Kapitola 21

Kanonické kvantování polí

Přehled klasické teorie pole

Začneme stručným zopakováním základů klasické teorie pole v Lagrangeově formalismu. Prostoročasové souřadnice označíme jako $x^\mu, \mu = 0, 1, 2, 3$. Uvažujme s polí (funkcí x^μ) $\varphi^i, i = 1, \ldots, s$, symbolem $\varphi^i_{,\mu}$ budeme značit derivace pole i podle x^μ

$$\varphi^i_{,\mu} = \frac{\partial \varphi^i}{\partial x^\mu}.$$

Hustota Lagrangiánu $\mathscr{L}(\varphi^i, \varphi^i_{,\mu}, x^\mu)$ je nějaká funkce polí, jejich prvních derivací a souřadnic. Langrangián se z hustoty určí integrací přes prostorové souřadnice

$$L = \int\limits_{\mathbb{R}^3} \mathscr{L}(\varphi^i, \varphi^i_{,\mu}, x^\mu) d^3x,$$

akce je daná integrálem přes všechny prostoročasové souřadnice

$$S = \int\limits_{t_0}^{t_f} \int\limits_{\mathbb{R}^3} \mathscr{L}(\varphi^i, \varphi^i_{,\mu}, x^\mu) d^4x.$$

Pohybové rovnice pro pole se určí z variačního principu $\delta S = 0$, který vede na soustavu Euler-Lagrangeových rovnic

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \varphi^i_{,\mu}} - \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \varphi^i} = 0, \quad i = 1, \ldots, s.$$

K přechodu ke kvantové teorii budeme potřebovat hustotu hamiltoniánu $\mathscr{H}$, kterou zavedeme jako složku 00 kanonického tenzoru energie a hybnosti

$$\mathscr{T}^{\mu\nu} = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \varphi^i_{,\mu}} \varphi^i_{,\nu} - g^{\mu\nu} \mathscr{L}, \quad g^{\mu\nu} = \mathrm{diag}(1, -1, -1, -1).$$

Hustota hamiltoniánu je tedy

$$\mathscr{H} = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \varphi^i_{,0}} \varphi^i_{,0} - \mathscr{L} = \pi_i \dot{\varphi}^i - \mathscr{L},$$

kde jsme označili obecnou hybnost příslušnou k poli φ^i

$$\pi_i = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \varphi^i_{,0}} = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\varphi}^i}. \tag{21.1}$$

Z hamiltonovské hustoty dostaneme hamiltonián integrací přes prostorové souřadnice

$$H = \int_{\mathbb{R}^3} \mathscr{H} d^3x.$$

Kvantování Klein-Gordonova pole

Postup kanonického kvantování nejprve ukážeme na reálném skalárním Klein-Gordonově poli φ. Budeme pracovat v jednotkách $c = \hbar = 1$. Hustota lagrangiánu je v tomto případě

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}\partial_\mu \varphi \partial^\mu \varphi - \frac{1}{2} m^2 \varphi^2 = \frac{1}{2} g^{\mu\nu} \varphi_{,\mu} \varphi_{,\nu} - \frac{1}{2} m^2 \varphi^2,$$

Euler-Lagrangeova rovnice pro pole φ je Klein-Gordonova rovnice

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \varphi_{,\mu}} - \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \varphi} = \partial_\mu (g^{\mu\nu} \varphi_{,\nu}) + m^2 \varphi = \Box \varphi + m^2 \varphi = 0, \tag{21.2}$$

kde $\Box = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$ je d'Alembertův operátor. Rovnice (21.2) má nekonečně mnoho řešení tvaru rovinné vlny

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{x}, t) = e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega(\vec{k})t\right)},$$

kde $\omega(\vec{k})$ splňuje podmínku

$$\omega(\vec{k})^2 = \vec{k}^2 + m^2.$$

Obecné reálné řešení Klein-Gordonovy rovnice je tedy

$$\varphi(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \; N(\vec{k}) \left(a_{\vec{k}} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega(\vec{k})t)} + \overline{a}_{\vec{k}} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \right), \tag{21.3}$$

kde $N(\vec{k})$ je nějaký normalizační faktor, který později vhodně zvolíme. Obecná hybnost pro Klein-Gordonovo pole je

$$\pi(\vec{x}, t) = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \varphi_{,0}} = g^{0\nu} \varphi_{,\nu} = \dot{\varphi} = -i \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \; \omega(\vec{k}) N(\vec{k}) \left(a_{\vec{k}} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega(\vec{k})t)} - \overline{a}_{\vec{k}} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \right).$$

Hustotu hamiltoniánu pro Klein-Gordonovo pole můžeme vyjádřit ve tvaru

$$\mathscr{H} = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\varphi}}\dot{\varphi} - \mathscr{L} = \frac{1}{2}\left(\pi^2 + (\vec{\nabla}\varphi)\cdot(\vec{\nabla}\varphi) + m^2\varphi^2\right). \tag{21.4}$$

Kanonické kvantování Klein-Gordonova pole spočívá v tom, že z $\varphi(\vec{x},t)$, $\pi(\vec{x},t)$, $a_{\vec{k}}$ a $\overline{a}_{\vec{k}}$ uděláme operátory

$$\varphi(\vec{x},t) \to \hat{\varphi}(\vec{x},t), \quad \pi(\vec{x},t) \to \hat{\pi}(\vec{x},t), \quad a_{\vec{k}} \to \hat{a}_{\vec{k}}, \quad \overline{a}_{\vec{k}} \to \hat{a}^\dagger_{\vec{k}},$$

postulujeme existenci a jednoznačnost vakuového stavu $|0\rangle$ a kanonické komutační relace ve stejném čase

$$[\hat{\varphi}(\vec{x},t), \hat{\pi}(\vec{x}',t)] = i\delta(\vec{x}-\vec{x}'), \quad [\hat{\varphi}(\vec{x},t), \hat{\varphi}(\vec{x}',t)] = 0, \quad [\hat{\pi}(\vec{x},t), \hat{\pi}(\vec{x}',t)] = 0. \tag{21.5}$$

Dále vyjádříme operátory $\hat{a}_{\vec{k}}$, $\hat{a}^\dagger_{\vec{k}}$ pomocí $\hat{\varphi}(\vec{x},t)$, $\hat{\pi}(\vec{x}',t)$, a ukážeme, že pro vhodnou volbu normalizace $N(\vec{k})$ budou splňovat komutační relace pro bosonové anihilační a kreační operátory se spojitými stupni volnosti (20.18). Fockův prostor pro Klein-Gordonovo pole pak zkonstruujeme podle postupu z kapitoly 20. Excitace Klein-Gordonova pole, tj. částice, které vytvoříme kreačními operátory z vakua, jsou bosony s nulovým spinem a bez náboje (pro komplexní Klein-Gordonovo pole bychom dostali nabité bosony se spinem nula a jejich antičástice s opačným nábojem).

Spočítáme nejprve následující integrál (označíme ve zkratce $\omega = \omega(\vec{k})$, $\omega' = \omega(\vec{k}')$; využijeme toho, že ω je sudá funkce)

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \quad e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}\hat{\varphi}(\vec{x},t) = \\
&\quad = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\mathbb{R}^3} d^3x\; e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}\int_{\mathbb{R}^3} d^3k'\; N(\vec{k}')\left(\hat{a}_{\vec{k}'}e^{i(\vec{k}'\cdot\vec{x}-\omega' t)} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}e^{-i(\vec{k}'\cdot\vec{x}-\omega' t)}\right) \\
&\quad = \int_{\mathbb{R}^3} d^3k'\; N(\vec{k}')\left(\hat{a}_{\vec{k}'}e^{it(\omega-\omega')}\underbrace{\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\mathbb{R}} e^{i\vec{x}\cdot(\vec{k}'-\vec{k})}}_{\delta(\vec{k}-\vec{k}')} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}e^{it(\omega+\omega')}\underbrace{\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\mathbb{R}} e^{-i\vec{x}\cdot(\vec{k}'+\vec{k})}}_{\delta(\vec{k}+\vec{k}')}\right) \\
&\quad = N(\vec{k})\hat{a}_{\vec{k}} + N(-\vec{k})\hat{a}^\dagger_{-\vec{k}}\; e^{2i\omega(\vec{k})t},
\end{aligned}$$

a analogickým postupem

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \quad e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}\hat{\pi}(\vec{x},t) = \\
&\quad = -\frac{i}{(2\pi)^3}\int_{\mathbb{R}^3} d^3x\; e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}\int_{\mathbb{R}^3} d^3k'\; N(\vec{k}')\omega'\left(\hat{a}_{\vec{k}'}e^{i(\vec{k}'\cdot\vec{x}-\omega' t)} - \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}e^{-i(\vec{k}'\cdot\vec{x}-\omega' t)}\right) \\
&\quad = -iN(\vec{k})\omega(\vec{k})\hat{a}_{\vec{k}} + iN(-\vec{k})\omega(\vec{k})\hat{a}^\dagger_{-\vec{k}}\; e^{2i\omega(\vec{k})t}.
\end{aligned}$$

Odsud dostaneme

$$
\begin{aligned}
\hat{a}_{\vec{k}} &= \frac{1}{2(2\pi)^3}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x\ e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega(\vec{k})t)}\frac{1}{N(\vec{k})}\left(\hat{\varphi}(\vec{x},t)+\frac{i}{\omega(\vec{k})}\hat{\pi}(\vec{x},t)\right), \\
\hat{a}^\dagger_{\vec{k}} &= \frac{1}{2(2\pi)^3}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x\ e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega(\vec{k})t)}\frac{1}{N(\vec{k})}\left(\hat{\varphi}(\vec{x},t)-\frac{i}{\omega(\vec{k})}\hat{\pi}(\vec{x},t)\right).
\end{aligned}
$$

Tyto vztahy dosadíme do komutátoru a použijeme kanonické komutační relace (21.5)

$$
\begin{aligned}
\left[\hat{a}_{\vec{k}},\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}\right] &= \frac{1}{4(2\pi)^6}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3y\ e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}e^{i(\vec{k}'\cdot\vec{y}-\omega' t)}\frac{1}{N(\vec{k})N(\vec{k}')}\times \\
&= \times\underbrace{\left[\hat{\varphi}(\vec{x},t)+\frac{i}{\omega}\hat{\pi}(\vec{x},t),\hat{\varphi}(\vec{y},t)-\frac{i}{\omega'}\hat{\pi}(\vec{y},t)\right]}_{\left(\frac{1}{\omega'}+\frac{1}{\omega}\right)\delta(\vec{x}-\vec{y})} \\
&= \frac{1}{4(2\pi)^6}\overbrace{\left(\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x\ e^{i\vec{x}\cdot(\vec{k}'-\vec{k})}\right)}^{(2\pi)^3\delta(\vec{k}-\vec{k}')} e^{it(\omega-\omega')}\left(\frac{1}{\omega'}+\frac{1}{\omega}\right)\frac{1}{N(\vec{k})N(\vec{k}')} \\
&= \frac{1}{2(2\pi)^3}\frac{1}{\omega(\vec{k})}\frac{1}{N(\vec{k})^2}\delta(\vec{k}-\vec{k}') \stackrel{!}{=} \delta(\vec{k}-\vec{k}').
\end{aligned}
$$

Bosonové komutační relace tedy dostaneme pro volbu normalizace

$$
N(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2(2\pi)^3\omega(\vec{k})}}. \tag{21.6}
$$

Celkem tedy pro operátory platí

$$
\begin{aligned}
\hat{a}_{\vec{k}} &= \frac{1}{\sqrt{2(2\pi)^3\omega(\vec{k})}}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x\ e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega(\vec{k})t)}\left(\omega(\vec{k})\hat{\varphi}(\vec{x},t)+i\hat{\pi}(\vec{x},t)\right), \\
\hat{a}^\dagger_{\vec{k}} &= \frac{1}{\sqrt{2(2\pi)^3\omega(\vec{k})}}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x\ e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega(\vec{k})t)}\left(\omega(\vec{k})\hat{\varphi}(\vec{x},t)-i\hat{\pi}(\vec{x},t)\right), \\
\hat{\varphi}(\vec{x},t) &= \frac{1}{\sqrt{2(2\pi)^3}}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k\ \frac{1}{\sqrt{\omega(\vec{k})}}\left(\hat{a}_{\vec{k}}e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega(\vec{k})t)}+\hat{a}^\dagger_{\vec{k}}e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega(\vec{k})t)}\right), \qquad (21.7) \\
\hat{\pi}(\vec{x},t) &= -\frac{i}{\sqrt{2(2\pi)^3}}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k\ \sqrt{\omega(\vec{k})}\left(\hat{a}_{\vec{k}}e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega(\vec{k})t)}-\hat{a}^\dagger_{\vec{k}}e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega(\vec{k})t)}\right). \qquad (21.8)
\end{aligned}
$$

Hamiltonián vyjádříme z hustoty (21.4), kam místo φ a π dosadíme operátory

$$\hat{H} = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x\ \mathscr{H} = \underbrace{\frac{1}{2}\int\limits_{\mathbb{R}^3} \hat{\pi}^2 d^3x}_{I_1} + \underbrace{\frac{1}{2}\int\limits_{\mathbb{R}^3} (\vec{\nabla}\hat{\varphi})\cdot(\vec{\nabla}\hat{\varphi}) d^3x}_{I_2} + \underbrace{\frac{1}{2}\int\limits_{\mathbb{R}^3} m^2\hat{\varphi}^2 d^3x}_{I_3}.$$

Za operátory $\hat{\phi}$ a $\hat{\pi}$ dosadíme z (21.7) a (21.8) a postupně vyjádříme jednotlivé členy

$$\begin{aligned}
I_1 &= -\frac{1}{4(2\pi)^3}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k'\ \sqrt{\omega\omega'}\left(\hat{a}_{\vec{k}} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)} - \hat{a}^\dagger_{\vec{k}} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}\right)\times \\
&\qquad\times\left(\hat{a}_{\vec{k}'} e^{i(\vec{k}'\cdot\vec{x}-\omega' t)} - \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'} e^{-i(\vec{k}'\cdot\vec{x}-\omega' t)}\right) \\
&= -\frac{1}{4(2\pi)^3}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k'\ \sqrt{\omega\omega'}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x\ \Big(\hat{a}_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}'} e^{i\vec{x}\cdot(\vec{k}+\vec{k}')} e^{-it(\omega+\omega')} - \\
&\quad -\hat{a}_{\vec{k}}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'} e^{i\vec{x}\cdot(\vec{k}-\vec{k}')} e^{it(\omega'-\omega)} - \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}'} e^{i\vec{x}\cdot(\vec{k}'-\vec{k})} e^{it(\omega-\omega')} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'} e^{-i\vec{x}\cdot(\vec{k}+\vec{k}')} e^{it(\omega+\omega')}\Big) \\
&= -\frac{1}{4}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k\ \omega\left(\hat{a}_{\vec{k}}\hat{a}_{-\vec{k}} e^{-2i\omega t} - \hat{a}_{\vec{k}}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}} - \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\hat{a}^\dagger_{-\vec{k}} e^{2i\omega t}\right),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_2 &= -\frac{1}{4(2\pi)^3}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k'\ \frac{\vec{k}\cdot\vec{k}'}{\sqrt{\omega\omega'}}\left(\hat{a}_{\vec{k}} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)} - \hat{a}^\dagger_{\vec{k}} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}\right)\times \\
&\qquad\times\left(\hat{a}_{\vec{k}'} e^{i(\vec{k}'\cdot\vec{x}-\omega' t)} - \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'} e^{-i(\vec{k}'\cdot\vec{x}-\omega' t)}\right) \\
&= \frac{1}{4}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k\ \frac{k^2}{\omega}\left(\hat{a}_{\vec{k}}\hat{a}_{-\vec{k}} e^{-2i\omega t} + \hat{a}_{\vec{k}}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\hat{a}^\dagger_{-\vec{k}} e^{2i\omega t}\right),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_3 &= \frac{m^2}{4(2\pi)^3}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k'\ \frac{1}{\sqrt{\omega\omega'}}\left(\hat{a}_{\vec{k}} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}\right)\times \\
&\qquad\times\left(\hat{a}_{\vec{k}'} e^{i(\vec{k}'\cdot\vec{x}-\omega' t)} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'} e^{-i(\vec{k}'\cdot\vec{x}-\omega' t)}\right) \\
&= \frac{1}{4}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k\ \frac{m^2}{\omega}\left(\hat{a}_{\vec{k}}\hat{a}_{-\vec{k}} e^{-2i\omega t} + \hat{a}_{\vec{k}}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\hat{a}^\dagger_{-\vec{k}} e^{2i\omega t}\right).
\end{aligned}$$

V součtu bude u členů, kde jsou dva anihilační nebo dva kreační operátory výraz $\frac{1}{\omega}(-\omega^2 + k^2 + m^2) = 0$, naopak u smíšených členů bude $\frac{1}{\omega}(\omega^2 + k^2 + m^2) = 2\omega$. Hamiltonián Klein-Gordonova pole tedy dostaneme ve tvaru

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k\ \omega(\vec{k})\left(\hat{a}_{\vec{k}}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}}\right).$$

Pro další úpravy nejprve uvažujme Klein-Gordonovo pole v krychli o délce hrany L, tj. konečném objemu $V = L^3$. V takovém případě musíme pro Klein-Gordonovu rovnici (21.2) vzít v úvahu periodické okrajové podmínky na stěnách krychle. Důsledkem je diskretizace módů, resp. vlnových vektorů $\vec{k}$, jejichž složky musí splňovat

$$k_j = \frac{2\pi}{L} n_j, \quad n_j \in \mathbb{Z}.$$

Veškerá odvození jsou stejná jako v případě pole v $\mathbb{R}^3$, jen je potřeba nahradit integrál sumou

$$\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k \longrightarrow \sum_{\vec{k}},$$

a v normalizačním faktoru (21.6) bude místo $(2\pi)^3$ objem krychle V. Z kanonických komutačních relací ve stejném čase (21.5) dostaneme bosonové komutační relace pro diskrétní módy

$$\left[\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}\right] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}.$$

Hamiltonián Klein-Gordonova pole pak s použitím komutačních relací upravíme do tvaru

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) \left(\hat{a}_{\vec{k}}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}}\right) = \sum_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) \left(\hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}} + \frac{1}{2}\right). \tag{21.9}$$

Pro takovýto hamiltonián by i vakuový stav měl nekonečnou energii, protože

$$\hat{H}|0\rangle = \left(\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \omega(\vec{k})\right) |0\rangle,$$

a řada je divergentní. Tento problém se vyřeší procedurou zvanou renormalizace - v našem případě v sumě (21.9) zahodíme člen $\frac{1}{2}$. Intuitivně lze argumentovat tak, že energie částic, které naměříme, jsou rozdíl energií nějakého Fockovského stavu a vakuového stavu, a tento rozdíl je konečný. Hamiltonián Klein-Gordonova pole pak dostaneme v tzv. normálním uspořádání (anihilační operátory jsou vpravo, značí se dvojtečkami okolo operátoru)

$$\hat{H} \longrightarrow :\hat{H}:= \sum_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}}.$$

V nekonečném objemu pak hamiltonián přejde v

$$:\hat{H}:= \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k \; \omega(\vec{k}) \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}}$$

Kvantování elektromagnetického pole

Podobným postupem provedeme kvantování volného elektromagnetického pole, které je popsané čtyřpotenciálem $A_\mu = (\frac{\varphi}{c}, -\vec{A})$ (pracujeme v SI jednotkách) a Lagrangeovskou hustotou

$$\mathscr{L} = -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu},$$

kde $F_{\mu\nu}$ je tenzor elektromagnetického pole

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu.$$

Komplikaci představuje kalibrační invariance, ze které plyne, že ne všechny složky čtyřpotenciálu jsou nezávislé. My zvolíme fixní Coulombovu kalibraci, ve které je postup nejjednodušší. Tato volba není vhodná pro relativistickou kvantovou elektrodynamiku, protože Coulombova kalibrace není Lorentzovsky invariatní. Pro náš cíl, kterým je kvantový popis interakce atomů s elektromagnetickým zářením, je ale dostačující.

Euler-Lagrangeovy rovnice pro pole A_μ jsou

$$\partial_\mu \partial^\mu A_\nu - \partial_\nu \left(\partial^\mu A_\mu\right) = 0.$$

Pro Coulombovu kalibraci

$$\varphi = 0, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0,$$

se zjednoduší na

$$\Box A_\nu = 0, \quad \text{resp.} \quad \Box \vec{A} = 0. \tag{21.10}$$

Rovnice má nekonečně mnoho řešení tvaru polarizovaných rovinných vln

$$\vec{A}_{\vec{k},\vec{\varepsilon}}(\vec{x}, t) = \vec{\varepsilon} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega(\vec{k})t)},$$

kde frekvence je rovna

$$\omega(\vec{k}) = kc, \quad k = |\vec{k}|.$$

Z kalibrační podmínky pro vektor polarizace $\vec{\varepsilon}$ plyne

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \Longrightarrow \vec{k} \cdot \vec{\varepsilon} = 0.$$

Vektor polarizace tedy musí být kolmý na směr šíření vlny, tj. pro každý vlnový vektor můžeme zvolit dvě ortogonální polarizace $\vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda)$, $\lambda = 1, 2$ splňující

$$\vec{k} \cdot \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) = 0, \quad \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda') = \delta_{\lambda\lambda'}.$$

Obecné (reálné) řešení v podobě kombinace rovinných vln se dvěma možnými polarizacemi, včetně správného normalizačního faktoru, má tvar

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \sum_{\lambda=1}^{2} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\vec{k})\varepsilon_0}} \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \left(a_{\vec{k},\lambda} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega(\vec{k})t)} + \overline{a_{\vec{k},\lambda}} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \right). \tag{21.11}$$

Obecné hybnosti jsou až na konstantní faktor složky elektrické intenzity (využili jsme vztahu $\frac{1}{\mu_0\varepsilon_0} = c^2$)

$$\pi_j = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial A_{j,t}} = \frac{1}{c}\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial A_{j,0}} = \frac{1}{c\mu_0}(A_{j,0} - \underbrace{A_{0,j}}_{0}) = -\frac{1}{\mu_0 c^2}\frac{\partial A^j}{\partial t} = \varepsilon_0 E^j.$$

Po dosazení z (21.11) nalezneme

$$\vec{\pi}(\vec{x},t) = i\sum_{\lambda=1}^{2}\int\limits_{\mathbb{R}^3}\frac{d^3k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{\hbar\varepsilon_0\omega(\vec{k})}{2}}\vec{\varepsilon}(\vec{k},\lambda)\left(\overline{a_{\vec{k},\lambda}}e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega(\vec{k})t)} - a_{\vec{k},\lambda}e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega(\vec{k})t)}\right). \tag{21.12}$$

Hustota hamiltoniánu elektromagnetického pole je ($B_k = \varepsilon_{kij}A_{i,j}$)

$$\begin{aligned}
\mathscr{H} &= \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial A_{j,0}}A_{j,0} - \mathscr{L} = c\pi_j A_{j,0} - \frac{1}{4\mu_0}(A_{\nu,\mu} - A_{\mu,\nu})(A^{\nu,\mu} - A^{\mu,\nu}) \\
&= \frac{1}{\varepsilon_0}\pi^2 - \frac{1}{2\mu_0}A_{i,0}A_{i,0} + \frac{1}{4\mu_0}(A_{i,j} - A_{j,i})(A_{i,j} - A_{j,i}) \\
&= \frac{1}{2\varepsilon_0}\pi^2 + \frac{1}{2\mu_0}(A_{i,j}A_{i,j} - A_{i,j}A_{j,i}) = \frac{\varepsilon_0}{2}E^2 + \frac{1}{2\mu_0}B^2.
\end{aligned}$$

Spočítejme nejprve hamiltonián klasického pole, ten dostaneme integrací hustoty přes prostorové souřadnice

$$H = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x\mathscr{H} = \underbrace{\frac{1}{2\varepsilon_0}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x\ \pi^2}_{I_1} + \underbrace{\frac{1}{2\mu_0}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x\ (A_{i,j}A_{i,j} - A_{i,j}A_{j,i})}_{I_2}.$$

Dosadíme za $\vec{A}$ a $\vec{\pi}$ ze vztahů (21.11), (21.12) a postupně upravíme jednotlivé členy (pro zkrácení zápisu označíme $\omega = \omega(\vec{k})$, $\omega' = \omega(\vec{k}')$, $\vec{\varepsilon} = \vec{\varepsilon}(\vec{k},\lambda)$, $\vec{\varepsilon}' = \vec{\varepsilon}(\vec{k}',\lambda')$)

$$\begin{aligned}
I_1 &= -\frac{\hbar}{4}\sum_{\lambda,\lambda'=1}^{2}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x\int\limits_{\mathbb{R}^3}\frac{d^3k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int\limits_{\mathbb{R}^3}\frac{d^3k'}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\sqrt{\omega\omega'}\vec{\varepsilon}\cdot\vec{\varepsilon}'\left(\overline{a_{\vec{k},\lambda}}e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)} - a_{\vec{k},\lambda}e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}\right) \\
&\qquad\times\left(\overline{a_{\vec{k}',\lambda'}}e^{-i(\vec{k}'\cdot\vec{x}-\omega' t)} - a_{\vec{k}',\lambda'}e^{i(\vec{k}'\cdot\vec{x}-\omega' t)}\right) \\
&= -\frac{\hbar}{4}\sum_{\lambda,\lambda'=1}^{2}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x\int\limits_{\mathbb{R}^3}\frac{d^3k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int\limits_{\mathbb{R}^3}\frac{d^3k'}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\sqrt{\omega\omega'}\vec{\varepsilon}\cdot\vec{\varepsilon}'\left(\overline{a_{\vec{k},\lambda}}\ \overline{a_{\vec{k}',\lambda'}}e^{-i\vec{x}\cdot(\vec{k}+\vec{k}')}e^{it(\omega+\omega')} -\right. \\
&\left. -\overline{a_{\vec{k},\lambda}}a_{\vec{k}',\lambda'}e^{-i\vec{x}\cdot(\vec{k}-\vec{k}')}e^{it(\omega-\omega')} - a_{\vec{k},\lambda}\overline{a_{\vec{k}',\lambda'}}e^{i\vec{x}\cdot(\vec{k}-\vec{k}')}e^{-it(\omega-\omega')} + a_{\vec{k},\lambda}a_{\vec{k}',\lambda'}e^{i\vec{x}\cdot(\vec{k}+\vec{k}')}e^{-it(\omega+\omega')}\right) \\
&= -\frac{\hbar}{4}\sum_{\lambda=1}^{2}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k\ \omega\left(\overline{a_{\vec{k},\lambda}}\ \overline{a_{-\vec{k},\lambda}}e^{2i\omega t} - \overline{a_{\vec{k},\lambda}}a_{\vec{k},\lambda} - a_{\vec{k},\lambda}\overline{a_{\vec{k},\lambda}} + a_{\vec{k},\lambda}a_{-\vec{k},\lambda}e^{-2i\omega t}\right),
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
I_2 &= -\frac{\hbar}{4\mu_0\varepsilon_0}\sum_{\lambda,\lambda'=1}^{2}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x \int\limits_{\mathbb{R}^3}\frac{d^3k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int\limits_{\mathbb{R}^3}\frac{d^3k'}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\frac{1}{\sqrt{\omega\omega'}}\left(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{\varepsilon}'\vec{k}\cdot\vec{k}'-\vec{\varepsilon}\cdot\vec{k}'\vec{k}\cdot\vec{\varepsilon}'\right)\times\\
&\quad\times\left(a_{\vec{k},\lambda}e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}-\overline{a_{\vec{k},\lambda}}e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}\right)\left(a_{\vec{k}',\lambda'}e^{i(\vec{k}'\cdot\vec{x}-\omega' t)}-\overline{a_{\vec{k}',\lambda'}}e^{-i(\vec{k}'\cdot\vec{x}-\omega' t)}\right)\\
&= \frac{\hbar}{4}\sum_{\lambda,\lambda=1}^{2}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k\;\frac{k^2c^2}{\omega}\left(a_{\vec{k},\lambda}a_{-\vec{k},\lambda}e^{-2i\omega t}+a_{\vec{k},\lambda}\overline{a_{\vec{k},\lambda}}+\overline{a_{\vec{k},\lambda}}a_{\vec{k},\lambda}+\overline{a_{\vec{k},\lambda}}\;\overline{a_{-\vec{k},\lambda}}e^{2i\omega t}\right).
\end{aligned}
$$

V součtu bude u členů s $a_{\vec{k},\lambda}\, a_{-\vec{k},\lambda}$ nebo $\overline{a_{\vec{k},\lambda}}\;\overline{a_{-\vec{k},\lambda}}$ výraz $\frac{1}{\omega}(\omega^2-k^2c^2)=0$, u smíšených členů pak $\frac{1}{\omega}(\omega^2+k^2c^2)=2\omega$. Hamiltonián klasického elektromagnetického pole tak vyjádříme ve tvaru

$$
H=\frac{1}{2}\sum_{\lambda=1}^{2}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k\;\hbar\omega(\vec{k})\left(a_{\vec{k},\lambda}\overline{a_{\vec{k},\lambda}}+\overline{a_{\vec{k},\lambda}}a_{\vec{k},\lambda}\right).
$$

Jak uvidíme, komutační relace pro operátory pole $\hat{\vec{A}}(\vec{x},t)$ a hybností $\hat{\vec{\pi}}(\vec{x}',t)$ ve stejném čase budou mít složitější podobu než pro Klein-Gordonovo pole (21.5). Kvantování elektromagnetického pole tak provedeme přímo přechodem ke kreačním a anihilační operátorům

$$
a_{\vec{k},\lambda}\to\hat{a}_{\vec{k},\lambda},\quad \overline{a_{\vec{k},\lambda}}\to\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},\lambda},
$$

a postulujeme pro ně bosonové komutační relace

$$
\left[\hat{a}_{\vec{k},\lambda},\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k}',\lambda'}\right]=\delta_{\lambda\lambda'}\delta(\vec{k}-\vec{k}'),\quad \left[\hat{a}_{\vec{k},\lambda},\hat{a}_{\vec{k}',\lambda'}\right]=\left[\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},\lambda},\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k}',\lambda'}\right]=0. \tag{21.13}
$$

Dále postulujeme existenci a jednoznačnost vakuového stavu $|0\rangle$. Kreačním operátorem $\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},\lambda}$ z vakuového stavu vytvoříme foton s vlnovým vektorem $\vec{k}$ a polarizací λ. Hamiltonián kvantovaného elektromagnetického pole v dutině zavedeme v normálním uspořádání

$$
:\hat{H}:=\sum_{\lambda=1}^{2}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k\;\hbar\omega(\vec{k})\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},\lambda}\hat{a}_{\vec{k},\lambda}. \tag{21.14}
$$

Spočítejme nyní komutátor polí a hybností ve stejném čase. Ve vztazích (21.11) a (21.12) nahradíme $a_{\vec{k},\lambda}$ a $\overline{a_{\vec{k},\lambda}}$ operátory a s použitím komutačních relací (21.13) dostaneme

$$
\begin{aligned}
\left[\hat{A}_i(\vec{x},t),\hat{\pi}_j(\vec{x}',t)\right] &= -i\frac{\hbar}{2}\sum_{\lambda,\lambda'=1}^{2}\int\limits_{\mathbb{R}^3}\frac{d^3k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int\limits_{\mathbb{R}^3}\frac{d^3k'}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{\omega'}{\omega}}\varepsilon_i\varepsilon'_j\times\\
&\quad\times\left[\hat{a}_{\vec{k},\lambda}e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}+\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},\lambda}e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)},\hat{a}_{\vec{k}',\lambda'}e^{i(\vec{k}'\cdot\vec{x}'-\omega' t)}+\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k}',\lambda'}e^{-i(\vec{k}'\cdot\vec{x}'-\omega' t)}\right]\\
&= i\frac{\hbar}{2}\int\limits_{\mathbb{R}^3}\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\underbrace{\sum_{\lambda=1}^{2}\varepsilon_i(\vec{k},\lambda)\varepsilon_j(\vec{k},\lambda)}_{P_{ij}(\vec{k})}\left(e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}+e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\right).
\end{aligned} \tag{21.15}
$$

Výraz $\varepsilon_i(\vec{k},\lambda)\varepsilon_j(\vec{k},\lambda)$ představuje (i,j)-tý prvek matice ortogonálního projektoru na vektor $\vec{\varepsilon}(\vec{k},\lambda)$. Pokud dva jednotkové vektory určující polarizaci doplníme třetím jednotkovým vektorem ve směru $\vec{k}$

$$\vec{\varepsilon}(\vec{k},3) = \frac{\vec{k}}{k},$$

pak tyto tři vektory tvoří ON bázi $\mathbb{R}^3$ a platí

$$\sum_{\lambda=1}^{3} \varepsilon_i(\vec{k},\lambda)\varepsilon_j(\vec{k},\lambda) = \delta_{ij}.$$

Pro $P_{ij}(\vec{k})$ pak dostaneme

$$P_{ij}(\vec{k}) = \delta_{ij} - \varepsilon_i(\vec{k},3)\varepsilon_j(\vec{k},3) = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}.$$

Je to sudá funkce, takže integrál v (21.15) můžeme přepsat do tvaru

$$\left[\hat{A}_i(\vec{x},t),\hat{\pi}_j(\vec{x}',t)\right] = i\hbar \int\limits_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} P_{ij}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')} = i\hbar\delta^T_{ij}(\vec{x}-\vec{x}')$$

kde $\delta^T_{ij}(\vec{x}-\vec{x}')$ značí transverzální δ-funkci

$$\delta^T_{ij}(\vec{x}-\vec{x}') = \delta_{ij}\delta(\vec{x}-\vec{x}') + \frac{1}{4\pi}\partial_i\partial_j \frac{1}{|\vec{x}-\vec{x}'|}.$$

Na závěr ještě uvedeme výsledky pro kvantování elektromagnetického pole v konečné krychli o hraně délky L. Pro vlnovou rovnici (21.10) musíme uvažovat periodické okrajové podmínky, jejich důsledkem je diskretizace módů, tj.

$$k_j = \frac{2\pi}{L} n_j, \quad n_j \in \mathbb{Z}.$$

Ve vztazích (21.11) a (21.14) musíme nahradit integrál přes vlnový vektor sumou přes diskrétní módy a v normalizačním faktoru bude místo $(2\pi)^3$ objem krychle V. Operátor vektorového potenciálu kvantovaného elektromagnetického pole v krychli je tedy

$$\hat{\vec{A}}(\vec{x},t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\lambda=1}^{2} \sum_{\vec{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\vec{k})\varepsilon_0}} \vec{\varepsilon}(\vec{k},\lambda) \left(\hat{a}_{\vec{k},\lambda} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega(\vec{k})t)} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k},\lambda} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega(\vec{k})t)} \right). \tag{21.16}$$

Hamiltonián pole je roven

$$:\hat{H}:= \sum_{\lambda=1}^{2} \sum_{\vec{k}} \hbar\omega(\vec{k}) \hat{a}^\dagger_{\vec{k},\lambda} \hat{a}_{\vec{k},\lambda}, \tag{21.17}$$

a pro kreační a anihilační operátory platí komutační relace

$$\left[\hat{a}_{\vec{k},\lambda}, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}',\lambda'}\right] = \delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\vec{k},\vec{k}'}, \quad \left[\hat{a}_{\vec{k},\lambda}, \hat{a}_{\vec{k}',\lambda'}\right] = \left[\hat{a}^\dagger_{\vec{k},\lambda}, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}',\lambda'}\right] = 0.$$