce jsou náročné pro souvislost se statistickou fyzikou, ale způsobily, že pojem záření absolutně černého tělesa zná dnes už každý fyzik.

Vyzařování a pohlcování energie se děje zpravidla po kvantech, která jsou úměrná (úhlové) frekvenci záření. Koeficient úměrnosti je (redukovaná) Planckova konstanta. Výjimkami rozumíme vyzařování a pohlcování dvou a více kvant, ale ty „potvrzují“ význam Planckovy konstanty pro kvantovou fyziku.

Protože se o diskrétní energii dá snadno mluvit jen u monochromatické složky záření, zájem o diskrétní spektra kvantová hypotéza zvětšuje

[1] Projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

a brzy N. Bohr navrhl jejich fyzikální zdůvodnění (Bohr (1913)) [4]. Toto zdůvodnění bylo zčásti založeno na klasické mechanice a „elektrostatice". Vynikající výsledky pro atom vodíku vzdorovaly zobecnění na složitější systémy, až se začíná mluvit o neúspěchu staré kvantové teorie. Její nejlepší znalci (H. A. Kramers) naznačili, že se klasické trajektorie mají nahradit příslušnými soustavami čísel. W. Heisenberg navrhl nový přístup – *kvantovou mechaniku*. Požadoval reinterpretaci klasických veličin, což znamená pokaždé náhradu jednoho čísla celými soustavami čísel (Heisenberg (1925)) [5]. Kvantová fyzika od té doby měla působit velmi nezvyklým dojmem. Veličiny označené písmeny se dále označují tak jednoduše, ale musíme tyto symboly chápat jako operátory.

E. Schrödinger byl schopen překonat starou kvantovou teorii svou vlnovou mechanikou (Schrödinger (1926a, b, c, d)) [6]. Tradiční výklady kvantové mechaniky začínají nebo brzy pokračují řešením diferenciálních rovnic s okrajovými podmínkami. Tyto diferenciální rovnice jsou jednotlivé případy bezčasové Schrödingerovy rovnice související s různými fyzikálními modely. Pro jeho velký význam bývá vykládán harmonický oscilátor.

Důležitý model zahrnuje Coulombův potenciál. Vhodnou volbou parametrů se dostává model vodíkového atomu. Poměrně jednoduchým modelováním se dospívá k teorii valence (mocenství), která patří do kvantové chemie (srv. knihu Zahradník a Polák (1976)) [7]. V nejjednodušším případě se studuje molekulární ion H_2^+, kdy se stále řeší bezčasová Schrödingerova rovnice pro jeden elektron (Fitzpatrick (1999)) [8]. Modelování v kvantové chemii se zakládá na volbě potenciálu pro jeden nebo více elektronů.

Kvantová mechanika není samozřejmá v případě více stejných částic, které jsou nerozlišitelné. Systém stejných částic se popisuje společnou vlnovou funkcí, která je symetrická nebo antisymetrická v souřadnici polohy, podle toho, zda tyto částice jsou bosony, nebo fermiony. Elektron je fermion a vyznačuje se vlastním magnetickým momentem. Fermiony zná každý fyzik, ale v kvantové optice se s nimi setkáváme zřídka.

Kvantově mechanické modely tvoří zvláštní „svět" a ptáme se, jak ho uvést do souladu se světem, který jsme dosud popisovali klasickou fyzikou. Možná budeme jednou myslet kvantově mechanicky? (V. dále.) Určitou orientaci nám poskytuje Bornova pravděpodobnostní intepretace vlnové funkce (M. Born). Druhá mocnina modulu vlnové funkce částice má fyzikální smysl hustoty pravděpodobnosti souřadnice polohy částice. Tato interpretace se dá rozšířit i na popis více částic.

Na závěr článku Born, Heisenberg and Jordan (1926) [9] doplnil P. Jordan kvantování struny v očekávání, že se podobně dospěje ke kvantové teorii pole. Kvantování struny a do jisté míry i kvantování polí využívá modového rozkladu (Fourierova rozkladu) k formulaci a řešení úlohy kvantování souboru harmonických oscilátorů. Tento jednoduchý přístup je skutečně základ, ale vývoj kvantové fyziky se na něj neomezil. Zvláště M. Born rozvíjel teorii pevných látek, kde se kvantováním struny začíná, srv. Kittel (1977) [10] s. 30.

Práce P. A. M. Diraca o elektromagnetickém poli (Dirac (1927) [11]) ještě nenapovídá vývoj kvantové fyziky, ke kterému došlo i Diracovou zásluhou. Časem vyšlo na jevo, že se kvantová fyzika neomezuje na kvantovou mechaniku. Určité omezení se na tento obor umožnilo všestrannému matematiku J. von Neumannovi, aby podal přehled kvantové mechaniky (von Neumann (1932) [12]) spolu s náčrtem teorie měření. Podobná orientace na elektromagnetické pole, zejména na viditelné světlo a jeho koherenci, vedla R. Glaubera k úspěšnému založení kvantové optiky jako významného oboru (v. držitele Nobelovy ceny za fyziku za r. 2005).

Teorie kvantovaných polí je velmi náročná, jelikož mnoho fyzikálních polí jsou takzvaná kalibrační pole. V případě elektromagnetického pole to má nepříjemný důsledek, že se kvantování děje rozličnými způsoby. Často se tyto způsoby odlišují podle zvoleného kalibru (Coulombův kalibr, Lorentzův kalibr), jindy se rozlišují definice pro kvantovou optiku a pro teoretickou fyziku. S těmito komplikacemi je seznámena většina fyziků, nebo si je můžeme připomenout v knize Milonni (1994) [13].

Je-li kvantování elektromagnetického pole ve volném prostoru poměrně složitá úloha, platí to tím spíše o kvantování elektromagnetického pole v prostředí. Tato úloha možná ještě nebyla uspokojivě vyřešena, jelikož se od jejích řešení čeká přínos k nelineárním optickým procesům. Pokud jde o lineární prostředí, kvantování pole patří k pouhým začátkům teorie pevných látek (srv. Kittel (1977) [10] s. 58).

I když se u kvantové fyziky právem připomínají mikroskopická měřítka (Bohrův poloměr $0{,}529 \,.\, 10^{-10}$ m), mnoho kvantových jevů, např. supravodivost, má makroskopickou povahu. To platí i o (celé) kvantové optice. Vědomí přesahu kvantové fyziky do „našeho světa“ vedlo k novému zamyšlení nad podstatou jejích pojmů a k literatuře, která zachycuje novější vývoj (Dušek (2002) [14]). Nanofyzika a nanotechnologie mohou přijít zase s novými postřehy.

2 Částice a volná částice

V tomto oddílu připomeneme některé kvantově mechanické pojmy, které se uplatňují při studiu jedné částice, a to zvláště volné částice. Zde se ještě nebudeme zabývat kvantovou dynamikou.

V kvantové mechanice se využívají předběžné znalosti klasické mechaniky. Zde se omezíme na jeden stupeň volnosti, tj. na jednu prostorovou souřadnici x a kanonicky sdruženou hybnost p_x. Podle P. A. M. Diraca uvažujeme kontinuum stavů souřadnice polohy $|x\rangle$ a kontinuum stavů sdružené hybnosti $|p_x\rangle$. Tyto stavy se dají různě aproximovat prvky vhodného Hilbertova prostoru, ale standardně se učebnice těmto zvláštnostem vyhýbají. V souvislosti s Hilbertovým prostorem se používá skalární součin dvou prvků (vektorů).

Stavy souřadnice polohy a stavy sdružené hybnosti jsou ortogonální,

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x'), \langle p_x|p'_x\rangle = \delta(p_x - p'_x). \tag{1}$$

Zde $\langle x|x'\rangle$ a $\langle p_x|p'_x\rangle$ jsou skalární součiny a $\delta(x)$ a $\delta(p_x)$ jsou Diracovy δ-funkce. Tyto pojmy jsou fyzikům dobře známy. Nejsou to obyčejné funkce, ale dají se jimi aproximovat. Dovolil jsem si rozlišit dvě funkce, protože z hlediska rozměrové analýzy je zajímavé, že $\delta(x)$ by měla mít rozměr délka^{-1} a $\delta(p_x)$ by měla mít rozměr $\mathrm{hybnost}^{-1}$.

Ve vztazích (1) $\langle x|$ a $\langle p_x|$ podle P. A. M. Diraca jsou duální vektory $|x\rangle^\dagger$ a $|p_x\rangle^\dagger$ pořadě, kde † značí hermitovské sdružení. Jinak řečeno, skalární součiny mají tvar $|x\rangle^\dagger|x'\rangle$, $|p_x\rangle^\dagger|p'_x\rangle$ jako ve formalizmu (konečných) matic a vektorů. Další skalární součiny

$$\langle x|p_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\mathrm{i}\frac{xp_x}{\hbar}}, \langle p_x|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\mathrm{i}\frac{xp_x}{\hbar}} \tag{2}$$

kde $\hbar$ je Planckova konstanta dělená 2π, vyjadřují komplementaritu bází $|x\rangle$ a $|p_x\rangle$. Proměnné (operátory) $\hat{x}$ a $\hat{p}_x$ definujeme jako

$$\hat{x} = \int x|x\rangle\langle x|\mathrm{d}x, \hat{p}_x = \int p_x|p_x\rangle\langle p_x|\mathrm{d}p_x, \tag{3}$$

a platí pak, že

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = \mathrm{i}\hbar\hat{1}, \tag{4}$$

kde

$$\hat{1} = \int |x\rangle\langle x|\mathrm{d}x = \int |p_x\rangle\langle p_x|\mathrm{d}p_x \tag{5}$$

je operátor identity. V Diracově formalizmu se dá odvodit vztah (4), „kanonické sdružení“ proměnných $\hat{x}$ a $\hat{p}_x$, z komplementarity příslušných bází $|x\rangle$ a $|p_x\rangle$.

Libovolný stav $|\psi\rangle$ se dá vyjádřit v tvarech

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)|x\rangle dx = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p_x)|p_x\rangle dp_x, \tag{6}$$

kde

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle, \tilde{\psi}(p_x) = \langle p_x|\psi\rangle \tag{7}$$

jsou Schrödingerova a hybnostní reprezentace stavu pořadě.

Uvažujme operátor

$$\hat{\hat{D}}(x, p_x) = \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(-x\hat{p}_x + p_x\hat{x}\right)\right]. \tag{8}$$

Zvláště

$$\hat{\hat{D}}(\Delta x, 0)|x\rangle = |x + \Delta x\rangle, \hat{\hat{D}}(0, \Delta p_x)|p_x\rangle = |p_x + \Delta p_x\rangle, \tag{9}$$

kde Δx a Δp_x jsou posunutí souřadnice polohy a sdružené hybnosti pořadě. Z toho plyne, že

$$\hat{\hat{D}}(\Delta x, 0)\hat{x}\hat{\hat{D}}^{\dagger}(\Delta x, 0) = \hat{x} - \Delta x\hat{1},$$

$$\hat{\hat{D}}(0, \Delta p_x)\hat{p}_x\hat{\hat{D}}^{\dagger}(0, \Delta p_x) = \hat{p_x} - \Delta p_x\hat{1}. \tag{10}$$

V důsledku Bakerovy-Hausdorffovy identity (Peřina (1991) [15]) platí, že

$$\hat{\hat{D}}(x, p_x) = \exp\left(\mathrm{i}\frac{xp_x}{2\hbar}\right)\hat{\hat{D}}(x, 0)\hat{\hat{D}}(0, p_x)$$

$$= \exp\left(-\mathrm{i}\frac{xp_x}{2\hbar}\right)\hat{\hat{D}}(0, p_x)\hat{\hat{D}}(x, 0). \tag{11}$$

Jinak řečeno, operátor (8) uskutečňuje posuv ve fázovém prostoru.

3 Harmonický oscilátor

V klasické mechanice se probírají kyvadla. Jejich pohyb se obvykle děje po rovinné křivce a modely mohou zahrnovat jen jeden stupeň volnosti. Kyvadla byla odedávna součástí kyvadlových hodin. Obecně oscilátor koná periodický pohyb.

Nezávisí-li perioda pohybu částice na velikosti rozkmitu, jde o harmonický oscilátor. Kvantový harmonický oscilátor je popsán hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2M} + \frac{M\omega^2\hat{x}^2}{2}, \tag{12}$$

kde M je hmotnost částice a ω má rozměr (v. níže) úhlové frekvence. Zvolíme-li pro popis Schrödingerův obraz, můžeme napsat hned Schrödingerovu rovnici

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle, \tag{13}$$

kde $|\psi(t)\rangle$ je stav harmonického oscilátoru v čase t. Ve Schrödingerově nebo hybnostní reprezentaci (7) má Schrödingerova rovnice tvar parciální diferenciální rovnice.

Řešení Schrödingerovy rovnice je superpozice řešení tvaru

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et\right)|\psi(0)\rangle. \tag{14}$$

Abychom stanovili počáteční podmínky pro taková řešení, řešíme úlohu na vlastní hodnoty (vlastní energie)

$$E|\psi(0)\rangle = \hat{H}|\psi(0)\rangle, \tag{15}$$

kde se obvykle píše $\hat{H}$ vlevo a E vpravo.

Při řešení úlohy na vlastní hodnoty se s výhodou používá hamiltonián ve tvaru

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{1}\right), \tag{16}$$

kde

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{M\omega}\hat{x} + \mathrm{i}\frac{\hat{p}_x}{\sqrt{M\omega}}\right) \tag{17}$$

je anihilační operátor kvanta energie a $\hat{a}^\dagger$ se nazývá kreačním operátorem. Platí, že

$$\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = \hat{1}. \tag{18}$$

Začíná se stanovením stavu $|0\rangle$, který odpovídá nejmenší energii $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$,

$$\hat{H}|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle. \tag{19}$$

Rovnice se zjednoduší na tvar

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \tag{20}$$

a ve vhodné reprezentaci je zřejmé, že $\psi(x)$ má gaussovský tvar. Energetické spektrum sestává z hodnot

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\, n = 0, 1, 2, \ldots \tag{21}$$

a příslušné vlastní vektory $|n\rangle$ mají tvar

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n+1)!}}\hat{a}^{\dagger n}|0\rangle. \tag{22}$$

Tato soustava vektorů je úplná,

$$\hat{1} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|,$$

$$\hat{H} = \sum_{n=0}^{\infty} E_n|n\rangle\langle n|. \tag{23}$$

Ke Schrödingerově a hybnostní reprezentaci zde můžeme přidat Heisenbergovu reprezentaci

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle, \tag{24}$$

kde $c_n = \langle n|\psi\rangle$. Tato reprezentace je možná i ve Schrödingerově *obraze*, kde $|\psi\rangle$ a c_n závisejí na čase.

Diskrétní soustava vektorů $|n\rangle$ nám umožňuje mluvit přímo o pravděpodobnostech $p_n = |c_n|^2$. Pracujeme s normovanými vlastními vektory, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, proto čísla p_n dávají v součtu jedničku. Obvyklé pojmy z teorie pravděpodobnosti, nebo z důvěrně známé „statistiky“ se dají snadno zavést. Zavádí se střední hodnota libovolného operátoru $\hat{M}$ jako

$$\langle\hat{M}\rangle = \langle\psi|\hat{M}|\psi\rangle. \tag{25}$$

Je zřejmé, že bude-li proměnná x nahrazena výchylkou struny ve kmitně, nebo dokonce intenzitou elektrického pole, odvození se bude lišit, ale nakonec dojdeme ke tvaru (16) hamiltoniánu. Proto se v kvantové optice často takovým hamiltoniánem začíná. Stavy $|n\rangle$, $n = 0, 1, 2, \ldots$, se nazývají stavy počtu fotonů a zavádí se operátor

$$\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a} = \sum_{n=1}^{\infty} n|n\rangle\langle n|. \tag{26}$$

Stav $|0\rangle$ se nazývá vakuovým stavem. Aniž by se připomínala elektrické a magnetické pole, zavádějí se kvadraturní operátory

$$\hat{q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \hat{p} = \frac{1}{\mathrm{i}\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger). \tag{27}$$

Často bývají jejich definice ještě jednodušší právě s jistým respektem k elektrickému a magnetickému poli.

V Heisenbergově obraze se uvádějí rovnice pohybu

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{x} &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\hat{x}, \hat{H}], \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{p}_x &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\hat{p}_x, \hat{H}], \end{aligned} \tag{28}$$

které se dají v tomto jednoduchém případě zjednodušit,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{x} = \frac{\hat{p}_x}{M}, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{p}_x = -M\omega^2\hat{x}. \tag{29}$$

Po zavedení anihilačního a kreačního operátoru se setkáváme s rovnicí

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{a} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\hat{a}, \hat{H}], \tag{30}$$

neboli

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{a} = -\mathrm{i}\omega\hat{a}. \tag{31}$$

Zde je zřejmé, že ω *značí* úhlovou frekvenci.

Poznamenáme něco o trojrozměrném případu. V kvantové teorii je izotropní harmonický oscilátor popsán hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} + \frac{M\omega^2\hat{\mathbf{r}}^2}{2}, \tag{32}$$

kde $\mathbf{r} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ a $\mathbf{p} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ ve zvolené kartézské soustavě souřadnic. Přitom $\hat{y}$, $\hat{z}$ jsou operátory souřadnic polohy a $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ jsou operátory sdružených hybností. Energie je součet energií připadajících na jednotlivé stupně volnosti. Můžeme postupovat jako v případě jediného stupně volnosti a zavést anihilační operátory $\hat{a}_x \equiv \hat{a}$, $\hat{a}_y$, $\hat{a}_z$ zřejmým způsobem. Zavedeme stavy počtů kvant energie $|n_x, n_y, n_z\rangle$, kde $n_x \equiv n$ a n_y, n_z jsou kvanta energie připadající na příslušný stupeň volnosti. V kvantové optice obvykle začínáme nějakým zobecněním tvaru (16) hamiltoniánu a místo kvant energie mluvíme o fotonech.

4 Vodíkový atom

Třírozměrný harmonický oscilátor by poskytl vhodný úvod do studia částice v coulombickém potenciálu (Formánek (1983) [16]). Zde nemáme na mysli takové studium v úplnosti. Vodíkový atom se skládá z kladně nabitého jádra a ze záporného, mnohem lehčího elektronu. Setkáváme se s analogií Keplerovy úlohy pro Slunce a mnohem lehčí planetu. Přesvědčíme se jen, že umíme popsat stav s nejmenší energií, u něhož se nedokonalost analogie projevuje nejvíce. V kvantové teorii je možné, že kinetická energie částice s nejnižší energií má nenulovou střední hodnotu, zatímco její úhlová hybnost je podle citovaného zdroje rovna nule. Klasickou teorii bylo nutno provizorně doplnit principem komplementarity, aby mohla existovat „stará kvantová teorie“ (ter Haar (1967) [17]).

4.1 Stav s nejmenší energií

Vyjdeme z hamiltoniánu

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M_\mathrm{e}} - \frac{\tilde{e}^2}{\hat{r}}, \tag{33}$$

kde

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2 \int |\mathbf{r}\rangle \nabla^2 \langle \mathbf{r}| d^3\mathbf{r}. \tag{34}$$

Použijeme známou skutečnost, že hledaný stav

$$|\psi\rangle = \int \psi(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle d^3\mathbf{r} \tag{35}$$

má vlnovou funkci $\psi(\mathbf{r})$ úměrnou funkci e^{-kr}, kde k je nějaký součinitel. Rovnici

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{36}$$

přepíšeme na tvar

$$-\frac{1}{2M_\mathrm{e}}\hbar^2\nabla^2 e^{-kr} - \frac{\tilde{e}^2}{r}e^{-kr} = Ee^{-kr}. \tag{37}$$

Zde

$$\begin{aligned}
\nabla e^{-kr} &= -k\frac{\mathbf{r}}{r}e^{-kr},\\
\nabla^2 e^{-kr} &= -k\nabla\cdot\left(\frac{\mathbf{r}}{r}e^{-kr}\right)\\
&= -k\left[\frac{3}{r}e^{-kr} + \mathbf{r}\cdot\nabla\left(\frac{1}{r}e^{-kr}\right)\right]\\
&= -k\left[\frac{3}{r}e^{-kr} + \mathbf{r}\cdot\left(-\frac{\mathbf{r}}{r^3} - k\frac{\mathbf{r}}{r^2}\right)e^{-kr}\right]\\
&= -k\left(\frac{2}{r} - k\right)e^{-kr}.
\end{aligned}$$

Po dosazení do (37) dostaneme, že

$$\frac{1}{2M_\mathrm{e}}\hbar^2 k\left(\frac{2}{r} - k\right) - \frac{\tilde{e}^2}{r} = E, \tag{38}$$

kde jsme ještě vykrátili e^{-kr}. Z toho

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2M_\mathrm{e}}, \tag{39}$$

$$\frac{\hbar^2 k}{M_\mathrm{e}} = \tilde{e}^2, \tag{40}$$

neboli

$$k = \frac{\tilde{e}^2 M_\mathrm{e}}{\hbar^2} = \frac{1}{a_1}, \tag{41}$$

kde

$$a_1 = \frac{\hbar^2}{\tilde{e}^2 M_\mathrm{e}} \tag{42}$$

je (první) Bohrův poloměr. Po dosazení (41) do (39) dostaneme, že

$$E = -\frac{\hbar^2}{2M_\mathrm{e}}\frac{\tilde{e}^4 M_e^2}{\hbar^4} = -\frac{\tilde{e}^4 M_\mathrm{e}}{2\hbar^2}. \tag{43}$$

4.2 Normování vlnové funkce úměrné $e^{-\frac{r}{a_1}}$

Máme stanovit integrál

$$I = \int\int\int e^{-2\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{a_1}} \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z. \tag{44}$$

Použijeme sférické souřadnice

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\varphi, \\ y &= r\sin\theta\sin\varphi, \\ z &= r\cos\theta, \end{aligned} \tag{45}$$

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{x^2+y^2+z^2}, \\ \theta &= \arccos\frac{z}{r}, \\ \varphi &= \arg(x+\mathrm{i}y). \end{aligned} \tag{46}$$

Potom

$$I = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi e^{-\frac{2r}{a_1}} \left| \frac{\partial(x,y,z)}{\partial(r,\theta,\varphi)} \right| \mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\mathrm{d}r, \tag{47}$$

kde

$$\frac{\partial(x,y,z)}{\partial(r,\theta,\varphi)} = r^2\sin\theta. \tag{48}$$

Dosadíme-li (48) do (47), dostaneme, že

$$I = 4\pi \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a_1}} r^2 \mathrm{d}r. \tag{49}$$

Zde

$$\int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a_1}} r^2 \mathrm{d}r = 2\left(\frac{a_1}{2}\right)^3. \tag{50}$$

Dosadíme-li (50) do (49), dostaneme, že

$$I = \pi a_1^3. \tag{51}$$

Konečně

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_1^3}} e^{-\frac{r}{a_1}}. \tag{52}$$

4.3 Kinetická a potenciální energie

Vztah (33) přepíšeme jako

$$\hat{H} = \hat{H}_{\mathrm{k}} + \hat{H}_{\mathrm{p}}, \tag{53}$$

kde

$$\hat{H}_{\mathrm{k}} = \frac{\hat{p}^2}{2M_{\mathrm{e}}},\ \hat{H}_{\mathrm{p}} = -\frac{\tilde{e}^2}{\hat{r}}. \tag{54}$$

Označme

$$\mathcal{E}_{\mathrm{k}} = \langle\psi|\hat{H}_{\mathrm{k}}|\psi\rangle. \tag{55}$$

Máme počítat (srv. vztah (38))

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_{\mathrm{k}} &= \frac{1}{2M_{\mathrm{e}}}\hbar^2 k\left(\frac{1}{\pi a_1^3}\int\int\int\frac{2}{r}e^{-2kr}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z - k\right)\\
&= \frac{1}{2M_{\mathrm{e}}}\hbar^2 k\left(\frac{4\pi}{\pi a_1^3}\int_0^\infty e^{-2kr}2r\mathrm{d}r - k\right)\\
&= \frac{1}{2M_{\mathrm{e}}}\hbar^2 k\left(\frac{4\pi}{\pi a_1^3 2k^2}\int_0^\infty e^{-s}s\mathrm{d}s - k\right)\\
&= \frac{1}{2M_{\mathrm{e}}}\hbar^2 k\left(\frac{2}{a_1^3k^2} - k\right) = \underbrace{\frac{1}{2M_{\mathrm{e}}}\hbar^2}_{\frac{1}{2}a_1\tilde{e}^2}\frac{1}{a_1}(2k-k) = \frac{\tilde{e}^2}{2a_1}.
\end{aligned} \tag{56}$$

Z toho

$$\mathcal{E}_{\mathrm{p}} = \langle\psi|\hat{H}_{\mathrm{p}}|\psi\rangle = -\frac{\tilde{e}^2}{2a_1} - \mathcal{E}_{\mathrm{k}} = -\frac{\tilde{e}^2}{a_1}. \tag{57}$$

5 Ion H_2^+

Za vysokých teplot, např. v plazmatu elektrického oblouku může být molekula vodíku H_2 ionizována, změní se v ion H_2^+.

5.1 Stav s nejmenší energií

Ion H_2^+ modelujeme pomocí dvou klasických částic s náboji po $+e$ a jedné kvantové částice jako v předchozí úloze. Nechť $\mathbf{r}_1$ a $\mathbf{r}_2$ značí polohy klasických částic. Stav s nejmenší energií je vlastní stav $|\psi\rangle = |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\rangle$ hamiltoniánu $\hat{H} = \hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ příslušný k vlastní energii $E = E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$,

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\rangle = E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\rangle. \tag{58}$$

Dáme $\hat{H}_0$ značit hamiltonián, který se studuje v případě jednoho elektronu a $|\psi_0\rangle$ normovaný vlastní stav s nejmenší energií. Potom

$$\hat{H} = \hat{H}_\mathrm{k} + \hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_1, 0)\hat{H}_\mathrm{p}\hat{\hat{D}}^\dagger(\mathbf{r}_1, 0) + \hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_2, 0)\hat{H}_\mathrm{p}\hat{\hat{D}}^\dagger(\mathbf{r}_2, 0) + \frac{\tilde{e}^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\hat{1}, \tag{59}$$

kde

$$\hat{\hat{D}}(\mathbf{r}, 0) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right). \tag{60}$$

Napřed odvodíme klasicky znějící podmínku rovnováhy. Jelikož

$$E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\rangle, \tag{61}$$

dostaneme, že

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{r}_j} E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = {} & \left\{\nabla_{\mathbf{r}_j}\langle\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\right\}\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\rangle \\ & + \langle\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\nabla_{\mathbf{r}_j}\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\rangle \\ & + \langle\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\nabla_{\mathbf{r}_j}|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\rangle \\ = {} & \langle\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\nabla_{\mathbf{r}_j}\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\rangle,\ j = 1, 2.\end{aligned} \tag{62}$$

Zde jsme použili pravidlo pro derivování součinu, vlastnost (58) a důsledek normování vektoru $|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\rangle$

$$\left\{\nabla_{\mathbf{r}_j}\langle\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\right\}|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\rangle + \langle\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\nabla_{\mathbf{r}_j}|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\rangle = 0. \tag{63}$$

Nutná podmínka rovnováhy

$$\nabla_{\mathbf{r}_j} E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathbf{o},\, j = 1, 2, \tag{64}$$

se dá přepsat na rovnosti středních hodnot gradientů hamiltoniánu nulovému vektoru. Všimněme si, že

$$\nabla_{\mathbf{r}_1} \hat{H} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_1, 0)[\hat{H}_0, \hat{\mathbf{p}}]\hat{\hat{D}}^\dagger(\mathbf{r}_1, 0) + \nabla_{\mathbf{r}_1} \frac{\tilde{e}^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\hat{1},$$

$$\nabla_{\mathbf{r}_2} \hat{H} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_2, 0)[\hat{H}_0, \hat{\mathbf{p}}]\hat{\hat{D}}^\dagger(\mathbf{r}_2, 0) + \nabla_{\mathbf{r}_2} \frac{\tilde{e}^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\hat{1}, \tag{65}$$

kde

$$-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\hat{H}_0, \hat{\mathbf{p}}] = \frac{\tilde{e}^2}{\hat{r}^3}\hat{\mathbf{r}}. \tag{66}$$

Jinak řečeno, síla, kterou proton 2 odpuzuje proton 1, se musí zrušit se silou, kterou elektron přitahuje proton 1, a síla, kterou proton 1 odpuzuje proton 2, se musí zrušit se silou, kterou elektron přitahuje proton 2. To však platí v kvantovém průměru.

Předpoklad, že $|\psi\rangle$ je vlastní stav hamiltoniánu, nahradíme podmínkou, že

$$|\psi\rangle = c_1 \hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_1, 0)|\psi_0\rangle + c_2 \hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_2, 0)|\psi_0\rangle, \tag{67}$$

kde c_1, c_2 jsou komplexní čísla, která řeší úlohu

$$\langle\psi|\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\psi\rangle = \min. \tag{68}$$

Jelikož společná změna fáze koeficientů c_1, c_2 je přípustná, můžeme předpokládat, že $c_1 \geq 0$. Dále se s odvoláním na symetrii připomíná, že $c_2 = \pm c_1$. Tuto vlastnost bychom mohli snadno, ale zdlouhavě odvodit, což se obvykle neprovádí. Všimněme si, že

$$\begin{aligned} \langle\psi|\psi\rangle &= \left[c_1\langle\psi_0|\hat{\hat{D}}^\dagger(\mathbf{r}_1, 0) \pm c_1\langle\psi_0|\hat{\hat{D}}^\dagger(\mathbf{r}_2, 0)\right] \\ &\times \left[c_1 \hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_1, 0)|\psi_0\rangle \pm c_1 \hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_2, 0)|\psi_0\rangle\right] = 2c_1^2(1 \pm J), \end{aligned} \tag{69}$$

kde

$$J = \langle\psi_0|\hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, 0)|\psi_0\rangle = \langle\psi_0|\hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, 0)|\psi_0\rangle. \tag{70}$$

Pro normovaný vlastní stav plyne ze vztahu (69), že

$$c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{1 \pm J}},\, c_2 = \pm c_1. \tag{71}$$

Máme stanovit druhý a třetí člen řetězu rovností (70). Pro jednoduchost volíme $\mathbf{r}_j = (x, y, z_j)$, $j = 1, 2$, $z_1 < z_2$. Máme počítat

$$\begin{aligned} J &= \frac{1}{\pi a_1^3} \int\int\int e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+(z-z_1)^2}}{a_1}} e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+(z-z_2)^2}}{a_1}} \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \\ &= \frac{1}{\pi a_1^3} \int\int\int e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+(z+c)^2}}{a_1}} e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+(z-c)^2}}{a_1}} \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z, \end{aligned} \tag{72}$$

kde $c = \frac{z_2 - z_1}{2}$. Použijeme souřadnice prodlouženého sféroidu (Bateman and Erdélyi (1955) sv. 3 [18])

$$\begin{aligned} x &= c \sinh u \sin v \cos\varphi,\, 0 \le u < \infty, \\ y &= c \sinh u \sin v \sin\varphi,\, 0 \le v < \pi, \\ z &= c \cosh \cos v,\, 0 \le \varphi < 2\pi, \end{aligned} \tag{73}$$

$$\begin{aligned} u &= \operatorname{argcosh}\left\{\frac{1}{2c}\left(\sqrt{x^2+y^2+(z+c)^2} + \sqrt{x^2+y^2+(z-c)^2}\right)\right\}, \\ v &= \arccos\left\{\frac{1}{2c}\left(\sqrt{x^2+y^2+(z+c)^2} - \sqrt{x^2+y^2+(z-c)^2}\right)\right\}, \\ \varphi &= \arg(x + \mathrm{i}y). \end{aligned} \tag{74}$$

Potom

$$J = \frac{1}{\pi a_1^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} e^{-\frac{2c}{a_1}\cosh u} \left| \frac{\partial(x, y, z)}{\partial(u, v, \varphi)} \right| \mathrm{d}u\mathrm{d}v\mathrm{d}\varphi, \tag{75}$$

kde

$$\frac{\partial(x, y, z)}{\partial(u, v, \varphi)} = c^3 \sinh u \sin v (\cosh^2 u - \cos^2 v). \tag{76}$$

Po integraci podle φ a v můžeme provést substituci $s = \cosh(u)$, $\mathrm{d}s = \sinh(u)\, \mathrm{d}u$ a dostaneme, že

$$J = \left(\frac{1}{3}X^2 + X + 1\right) e^{-X}, \tag{77}$$

přičemž $X = \frac{2c}{a_1}$. Zavedeme ještě veličiny

$$\begin{aligned} D &= \langle\psi_0|\hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, 0)\frac{a_1}{\mathbf{r}}\hat{\hat{D}}^\dagger(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, 0)|\psi_0\rangle \\ &= \langle\psi_0|\hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, 0)\frac{a_1}{\mathbf{r}}\hat{\hat{D}}^\dagger(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, 0)|\psi_0\rangle, \end{aligned} \tag{78}$$

$$\begin{aligned} E_\mathrm{k} &= \langle\psi_0|\hat{\hat{D}}^\dagger(\mathbf{r}_1, 0)\left(-\frac{1}{2}a_1^2\nabla_{\hat{\mathbf{r}}}\right)\hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_2, 0)|\psi_0\rangle \\ &= \langle\psi_0|\hat{\hat{D}}^\dagger(\mathbf{r}_2, 0)\left(-\frac{1}{2}a_1^2\nabla_{\hat{\mathbf{r}}}\right)\hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_1, 0)|\psi_0\rangle \\ &= \langle\psi_0|\left(-\frac{1}{2}a_1^2\nabla_{\hat{\mathbf{r}}}\right)\hat{\hat{D}}^\dagger(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, 0)|\psi_0\rangle \\ &= \langle\psi_0|\hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, 0)\left(-\frac{1}{2}a_1^2\nabla_{\hat{\mathbf{r}}}\right)|\psi_0\rangle \\ &= \langle\psi_0|\hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, 0)\left(-\frac{1}{2}a_1^2\nabla_{\hat{\mathbf{r}}}\right)|\psi_0\rangle \\ &= \langle\psi_0|\left(-\frac{1}{2}a_1^2\nabla_{\hat{\mathbf{r}}}\right)\hat{\hat{D}}^\dagger(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, 0)|\psi_0\rangle. \end{aligned} \tag{79}$$

Podobně, jako se dá najít výraz pro J (77), spočítáme, že

$$D = \frac{1}{X}\left(1 - (1 + X)e^{-2X}\right), \tag{80}$$

$$E_\mathrm{k} = \frac{1}{2}\left(1 + X - \frac{1}{3}X^2\right)e^{-X}. \tag{81}$$

Konstatujeme, že

$$\begin{aligned} c_1^{-2}\langle\psi|&\left[\hat{H}_\mathrm{k} + \hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_1, 0)\hat{H}_\mathrm{p}\hat{\hat{D}}^\dagger(\mathbf{r}_1, 0) + \hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_2, 0)\hat{H}_\mathrm{p}\hat{\hat{D}}^\dagger(\mathbf{r}_2, 0)\right]|\psi\rangle \\ &= 2E_0 + 4E_0D \pm (4E_0J + 4E_0E_\mathrm{k}) \\ &= 2E_0(1 \pm J) + 4E_0\left(D \pm \left(\frac{1}{2}J + E_\mathrm{k}\right)\right). \end{aligned} \tag{82}$$

Po dosazení vztahu (71) dostaneme, že

$$\langle\psi|\left[\hat{H}_\mathrm{k} + \hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_1, 0)\hat{H}_\mathrm{p}\hat{\hat{D}}^\dagger(\mathbf{r}_1, 0) + \hat{\hat{D}}(\mathbf{r}_2, 0)\hat{H}_\mathrm{p}\hat{\hat{D}}^\dagger(\mathbf{r}_2, 0)\right]|\psi\rangle$$

$$= E_0 \left(1 + 2\frac{D \pm E_\mathrm{p}}{1 \pm J}\right), \tag{83}$$

kde

$$E_\mathrm{p} = \frac{1}{2}J + E_\mathrm{k}, \tag{84}$$

a z toho

$$E_\mathrm{total} = \langle\psi|\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\psi\rangle \tag{85}$$

$$= E_0 \left(1 + 2\frac{D \pm E_\mathrm{p}}{1 \pm J} - \frac{2}{X}\right). \tag{86}$$

Jelikož hledáme přibližný vlastní vektor (vlastní stav) hamiltoniánu (59) „variační metodou“, měli bychom alespoň konstatovat na základě obšírné literatury, která už existuje k tomuto tématu, že se menší hodnoty E_total nabývá pro horní znaménko. Jinak řečeno, aproximace vlastního stavu se nabývá pro horní znaménko. Jak si pamatujeme, horní znaménko ve vztahu (71) působí i formálně dojmem jednodušší volby.

Ačkoli toto uspořádání hodnot E_total bychom odvodili i matematicky, numerické výsledky (obrázky) mají výhodu, že ukazují, že aproximace vlastní energie nabývá minima v případě, že (teoretická) vzdálenost protonů je přibližně rovna vzdálenosti protonů naměřené v experimentu.

6 Kvantování struny

Při studiu harmonického oscilátoru jsme předpokládali znalost pojmu hybnosti částice a její úlohy v hamiltonovské mechanice. V případě spojité pružné struny se začíná hustotou lagranžiánu (Kittel (1977) [10] s. 30). Uvažovaná struna má lineární hustotu ρ a je pod napětím T. Její klasický stav je dán výchylkou z rovnovážné polohy $\psi(x, t)$.

Obvyklým postupem se odvodí, že hustota hybnosti,

$$\Pi(x, t) = \rho\dot{\psi}(x, t), \tag{87}$$

kde tečka značí derivaci podle času, má význam kanonicky sdružené proměnné. V souvislosti s tím se zavádějí operátory $\hat{\psi}(x)$, $\hat{\Pi}(x)$ takové, že

$$[\hat{\psi}(x), \hat{\Pi}(x')] = \mathrm{i}\hbar\delta(x - x')\hat{1}. \tag{88}$$

Odvozená hamiltonovská hustota se upraví na operátor

$$\hat{\mathcal{H}} \stackrel{?}{=} \frac{1}{2\rho}\hat{\Pi}^2 + \frac{1}{2}T\left(\frac{\partial\hat{\psi}}{\partial x}\right)^2. \tag{89}$$

Setkáváme se s kontinuem stupňů volnosti. Tyto stupně volnosti jsou spolu svázané, jak napovídá parciální derivace $\frac{\partial}{\partial x}$. Proto se nebudeme pokoušet o bezprostřední zavedení nějaké obměny anihilačního operátoru závislé na x. Ve vztahu (89) otazník znamená nedokončenou povahu rovnosti.

Předpokládáme, že struna je napjatá mezi body $x = 0$ a $x = L$. Použijeme rozklady

$$\hat{\Pi}(x) = \frac{\sqrt{2}}{L}\sum_{n=1}^{\infty}\sin\left(n\frac{\pi x}{L}\right)\hat{p}_n, \tag{90}$$

kde

$$\hat{p}_n = \sqrt{2}\int_0^L \sin\left(n\frac{\pi x}{L}\right)\hat{\Pi}(x)\mathrm{d}x, \tag{91}$$

a

$$\hat{\psi}(x) = \sqrt{2}\sum_{n=1}^{\infty}\sin\left(n\frac{\pi x}{L}\right)\hat{q}_n, \tag{92}$$

kde

$$\hat{q}_n = \frac{\sqrt{2}}{L}\int_0^L \sin\left(n\frac{\pi x}{L}\right)\hat{\psi}(x)\mathrm{d}x. \tag{93}$$

Nezvyklé koeficienty před součty a integrály jsme zvolili v důsledku rozměrové analýzy.

Dosadíme-li (90) a (92) do hamiltoniánu

$$\hat{H} = \int_0^L \hat{\mathcal{H}}(x)\mathrm{d}x, \tag{94}$$

dostaneme, že

$$\hat{H} \stackrel{?}{=} \sum_{n=1}^{\infty}\left\{\frac{1}{2\rho L}\hat{p}_n^2 + \frac{1}{2}TL\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\hat{q}_n^2\right\}. \tag{95}$$

Podle předchozího náčrtu je struna ekvivalentní soustavě harmonických oscilátorů o hmotnosti $M = \rho L$ a kmitočtech $\omega_n = n\frac{v\pi}{L}$, kde $v = \sqrt{\frac{T}{\rho}}$ je rychlost šíření vlny podle klasické vlnové rovnice.

Další úpravou dostáváme, že

$$\hat{H} \stackrel{?}{=} \sum_{n=1}^{\infty} \hbar\omega_n \left(\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n + \frac{1}{2}\hat{1} \right), \tag{96}$$

kde

$$\hat{a}_n = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{M\omega_n}\hat{q}_n + \mathrm{i}\frac{\hat{p}_n}{\sqrt{M\omega_n}} \right) \tag{97}$$

jsou anihilační operátory kvant energie, $\hat{a}_n^\dagger$ se nazývají kreačními operátory. Platí, že

$$\left[\hat{a}_n, \hat{a}_{n'}^\dagger \right] = \delta_{nn'}\hat{1}. \tag{98}$$

Otazníkem ve vztazích (95) a (96) naznačujeme, že tyto vztahy jsou oprávněny za předpokladu, že členů v rozvoji je konečně mnoho, což by ovšem znamenalo úpravu výrazu. Konečný počet částic na intervalu $\langle 0, L\rangle$ vyplývá z atomové teorie a z něho se odvodí konečné rozvoje. Na druhé straně, a tu se autor neprohlašuje za odborníka, v teorii kvantovaného pole se ve vztahu (96) vypouští vakuový člen $\frac{1}{2}\hat{1}$. Tento zásah se v předchozích vztazích (89) a (95) projeví „závorkami“ : :, tj. požadavkem „normálního uspořádání“ druhých mocnin operátorů.

7 Rezonátor

Budeme se zabývat rezonátorem složeným ze dvou rovnoběžných zrcadel. Předpokládáme, že tento rezonátor obsahuje rovinnou vlnu elektromagnetického pole, která dopadá kolmo na obě zrcadla a odráží se od nich.

Vektorovou povahu elektromagnetického pole nemusíme vyjadřovat, předpokládáme-li polarizované světlo. Vektor polarizace elektrického pole označíme $\mathbf{e}_\perp$. Nárok, že intenzita elektrického pole je rovna nule na obou zrcadlech, se dá přibližně splnit pomocí kovových zrcadel (Saleh and Teich (1991) [19]). Tak dosahujeme jednoduchosti případu spojité pružné struny.

Připomeňme, že lagrangeovská hustota je založena na derivaci vektorového potenciálu $\mathbf{A}$ podle času. Vektorový potenciál $\mathbf{A}$ je stanoven v Coulombově kalibru. Obvyklým postupem se odvodí, že elektrická indukce s opačným znaménkem

$$\hat{\Pi}(x,t) = \epsilon_0 \frac{\partial A}{\partial t}, \tag{99}$$

kde $A = \mathbf{e}_\perp \cdot \mathbf{A}$ má význam kanonicky sdružené proměnné. V souvislosti s tím se zavádějí operátory $\hat{A}(x)$, $\hat{\Pi}(x)$ takové, že

$$[\hat{A}(x), \hat{\Pi}(x')] = \mathrm{i}\hbar \frac{1}{\mathcal{A}} \delta(x - x')\hat{1}, \tag{100}$$

kde $\mathcal{A}$ je obsah příčného průřezu svazkem, který se dá zachytit vhodným zakřivením přibližně rovinných zrcadel.

Připomínáme obvyklý symbol pro elektrickou indukci $D(x) = -\Pi(x)$. Další obvyklý symbol, $B(x)$, značí složku vektoru magnetické indukce vztaženou k jednotkovému vektoru $\mathbf{e}_x \times \mathbf{e}_\perp$, přičemž $\mathbf{e}_x$ je jednotkový vektor ve směru osy x. Odvozená hamiltonovská hustota se upraví na operátor

$$\hat{\mathcal{H}} = \mathcal{A}\left[\frac{1}{2\epsilon_0}\hat{\Pi}^2 + \frac{1}{2\mu_0}\hat{B}^2\right], \tag{101}$$

kde ϵ_0 je permitivita vakua a μ_0 je permeabilita vakua. Ve vztahu (101)

$$\hat{B} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial x}. \tag{102}$$

Předpokládáme, že zrcadla jsou v rovinách $x = 0$ a $x = L$. Použijeme rozklady

$$\hat{\Pi}(x) = \frac{\sqrt{2}}{L\mathcal{A}} \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(n\frac{\pi x}{L}\right)\hat{p}_n, \tag{103}$$

kde

$$\hat{p}_n = \sqrt{2}\,\mathcal{A} \int_0^L \sin\left(n\frac{\pi x}{L}\right)\hat{\Pi}(x)\mathrm{d}x, \tag{104}$$

a

$$\hat{A}(x) = \sqrt{2} \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(n\frac{\pi x}{L}\right)\hat{q}_n, \tag{105}$$

kde

$$\hat{q}_n = \frac{\sqrt{2}}{L} \int_0^L \sin\left(n\frac{\pi x}{L}\right)\hat{A}(x)\mathrm{d}x. \tag{106}$$

Opakování symbolů a vzorců neznamená, že jde o tytéž veličiny jako v případě spojité pružné struny. Nicméně pozorujeme analogii.

Dosadíme-li (103) a (105) do hamiltoniánu (94), dostaneme, že

$$\hat{H} \stackrel{?}{=} \mathcal{A} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \frac{1}{2\epsilon_0 L \mathcal{A}^2}\hat{p}_n^2 + \frac{1}{2\mu_0} L \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \hat{q}_n^2 \right\}. \tag{107}$$

Výsledky předchozího oddílu můžeme využít po náhradě $M \to \epsilon_0 L\mathcal{A}$. Dostáváme pak kmitočty $\omega_n = n\frac{c\pi}{L}$, kde c je rychlost světla ve volném prostoru.

Další úpravou dostáváme, že

$$\hat{H} \stackrel{?}{=} \mathcal{A}\sum_{n=1}^{\infty} \hbar\omega_n \left(\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n + \frac{1}{2}\hat{1}\right), \tag{108}$$

kde

$$\hat{a}_n = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{\epsilon_0 L\mathcal{A}\omega_n}\hat{q}_n + \mathrm{i}\frac{\hat{p}_n}{\sqrt{\epsilon_0 L\mathcal{A}\omega_n}}\right) \tag{109}$$

jsou operátory, které splňují bosonové komutační relace (98). O použití otazníku platí poznámka na konci oddílu 6.

Operátory elektrického pole $\hat{E} = \frac{1}{\epsilon_0}\hat{D}$ a magnetického pole $\frac{1}{\mu_0}\hat{B}$ (symbolu $\hat{H}$ se z pochopitelných důvodů vyhýbáme) mají následující rozvoje:

$$\hat{E} = \mathrm{i}\sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(n\frac{\pi x}{L}\right)\sqrt{\frac{\hbar\omega_n}{L\mathcal{A}\epsilon_0}}(\hat{a}_n - \hat{a}_n^\dagger), \tag{110}$$

$$\frac{1}{\mu_0}\hat{B} = \sum_{n=1}^{\infty} \cos\left(n\frac{\pi x}{L}\right)\sqrt{\frac{\hbar\omega_n}{L\mathcal{A}\mu_0}}(\hat{a}_n + \hat{a}_n^\dagger). \tag{111}$$

8 Nelineární optika

V klasické optice se šíření světla v prostředí popisuje Maxwellovými rovnicemi, které jsou lineární. Předpokládáme-li pro jednoduchost dielektrické prostředí, jeho lineární chování se dá vysvětlit (přibližně) lineární odezvou atomu na přicházející světlo. Obecně tato odezva může být nelineární, jak dokazuje chování dielektrik, kterými prochází silné světlo.

Nelineární chování je popsáno susceptibilitami vyššího řádu (Sutherland (1996) [20]). V mnoha případech jsou užitečné klasické Maxwellovy rovnice, které zahrnují takové susceptibility. Odvození dielektrické funkce a susceptibilit vyššího řádu se zakládá na kvantové fyzice (Bloembergen (1965) [21]). Se vznikem kvantové optiky se studují kvantové statistiky nelineárních optických procesů (Peřina (1991) [15]). Modely zahrnují několik modů a používají aproximaci rotující vlny.

9 Dvouúrovňový atom v rezonátoru

Tímto systémem se zabývá dutinová kvantová elektrodynamika (dutinová QED) (Walther, Varcoe, Englert and Becker (2006) [22]). Jaynesův–Cummingsův model používá aproximaci rotující vlny. Dutinová QED je jeden z oborů, které by mohly přispět ke konstrukci kvantových počítačů.

10 Přístupy k šíření. Jeden a dva fotony

Při kvantovém popisu šíření světla se obvykle jeden operátor pole jednoduchého modelu, který se považuje za vhodný spíše pro rezonátor, nahrazuje kontinuem operátorů pole. Parametrem těchto operátorů je frekvence. To se považuje za přiměřené vzhledem k detekci polí a z toho důvodu, že se frekvence složky při průchodu elektromagnetického světla prostředím zachovává. V knize Lukš and Peřinová (2009) [23] je podán přehled rozličných jiných přístupů ke kvantovému popisu šíření světla. Pokusy o kvantování prostoročasového popisu se setkávají se stejnými potížemi jako fundamentální teorie pole, kdykoli mají zahrnout nelineární susceptibility.

V případě slabé intenzity světla by bylo nejen pohodlné, nýbrž i přiměřené omezit stav elektromagnetického pole na jeden foton, totiž na fotony, které přicházejí nezávisle na sobě. Některé nelineární optické procesy produkují fotony ve dvojicích, k čemuž popisy mohou poměrně snadno přihlédnout.

11 Zpětná vazba

Při studiu kvantových statistik se probírá souvislost mezi subpoissonovskou statistikou počtu fotonů a antishlukováním. Bylo zajímavé, zda se dá dosáhnout antishlukování opakovaným použitím clony. Po těchto experimentech následovala teorie věnovaná i stlačení kvadratury. V zásadě využití detekce světla k řízení jeho vlastností pomocí elektrooptiky dokáže jen odstranit nadbytečný šum, ale studium zpětnovazebního řízení odhalilo i jev „zmáčknutí“ (Wiseman (2004) [24], Wiseman and Milburn (2010) [25]).

12 Fotonové struktury

Koncem 80. let 20. století se začal uplatňovat poznatek, že třírozměrné periodické dielektrické struktury mohou mít fotonový „zakázaný pás“ (Yablonovitch (1987) [26]). Dvojrozměrné a třírozměrné periodické struktury začaly být studovány s pozorností srovnatelnou s energií věnovanou elektronovým zakázaným pásům v polovodičových krystalech. To platí i o jednorozměrných periodických strukturách, což jsou převážně dobře známé tenké vrstvy. Obecně se k tvorbě mříže fotonické struktury nebo multivrstvy může využívat i kovu.

Zde bychom se jen dotkli toho, že přibývá literatury věnované kvantovému pojednání fotonových struktur. Pravděpodobně se při popisu lineárního prostředí můžeme v mnoha případech spokojit s tím, že klasický popis poskytuje modový rozklad, ke kterému se snadno přidruží operátory pole. Nelineární prostředí působí potíže, jak jsme poznamenali v oddílu 10.

13 Kvantová informatika a počítače

Připomeneme základní pojmy oboru kvantové fyziky, ve kterém se používají i poznatky kvantové optiky. Kvantovou informací se nazývá fyzikální informace obsažená ve stavu kvantového systému. Kvantovým počítačem se nazývá zařízení, které když je založeno na kvantově mechanických jevech jako např. na superpozici a provázání, slouží ke zpracování dat. Data jsou reprezentována stavy fyzikálního systému (Nielsen and Chuang (2000) [27]).

Reference

[1] Planck M., “Über die Verbesserung der Wien’schen Spektralgleichung”, Verh. D. Phys. Ges. 2 (1900a) 202–204.

[2] Planck M., “Zur Theorie des Gesetzes der Energieverteilung im Normalspektrum”, Verh. D. Phys. Ges. 2 (1900b) 237–245.

[3] Einstein A., “Über einen die Erzeugung und Werwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt,”Annalen der Physik **17** (1905) 132–148.

[4] Bohr N., “On the constitution of atoms and molecules”, Philosophical Magazine 26 (1913) 1–25; 476–502; 857–875.

[5] Heisenberg W., “Quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen,”Z. Phys. **33** (1925) 879–893.

[6] Schrödinger E., “Quantisierung als Eigenwertproblem,”Annalen der Physik **79** (1926a) 361–376; **79** (1926b) 489–527; **80** (1926c) 437–490; **81** (1926d) 109–139.
[7] Zahradník R. and Polák R., Základy kvantové chemie. SNTL, Praha 1976.
[8] Fitzpatrick R., Quantum Mechanics: An intermediate level course. The University of Texas at Austin. Available at `farside.ph.utexas.edu/teaching/qmech/lectures/node129.html`.
[9] Born M., Heisenberg W., and Jordan P. “Zur Quantenmechanik II,”Z. Phys. **35** (1926) 557–615.
[10] Kittel Ch., Kvantová teória tuhých látok. ALFA, Bratislava 1977.
[11] Dirac P. A. M., “The quantum theory of the emission and absorption of radiation,”Proc. Roy. Soc. Lond. Ser. A **114** (1927) 243–265.
[12] Von Neumann J., Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik. Springer, Berlin 1932.
[13] Milonni P. W., The Quantum Vacuum: An Introduction to Quantum Electrodynamics. Academic Press, San Diego 1994.
[14] Dušek M., Koncepční otázky kvantové teorie. Univerzita Palackého, Olomouc 2002.
[15] Peřina J., Quantum Statistics of Linear and Nonlinear Optical Phenomena. Kluwer, Dordrecht 1991.
[16] Formánek J., Úvod do kvantové teorie. Academia, Praha 1983.
[17] ter Haar D., The Old Quantum Theory, Pergamon Press. Oxford 1967.
[18] Bateman H. and Erdélyi A., Higher Transcendental Functions Vol. 3. McGraw-Hill Book Co., New York 1955.
[19] Saleh B. E. A. and Teich M. C., Fundamentals of Photonics. J. Wiley and Sons, New York 1991.
[20] Sutherland R. L., Handbook of Nonlinear Optics. Marcel Dekker, New York 1996.
[21] Bloembergen N., Nonlinear Optics A Lecture Note and Reprint Volume. W. A. Benjamin, New York 1965.
[22] Walther H., Varcoe B. T. H., Englert B.-G., and Becker T., ‘Cavity quantum electrodynamics,”Rep. Progr. Phys. 69 (2006) 1325–1382.
[23] Lukš A. and Peřinová V., Quantum Aspects of Light Propagation. Springer, New York 2009.
[24] Wiseman H. M., “Squeezing and feedback,”in Quantum Sqeezing, edited by Drummond P. D. and Ficek Z. Springer, Berlin 2004. P. 171–223.
[25] Wiseman H. M. and Milburn G. J., Quantum Measurement and Control. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2010.
[26] Yablonovitch E., “Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics,”Phys. Rev. Lett. **58** (1987) 2059–2062.
[27] Nielsen M. A. and Chuang I. L., Quantum Computation and Quantum Information, Cambridge University Press, Cambridge 2000.

RNDr. Antonín Lukš, CSc.

Kvantová mechanika pro kvantovou optiku

Výkonný redaktor: prof. RNDr. Tomáš Opatrný, Dr.
Odpovědná redaktorka: Vendula Drozdová
Návrh a grafické zpracování obálky: Jiří K. Jurečka

Vydala a vytiskla Univerzita Palackého v Olomouci
Křížkovského 8, 771 47 Olomouc
www.upol.cz/vup

Olomouc 2012

1. vydání

ISBN 978-80-244-3043-0

Neprodejné