Cvičení ÚDKM 5. 5. 2022 (12. cvičení)

Témata:

- operátor hustoty, matice hustoty
- interakce atomu a EM pole

Operátor hustoty

Dosud jsme pro popis systémů používali vlnovou funkci. Někdy je však výhodné, či dokonce nutné, místo vlnové funkce popsat systém tzv. operátorem hustoty. Operátor hustoty je definovaný

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i \left|\psi_i\right\rangle \left\langle\psi_i\right| \,, \tag{1}$$

kde p_i je pravděpodobnost, že se systém nachází ve stavu $|\psi_i\rangle$, a platí $\sum_i p_i = 1$. Pokud se systém nachází v jednom konkrétním stavu $|\psi_a\rangle$, je odpovídající $p_a = 1$ a všechna ostatní $p_i = 0$ ($i \neq a$), a říkáme, že se systém nachází v čistém stavu. Obecně se ale systém může nacházet v superpozici několika stavů, mluvíme pak o tzv. smíšeném stavu.

Operátor hustoty $\hat{\rho}$ zpravidla vyjadřujeme jako matici hustoty, tj. projektujeme ho na nějakou bázi. Například můžeme mít systém atom + EM pole, kde předpokládáme, že atom můžeme popsat dvěma hladinami $|1\rangle$ a $|2\rangle$. V této bázi má matice hustoty tvar

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \,, \tag{2}$$

kde $\rho_{ij} = \langle i|\, \hat{\rho}\, |j\rangle$. ρ_{11} a ρ_{22} mají význam populací - jak je první, resp. druhý, stav obsazený. Mimodiagonální členy ρ_{12} a ρ_{21} popisují interakci mezi první a druhou hladinou (přes EM pole) a říká se jim koherence.

Střední hodnoty operátorů počítáme pomocí stopy matice

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{A}\right) \tag{3}$$

Pro popis časového vývoje operátoru hustoty se používá tzv. Liouvilleova rovnice (řídící rovnice, angl. master euqation)

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\rho}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{H}, \hat{\rho}\right] \,. \tag{4}$$

Atom spřažený s EM polem

Představme si atom jako dvouhladinový systém: základní stav $|g\rangle$ s energií E_g a excitovaný stav $|e\rangle$ s energií E_e. Dále uvažujme elektromagnetické pole s takovou frekvencí ω, že $\hbar\omega$ odpovídá rozdílu těchto dvou hladin atomu, $E_e - E_g = \hbar\omega$, viz obrázek. Za bázové stavy pole uvažujeme stavy s n fotony, tj. $|n\rangle$. Báze celého systému tak sestává obecně ze stavů $|g\rangle \otimes |n\rangle$ a $|e\rangle \otimes |n\rangle$. Poznamenejme, že každý ze stavů typu $|e\rangle \otimes |n\rangle$ má stejnou energii jako stav typu $|g\rangle \otimes |n+1\rangle$.

Nic nezakazuje, aby systém připravený ve stavu $|e\rangle \otimes |n\rangle$ se vyvíjel v čase jako lineární kombinace stavů

$$|\psi(t)\rangle = \alpha\, |e\rangle \otimes |n\rangle + \delta\, |g\rangle \otimes |n+1\rangle \,, \tag{5}$$

kde koeficienty α a δ jsou nezávislé na n.

(I) O jaký fyzikální proces by se mohlo jednat?

Uvažujme, že atom byl na počátku ve stavu

$$|\psi_A(t=0)\rangle = |e\rangle \tag{6}$$

a elektromagnetické pole bylo ve stavu popsaném

$$|\psi_{EM}(t=0)\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|p\rangle + |p-1\rangle\right) \,. \tag{7}$$

(II) V jakém stavu se obecně bude nacházet systém v čase t?

Pro popis celého systému tedy budeme mít bázi sestávající z dvou atomových stavů $|g\rangle$ a $|e\rangle$ a ze tří stavů pole $|p-1\rangle$, $|p\rangle$ a $|p+1\rangle$. (Spojku "a" zde čtetě jako tenzorový součin.)

(III) Napište těchto 6 bázových stavů.

(IV) Napište matici hustoty (tj. operátor hustoty $\hat{\rho}$ v maticové reprezentaci), celkového systému v bázi šesti stavů z (III). Mělo by vyjít

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \alpha\alpha^* & \alpha\alpha^* & 0 & 0 & \alpha\delta^* & \alpha\delta^* \\ \alpha\alpha^* & \alpha\alpha^* & 0 & 0 & \alpha\delta^* & \alpha\delta^* \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \alpha^*\delta & \alpha^*\delta & 0 & 0 & \delta\delta^* & \delta\delta^* \\ \alpha^*\delta & \alpha^*\delta & 0 & 0 & \delta\delta^* & \delta\delta^* \end{pmatrix}, \tag{8}$$

kde pořadí bázových stavů je $|e\rangle\,|p-1\rangle$, $|e\rangle\,|p\rangle$, $|e\rangle\,|p+1\rangle$, $|g\rangle\,|p-1\rangle$, $|g\rangle\,|p\rangle$, $|g\rangle\,|p+1\rangle$.

Jelikož se zajímáme o vývoj atomu v čase, můžeme přescítat přes stavy EM pole. Získáme tak tzv. redukovanou matici hustoty.

$$\langle\psi_A|\,\hat{\rho}\,|\psi_A\rangle = \sum_i \langle\psi_A, \psi_{EM,i}|\,\hat{\rho}\,|\psi_A, \psi_{EM,i}\rangle\ . \tag{9}$$

(V) Napište v bázi stavů $|g\rangle$ a $|e\rangle$ redukovanou matici hustoty popisující stav atomu vyvíjející se v čase. Mělo by vyjít

$$\rho_A(t) = \begin{pmatrix} \alpha\alpha^* & \frac{1}{2}\alpha\delta^* \\ \frac{1}{2}\alpha^*\delta & \delta\delta^* \end{pmatrix}\ . \tag{10}$$

(VI) Jedná se o matici hustoty čistého stavu? To poznáme tak, že spočteme $\mathrm{Tr}\rho^2$. Pro čistý stav platí $\mathrm{Tr}\rho^2 = 1$.

Označme $\hat{H}_A$ hamiltonián systému s dvěma izolovanými hladinami $|e\rangle$, $|g\rangle$ ve vzdálenosti $\hbar\omega$, tj. hamiltonián popisující pouze náš atom (a nikoliv EM pole a interakci s ním). Umístíme-li nulovou energetickou hladinu do (aritmetického) středu těchto dvou hladin, $\hat{H}_A$ má v bázi stavů $|e\rangle\,,|g\rangle$ tvar

$$\hat{H}_A = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar\omega & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\hbar\omega \end{pmatrix}\ . \tag{11}$$

Na počátku se atom nacházel v excitovaném stavu, tj.

$$\rho_A(t=0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\ . \tag{12}$$

(VI) Jaká energie odpovídá tomuto počátečnímu stavu? Tj. spočtěte $<\hat{H}_A>= \mathrm{Tr}\,(\rho_A H_A)$.

Koncový stav atomu v čase t je popsán maticí (10). (VII) Jaká je odpovídající energie, tj. $\mathrm{Tr}\,(\rho_A H_A)$? Můžeme tedy pro popis vývoje stavu atomu použít časově nezávislý hamiltonián $\hat{H}_A$, anebo ne?

Povinné úlohy na příště

1. (1 b.) Dokažte rovnici (3), tj. že střední hodnotu operátoru $\hat{A}$ spočteme pomocí stopy matice $\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{A}\right)$.

2. (1 b.) Ukažte, že pro čistý stav platí $\mathrm{Tr}\rho^2 = 1$.

Bonusová úloha

Tentokrát není.