# Kvantování elektromagnetického pole
**Šárka Gregorová, 2013**

Vycházíme z Maxwellových rovnic

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{B} - \mu\epsilon\,\partial_t \mathbf{E} &= \mu \mathbf{j} \\ \nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} &= 0 \\ \epsilon \nabla \mathbf{E} &= \rho \\ \nabla \mathbf{B} &= 0. \end{aligned} \qquad (1)$$

Ze čtvrté rovnice plyne existence vektorového potenciálu *A*

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \qquad (2)$$

Dosazením do druhé rovnice zjistíme, že elektrické pole *E* se může od časové derivace *A* lišit pouze o pole s nulovou rotací (neboť $\nabla \times (\mathbf{E} + \partial_t \mathbf{A}) = 0$). Pole s nulovou rotací lze vyjádřit jako gradient nějakého skalárního potenciálu *Φ*, tedy

$$\mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{A} - \nabla \phi. \qquad (3)$$

Potenciály *A* a *Φ* nejsou určeny jednoznačně. My volíme tzv. **Coulombovu kalibrační podmínku**, že divergence *A* je nulová

$$\nabla \cdot \vec{A} = 0 \qquad (4)$$

protože pak nám vyjdou rovnice, které se hezky řeší.

Dosadíme-li (3) do třetí Maxwellovy rovnice a uvážíme-li (4), vyjde nám pro skalární potenciál rovnice

$$-\epsilon \nabla^2 \phi = \rho \qquad (5)$$

jejímž řešením je známý vztah

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}', t)}{\epsilon\, |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \qquad (6)$$

Z rovnice (5) vidíme, že skalární potenciál závisí pouze na okamžitém rozložení náboje, nemá žádný vlastní časový vývoj. Elektrická intenzita *E* se tedy v Coulombově kalibraci rozdělí na dva kusy – na statickou část $\nabla\Phi$, a na část, která popisuje dynamiku pole $\partial_t A$, viz rovnici (3). Část $-\partial_t A$ má nulovou divergenci a označuje se jako **transverzální pole**.

Interakce elektronů a jader v atomech a molekulách popisujeme zjednodušeně právě okamžitou interakcí, což můžeme v Coulombově kalibraci udělat pouze pomocí potenciálu *Φ* (nezjednodušeně to prý nejde). V Hamiltoniánu pak máme (kromě členů odpovídajících kinetické energii) členy odpovídající interakci jader a elektronů mezi sebou, něco jako

$$\sum \frac{q_i q_j}{|r_i - r_j|},$$

ale $\boxed{\text{POZOR!}}$ tento tvar mají právě jedině v Coulombově kalibraci.

Dynamické chování elektromagnetického pole popisujeme pomocí vektorového potenciálu $A$. Dosadíme (2), (3) a (4) do první Maxwellovy rovnice a dostaneme pro vektorový potenciál **vlnovou rovnici**

$$(\mu\epsilon\,\partial_t^2 - \nabla^2)\mathbf{A} = \mu\,(\mathbf{j} - \epsilon\,\nabla\partial_t\phi) \qquad (7)$$

Budeme teď řešit **volné pole** bez zdrojů, ve kterém je pravá strana rovnice (7) nulová. Vlnová rovnice se dobře řeší ve Fourierově obraze, rovnici navíc budeme řešit „**v krabici**“, tedy v 3D krychli o straně délky $L$ (levý dolní roh má v bodě (0,0,0)) a uvažujeme periodické okrajové podmínky, tj. $A(0,y,z) = A(L,y,z)$, stejně tak pro ostatní 2 směry. Fourierova transformace:

$$\vec{A}(r,t) = \sum_{k,\lambda} A_{k\lambda}(t)\vec{T}_{k\lambda}(r) \qquad (8)$$

kde $T_{k\lambda}$ jsou členy báze, do které rozvíjíme, a $A_{k\lambda}$ jsou časově závislé koeficienty. Volíme takovou bázi, že

$$\Delta\vec{T}_{k\lambda} = -k^2\vec{T}_{k\lambda} \qquad (9)$$

protože pak budou výpočty jednoduché. Podmínku (9) splňuje báze sinů a cosinů, tj.

$$\vec{T}^{c}_{k\lambda} = \sqrt{\frac{2}{L^3}}\vec{\varepsilon}_\lambda \cos(\vec{k}\cdot\vec{r}),\ \vec{T}^{s}_{k\lambda} = \sqrt{\frac{2}{L^3}}\vec{\varepsilon}_\lambda \sin(\vec{k}\cdot\vec{r}) \qquad (10)$$

kde $\sqrt{\frac{2}{L^3}}$ je normalizační konstanta a $\vec{\varepsilon}_\lambda$ je jednotkový vektor ve směru $T_{k\lambda}$. Z Coulombovy kalibrační podmínky (4) vyplývá[1], že $k$ je kolmé na $T_{k\lambda}$. Vektor $\vec{\varepsilon}_\lambda$ tedy může pro každé $\vec{k}$ nabývat dvou hodnot $\vec{\varepsilon}_1$ a $\vec{\varepsilon}_2$ (aby jednotlivé členy báze byly lineárně nezávislé) a nazývá se **polarizace**.

Z našich periodických okrajových podmínek pro krabici plynou podmínky na vektor $\vec{k}$, které ho kvantují. Vektor $\vec{k}$ nemůže nabývat libovolných hodnot, pouze takové $\vec{k}$, že

$$\vec{k}_i \in \frac{2\pi}{L}\vec{n}$$

kde prvky vektoru $\vec{n}$ jsou přirozená čísla, splňuje naše okrajové podmínky. Tomuhle se říká **první kvantování**.

Dosadíme bázi do rovnice (8) a celkově tak pro vektorový potenciál dostaneme

[1] div $A = 0$ => div $T = 0$, dosazením za $T$ a výpočtem ukážeme $T \cdot k = 0$

$$\vec{A}(\vec{r},t)=\sum_{k>0}\sum_{\lambda=1}^{2}\left(A_{k\lambda}^{c}\sqrt{\frac{2}{L^3}}\vec{\varepsilon}_{\lambda}\cos(\vec{k}\cdot\vec{r})+A_{k\lambda}^{s}\sqrt{\frac{2}{L^3}}\vec{\varepsilon}_{\lambda}\sin(\vec{k}\cdot\vec{r})\right) \qquad (11)$$

POZOR! Pořadí sum nelze prohodit – ke každému $\vec{k}$ existují dvě $\vec{\varepsilon}_{\lambda}$, ne naopak!

Z prvního kvantování jsme tak dostali **módy** elektromagnetického pole, které jsou určeny velikostí *k*, jeho směrem, polarizací $\vec{\varepsilon}_{\lambda}$ a tím, zda se jedná o sinus nebo kosinus. Zavádíme též frekvenci $\omega_k = c|\vec{k}|$, kde *c* je rychlost světla ve vakuu, $c = 1/\sqrt{\mu\varepsilon}$.

S uvážením (9) dostaneme z rovnice (7) s nulovou pravou stranou vztah

$$\sum_{k}\sum_{\lambda=1}^{2}\left(\ddot{A}_{k\lambda}(t)+\omega_k^2 A_{k\lambda}(t)\right)\vec{T}_{k\lambda}(\vec{r})=0 \qquad (12)$$

kde tečky značí parciální derivace podle času. To platí, pokud pro všechna *k* a $\lambda$ je sčítanec v sumě nulový. Vidíme (nebo nevidíme, ale stejně je to tak), že jsme dostali rovnici (resp. nekonečno rovnic) pro **lineární harmonický oscilátor (LHO)**. LHO je popsán Hamiltoniánem

$$H_i = \frac{p_i^2}{2}+\frac{1}{2}\omega_i^2 q_i^2 \qquad (13)$$

kde *q* a *p* jsou kanonicky sdružená souřadnice a impuls. V našem případě je $q_{k\lambda} = A_{k\lambda}$, kanonicky sdružený impuls je[2] $\dot{A}_{k\lambda}$. Teď vstoupíme do kvantové mechaniky a vzpomeneme si na anihilační a kreační operátory pro LHO[3], pomocí nichž lze Hamiltonián zapsat ve tvaru

$$\bar{H}_i = \hbar\omega_i\left(a_i^{+}\bar{a}_i + \tfrac{1}{2}\right), \qquad (14)$$

Celkový Hamiltonián pro všechny módy (sinové a cosinové, označuji *s* nebo *c*) je tedy

$$H=\sum_{k}\sum_{\lambda=1}^{2}\hbar\omega_k\left(\left(a_{k\lambda}^{s\ nebo\ c}\right)^{+}a_{k\lambda}^{s\ nebo\ c}+1/2\right) \qquad (15)$$

Základní vlastní stav Hamiltoniánu, tedy vakuum, budeme označovat $|0\rangle$, platí pro něj $a_{k\lambda}^{s\ nebo\ c}|0\rangle = 0$ pro všechna *k*, $\lambda$ a pro siny i kosiny. Stav je normalizovaný na jedničku, tedy $\langle 0|0\rangle = 1$. Z rovnice (15) pak dostaneme, že energie vakua je

---

[2] jde odvodit z Lagrangiánu, viz klasickou teoretickou mechaniku

[3] Anihilační operátor $a=\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(p-i\omega q)$, kreační operátor $a^{+}=\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(p+i\omega q)$, využívá se postulát QM $[q_i,p_j]=i\hbar\delta_{ij}$, z něhož plynou komutátory pro různé módy *m*, *n* $[a_m,a_n^{+}]=\delta_{mn}$, $[a_m,a_n]=[a_m^{+},a_n^{+}]=0$. Pozor, *m* a *n* zde označují celý mód, tedy trojici $\vec{k}$, $\lambda$ a sin nebo cos.

$$E_0 = \langle 0 | \sum_k \sum_{\lambda=1}^{2} \hbar\omega_k \left( \left( a_{k\lambda}^{s\ nebo\ c} \right)^+ a_{k\lambda}^{s\ nebo\ c} + 1/2 \right) | 0 \rangle = \langle 0 | \sum_k \sum_{\lambda=1}^{2} \frac{\hbar\omega_k}{2} | 0 \rangle = \sum_k \sum_{\lambda=1}^{2} \frac{\hbar\omega_k}{2} = \infty$$

Tohoto nehezkého nekonečna se zbavíme tzv. **renormalizací**, kdy energii vakua definitoricky položíme rovnou nule tím, že od Hamiltoniánu odečteme tu část, která je za nekonečno zodpovědná. Tedy dostaneme

$$H = \sum_k \sum_{\lambda=1}^{2} \hbar\omega_k \left( a_{k\lambda}^{s\ nebo\ c} \right)^+ a_{k\lambda}^{s\ nebo\ c} \tag{16}$$

Kreační operátor $\left( a_{k\lambda}^{s\ nebo\ c} \right)^+$ zvýší energii elektromagnetického pole o $\hbar\omega_k$, viz LHO. Energie elektromagnetického pole se tedy zvyšuje v jednotlivých módech pouze po násobcích $\hbar\omega_k$, tato kvanta energie se nazývají **fotony** a tomuto kvantování pole se říká **druhé kvantování**.

Stav s $n$ fotony v módu $\left( \vec{k},\ \lambda,\ s\ nebo\ c \right)$ vznikne $n$-násobným působením kreačního operátoru daného módu na vakuum, tedy

$$\left| n_{k,\lambda,s\ nebo\ c} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( \left( a_{k\lambda}^{s\ nebo\ c} \right)^+ \right)^n | 0 \rangle \tag{17}$$

kde faktor $\frac{1}{\sqrt{n!}}$ je normalizační konstanta. Obecný stav s ostrým počtem fotonů je pak

$$| \{n\} \rangle = \prod_{k,\ \lambda,s\ nebo\ c} \frac{1}{\sqrt{\left( n_{k,\lambda,s\ nebo\ c} \right)!}} \left( \left( a_{k\lambda}^{s\ nebo\ c} \right)^+ \right)^n | 0 \rangle \tag{18}$$

**Operátory elektromagnetických veličin**

Pro anihilační a kreační operátor módu $j$ (tento index značí celý mód, tj. trojici $\vec{k}$, $\lambda$ a sin nebo cos) platí

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_j}} \left( \dot{A}_j + i\omega A_j \right),\ a_j^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_j}} \left( \dot{A}_j - i\omega A_j \right) \tag{19}$$

Zpětně můžeme vypočítat $A_j$ pomocí $a_j$ a $a_j^+$ a dosazením do (8) získáme výraz pro operátor vektorového potenciálu

$$\vec{A}(\vec{r}) = \sum_k \sum_{\lambda=1}^{2} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} \left( \left( a_{k\lambda}^{c+} + a_{k\lambda}^{c} \right) \vec{T}_{k\lambda}^{c} + \left( a_{k\lambda}^{s+} + a_{k\lambda}^{s} \right) \vec{T}_{k\lambda}^{s} \right)$$

Napíšu to jako sumu přes všechny módy (dané trojicí $\vec{k}$, $\lambda$ a sin nebo cos), aby to bylo přehlednější

$$\vec{A}(\vec{r}) = \sum_{m \in \forall m\acute{o}dy} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_m}} \left( a_m^+ + a_m \right) \vec{T}_m \tag{20}$$

Transverzální elektrickou intenzitu získáme z rovnic (19) z výrazu pro $\dot{A}$, viz (3)

$$\vec{E}_{trans}(\vec{r}) = \sum_{m \in \forall módy} \sqrt{\frac{\hbar\omega_m}{2}} i\left(a_m^+ - a_m\right)\vec{T}_m$$

**Jiná báze**

Kromě báze sinů a kosinů se používá též komplexní báze

$$\vec{T}_{k\lambda}^e = \sqrt{\frac{1}{L^3}}\vec{\varepsilon}_\lambda \exp\left(i\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \tag{21}$$

potom $k$ je opět kvantované (první kvantování, $\vec{k}_i \in \frac{2\pi}{L}\vec{n}$), ale elementy vektoru $\vec{n}$ jsou tentokrát celá čísla, tedy i záporná. Mód elektromagnetického pole je v tomto případě určen vektorem $\vec{k}$ a polarizací $\vec{\varepsilon}_\lambda$.

Vztahy mezi anihilačními a kreačními operátory v této bázi a v sinové+kosinové bázi se určí dosazením do (20) a využitím vztahu exp($ix$) = sin($x$) + $i$ cos($x$). Každopádně anihilační a kreační operátory v této bázi opět přidávají/odebírají jeden foton daného módu, stejně jako v bázi sinů a kosinů.

V této bázi mají elektromagnetické veličiny tvar

$$\vec{A}(\vec{r}) = \sum_k \sum_{\lambda=1}^{2} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k L^3}} \vec{\varepsilon}_\lambda \left(e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} a_m^+ + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} a_m\right) \tag{22}$$

$$\vec{E}_{trans}(\vec{r}) = -i\sum_k \sum_{\lambda=1}^{2} \sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2L^3}} \vec{\varepsilon}_\lambda \left(e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} a_m^+ - e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} a_m\right)$$

Pro magnetickou indukci získáme z rovnice (2)

$$\vec{B}(\vec{r}) = -i\sum_k \sum_{\lambda=1}^{2} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k L^3}} \vec{k} \times \vec{\varepsilon}_\lambda \left(e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} a_m^+ - e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} a_m\right)$$

**Nekonečná krabice**

Když pošleme $L$ do nekonečna (zvětšíme krabici tak, že je nekonečná), přejdou sumy na integrály[4], tedy

$$H = \int_0^\infty \hbar\omega \sum_{j=1}^{2} a^+(\omega, \vec{\varepsilon}^{\,j}) a(\omega, \vec{\varepsilon}^{\,j}) \mathrm{d}^3k$$

$$\vec{A}(\vec{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \sum_{j=1}^{2} \vec{\varepsilon}^{\,j} \left(a(\omega, \vec{\varepsilon}^{\,j}) \mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + a^+(\omega, \vec{\varepsilon}^{\,j}) \mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right) \mathrm{d}^3k$$

Analogicky pro další veličiny.

[4] Pokud se vám to nelíbí, pak vězte, že matematikům se tato operace prý také nelíbí

**Čas**

Závislost veličin na čase se vyjádří tak, že přidáme faktor exp(-$i\omega t$) ke každému anihilačnímu a exp($i\omega t$) ke kreačnímu operátoru[5], tedy například rovnice (22):

$$\vec{A}(\vec{r}) = \sum_k \sum_{\lambda=1}^{2} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k L^3}} \vec{\varepsilon}_\lambda \left( e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}+i\omega t} a_m^+ + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}-i\omega t} a_m \right)$$

**Shrnutí**

Vyjdeme z Maxwellových rovnic. Pomocí Coulombovy kalibrace nacpeme veškerou elektrostatiku do skalárního a veškerou elektrodynamiku do vektorového potenciálu. Z Maxwellových rovnic a Coulombovy kalibrace nám pro vektorový potenciál vyjde vlnová rovnice, která má pro volné pole nulovou pravou stranu. Rozhodneme se ji řešit pomocí Fourierovy transformace. Vhodně si zvolíme bázi Fourierova prostoru. Svět zavřeme do krabice, což nám dá kvantovací podmínky na vlnový vektor (první kvantování), z Coulombovy kalibrace vyjde kolmost vlnového vektoru a polarizace. Z vlnové rovnice se ve Fourierově obraze stane součin rovnic pro LHO, které řešíme pomocí anihilačních a kreačních operátorů (tady do toho teprve vstupuje kvantovka). Kreační operátor vyrobí foton v daném módu, anihilační operátor ho zničí (druhé kvantování). Je potřeba si uvědomit, co všechno v naší zvolené bázi definuje jeden mód (též jednu bázovou funkci). Hamiltonián pole je třeba renormalizovat, aby nám nevycházela energie vakua nekonečná. Operátory vektorového potenciálu, elektrické intenzity, magnetické indukce a dalších EM veličin (např. Poyntingova vektoru) určíme pomocí anihilačních a kreačních operátorů (druhé kvantování).

**Zdroje:** přednáška Pokročilá kvantová teorie (F. Šanda), kus skript k přednášce (Čápek), přednáška Syntentické problémy kvantové teorie (vede V. Profant, přednášel J. Dostál), zpracování Kuby Dostála na http://fotoskladka.tk/school/statnice/Kvantovani_elmg_pole.pdf

**Poznámka:** Asi jsem ne nad všemi vektory udělala šipky a nad operátory jsem nedělala stříšky, snad prominete... Taky se normalizační konstanty z různých zdrojů mírně liší.

[5] Proč, to nevím