

# Amoniakový maser

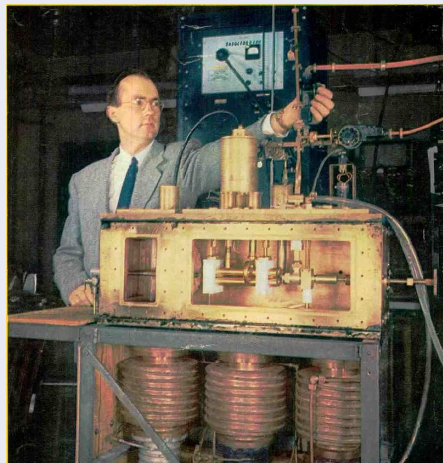
Martin Štefaňák

16. dubna 2021

## MASER — **M**icrovawe **A**mplificatin by **S**timulated **E**mission of **R**adiation

- Townes, Gordon a Zeiger (1953)
- Kvantový generátor mikrovlnného záření
- Využívá stimulovanou emisi
- Molekula amoniaku vstupuje do rezonanční dutiny v excitovaném stavu
- Pole v dutině stimuluje přeskok z excitované hladiny na základní hladinu
- Molekula vyzáří foton do dutiny
- Dojde ke koherentnímu zesílení pole v dutině
- Zesílené záření má skvělou fázovou stabilitu
- Využití v atomových hodinách, zesilovače s nízkým šumem v radioteleskopech

Townes a prototyp maseru

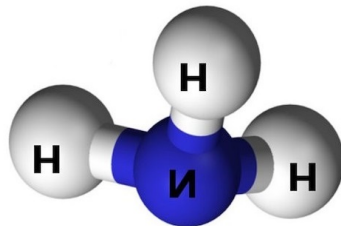
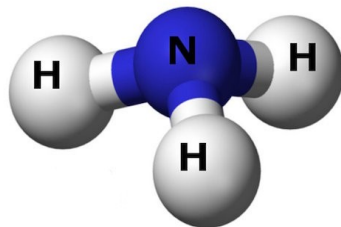


# Molekula amoniaku jako dvouhladinový systém

- Molekula amoniaku —  $\text{NH}_3$
- Má řadu stupňů volnosti — translační, rotační, vibrační, elektronové hladiny ...
- Pro základní pochopení principu maseru stačí uvažovat dva kvantové stavy
- Dusík je nad rovinou atomů vodíku —  $|\uparrow\rangle$
- Dusík je pod rovinou atomů vodíku —  $|\downarrow\rangle$

$$\mathcal{H} = [|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle]_{\lambda} \simeq \mathbb{C}^2, \quad \langle \uparrow | \downarrow \rangle = 0$$

## Struktura molekuly $\text{NH}_3$

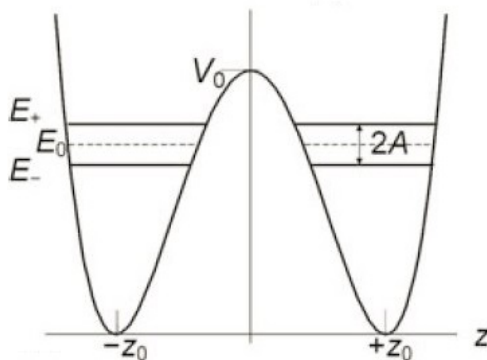


# Bazické stavy molekuly amoniaku

- Atomy vodíku a elektrony vytváří potenciálovou bariéru
- Klasicky dusík bariérou projít nemůže
- Stavy jsou z klasického pohledu ekvivalentní, odpovídají energiím  $E_0 = 0$  (BÚNO volba)
- Bariéra má konečnou výšku a šířku
- Podle QM může dusík bariérou protunelovat
- Stavy  $|\uparrow\rangle$  a  $|\downarrow\rangle$  nejsou stacionární
- Hamiltonián není v této bázi diagonální
- Označíme amplitudy průniku bariérou

$$\langle \downarrow | \hat{H}_0 | \uparrow \rangle = \overline{\langle \uparrow | \hat{H}_0 | \downarrow \rangle} = -\Delta \neq 0$$

## Potenciálová bariéra



# Hamiltonián volného amoniaku

- Matice hamiltoniánu molekuly amoniaku ve standardní bázi  $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$

$$H_0 = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta \\ -\Delta & 0 \end{pmatrix} = -\Delta\sigma_1$$

- Vlastní čísla —  $E_g = -\Delta$ ,  $E_e = \Delta$
- Vlastní vektory — základní stav  $|g\rangle$  a excitovaný stav  $|e\rangle$

$$|g\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |e\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

- Experimentální hodnota rozdílu energií

$$\Delta E = E_e - E_g = 2\Delta \approx 10^{-4} \text{ eV}$$

- Přechod z  $|e\rangle$  do  $|g\rangle$  — vyzáří se foton s touto energií

$$\nu = \frac{2\Delta}{h} \approx 24 \text{ GHz}, \quad \lambda \approx 1.15 \text{ cm}$$

# Časový vývoj volné molekuly amoniaku

- Uvažujme počáteční podmínku  $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle$  v čase  $t_0 = 0$
- Rozklad do báze vlastních vektorů  $\hat{H}_0$

$$|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|g\rangle + |e\rangle), \quad |\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|g\rangle - |e\rangle)$$

- Stav molekuly v čase  $t > 0$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( e^{i\frac{\Delta t}{\hbar}} |g\rangle + e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}} |e\rangle \right) = \cos\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) |\uparrow\rangle + i \sin\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) |\downarrow\rangle$$

- Pravděpodobnosti nalezení dusíku nahoře/dole se harmonicky mění

$$P_{\uparrow}(t) = |\langle\uparrow|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^2\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right), \quad P_{\downarrow}(t) = |\langle\downarrow|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right)$$

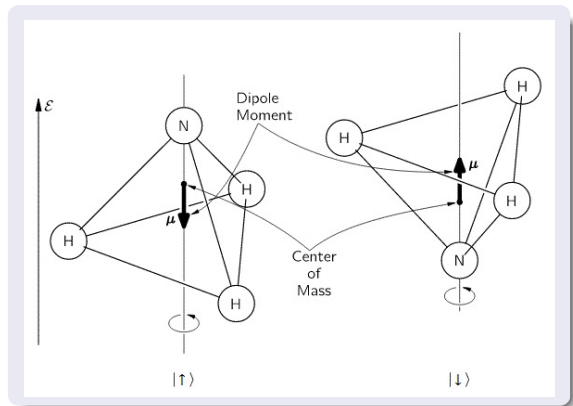
Analogické precesi spinu v homogenním magnetickém poli

# Molekula amoniaku v homogenním elektrickém poli

- Elektrony jsou blíže dusíku
- Molekula má dipólový moment  $\vec{d}$
- $\vec{d}$  míří z těžiště směrem k rovině tvořené vodíky
- Energie dipólu v elektrickém poli

$$E = -\vec{d} \cdot \vec{\mathcal{E}}$$

- Uvažujme elektrické pole  $\vec{\mathcal{E}} = (0, 0, \mathcal{E})$
- Vodíky jsou v rovině  $xy$
- Ve stavu  $|\uparrow\rangle$  se energie zvýší o  $d\mathcal{E}$
- Ve stavu  $|\downarrow\rangle$  se energie sníží o  $d\mathcal{E}$



# Molekula amoniaku v homogenním elektrickém poli

- Hamiltonián molekuly amoniaku v elektrickém poli

$$H = H_0 + d\mathcal{E}\sigma_3 = -\Delta\sigma_1 + d\mathcal{E}\sigma_3 = \begin{pmatrix} d\mathcal{E} & -\Delta \\ -\Delta & -d\mathcal{E} \end{pmatrix}$$

- Vlastní hodnoty energie

$$E_g(\mathcal{E}) = -\sqrt{d^2\mathcal{E}^2 + \Delta^2}$$

$$E_e(\mathcal{E}) = \sqrt{d^2\mathcal{E}^2 + \Delta^2}$$

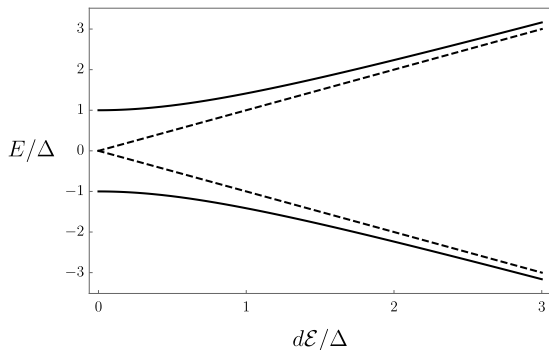
- Slabé pole — kvadratická závislost

$$E_g(\mathcal{E}) \simeq -\Delta - \frac{d^2\mathcal{E}^2}{2\Delta}, \quad E_e(\mathcal{E}) \simeq \Delta + \frac{d^2\mathcal{E}^2}{2\Delta}$$

- Silné pole — lineární závislost

$$E_g(\mathcal{E}) \simeq -d\mathcal{E}, \quad E_e(\mathcal{E}) \simeq d\mathcal{E}$$

## Energie NH<sub>3</sub> v elektrickém poli





# Molekula amoniaku v homogenním elektrickém poli

- Vlastní stavy  $\hat{H}$  závisí na intenzitě elektrického pole  $\mathcal{E}$

$$|g(\mathcal{E})\rangle = \mathcal{N}_g \left( \Delta |\uparrow\rangle + (d\mathcal{E} + \sqrt{d^2\mathcal{E}^2 + \Delta^2}) |\downarrow\rangle \right), \quad |e(\mathcal{E})\rangle = \mathcal{N}_e \left( \Delta |\uparrow\rangle + (d\mathcal{E} - \sqrt{d^2\mathcal{E}^2 + \Delta^2}) |\downarrow\rangle \right)$$

- Normalizace stavů

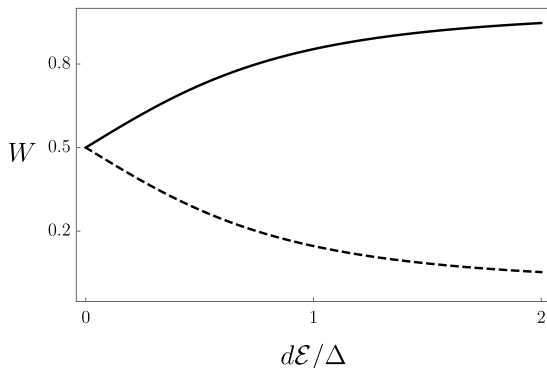
$$\mathcal{N}_{g/e} = \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + (d\mathcal{E} \pm \sqrt{d^2\mathcal{E}^2 + \Delta^2})^2}}$$

- Pravděpodobnost nalezení dusíku nahoře/dole

$$W_{e,\uparrow} = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{d\mathcal{E}}{\sqrt{d^2\mathcal{E}^2 + \Delta^2}} \right) = W_{g,\downarrow}$$

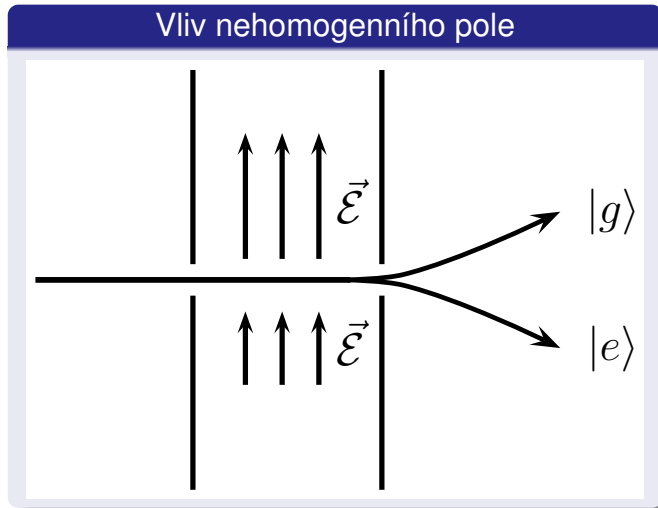
$$W_{e,\downarrow} = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{d\mathcal{E}}{\sqrt{d^2\mathcal{E}^2 + \Delta^2}} \right) = W_{g,\uparrow}$$

## Nalezení $|\uparrow\rangle/|\downarrow\rangle$ v excitovaném stavu



## Analogie Stern-Gerlachova přístroje

- Nehomogenní elektrické pole lze použít k oddělení molekul v základním a excitovaném stavu
- Molekuly v základním stavu jsou urychleny ve směru gradientu pole
- Molekuly v excitovaném stavu jsou urychleny proti směru gradientu pole
- Zablokováním horního proudu dostaneme filtr propouštějící molekuly v excitovaném stavu
- Filtr využijeme jako zdroj energie pro maser



# Populační inverze

- V praxi nelze odfiltrovat všechny molekuly v základním stavu
- Navíc, molekuly mohou spontánně vyzářit foton a přejít do základního stavu
- Stačí, že s velkou pravděpodobností je molekula v excitovaném stavu
- Populační inverze — stav s větší energií je pravděpodobnější než stav s menší energií —  $W_e > W_g$
- Z pohledu statistické fyziky taková situace odpovídá záporné termodynamické teplotě
- Termodynamická rovnováha — Gibbsovo rozdělení

$$W_e = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_e}{kT}\right), \quad W_g = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) = \frac{1}{Z} \exp\left(\frac{E_e}{kT}\right), \quad E_e > 0, \quad E_g < 0$$

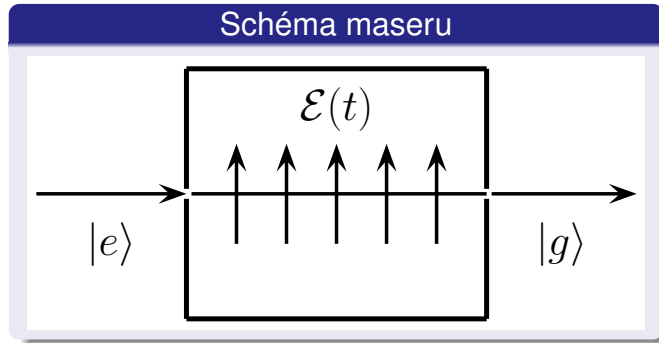
- Pro všechny  $T \in (0, +\infty)$  je  $W_g > W_e$

$$W_e > W_g \iff T < 0$$

- Záporná absolutní teplota je "větší než  $T = +\infty$ ", správnější parametr je  $\beta = \frac{1}{kT}$

# Amoniakový maser

- Filtrem připravíme proud molekul v excitovaném stavu — dosáhneme populační inverze
- Molekuly vstoupí do rezonantní dutiny — základní mód EM pole v dutině má stejnou frekvenci  $\omega$  jako přechod  $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$
- Doba průletu dutinou zvolena tak, aby molekuly vylétly s velkou pravděpodobností v základním stavu
- Molekula v dutině vyzáří foton s energií  $2\Delta$
- Dojde k zesílení pole v dutině



# Amoniakový maser

- Slabé rezonanční časově závislé elektrické pole v dutině

$$\mathcal{E}(t) = 2\mathcal{E}_0 \cos(\omega t) = \mathcal{E}_0(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \quad \omega = 2\pi\nu = \frac{2\Delta}{\hbar}$$

- Hamiltonián molekuly v dutině — závislý na čase

$$H(t) = H_0 + d\mathcal{E}(t)\sigma_3 = \begin{pmatrix} d\mathcal{E}(t) & -\Delta \\ -\Delta & -d\mathcal{E}(t) \end{pmatrix} \quad (\text{matice ve standardní bázi } \{| \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle\})$$

- Vlastní vektory  $H(t)$  závisí parametricky na čase — nejsou to stacionární stavy
- Časová Schrödingerova rovnice

$$\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle, \quad |\psi(0)\rangle = |e\rangle$$

Najít  $T$  tak, aby  $|\psi(T)\rangle \approx |g\rangle$

## Změna báze $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\} \rightarrow \{|e\rangle, |g\rangle\}$

- Vyjádříme vše v bázi vlastních stavů  $\hat{H}_0$  (volné molekuly amoniaku)  $\{|e\rangle, |g\rangle\}$

$$|g\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle), \quad |e\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$$

- Maticové elementy celkového hamiltoniánu v bázi  $\{|e\rangle, |g\rangle\}$

$$\langle e|\hat{H}(t)|e\rangle = \frac{1}{2} \left( \langle\uparrow|\hat{H}(t)|\uparrow\rangle - \langle\uparrow|\hat{H}(t)|\downarrow\rangle - \langle\downarrow|\hat{H}(t)|\uparrow\rangle + \langle\downarrow|\hat{H}(t)|\downarrow\rangle \right) = \Delta$$

$$\langle g|\hat{H}(t)|g\rangle = \frac{1}{2} \left( \langle\uparrow|\hat{H}(t)|\uparrow\rangle + \langle\uparrow|\hat{H}(t)|\downarrow\rangle + \langle\downarrow|\hat{H}(t)|\uparrow\rangle + \langle\downarrow|\hat{H}(t)|\downarrow\rangle \right) = -\Delta$$

$$\langle e|\hat{H}(t)|g\rangle = \frac{1}{2} \left( \langle\uparrow|\hat{H}(t)|\uparrow\rangle + \langle\uparrow|\hat{H}(t)|\downarrow\rangle - \langle\downarrow|\hat{H}(t)|\uparrow\rangle - \langle\downarrow|\hat{H}(t)|\downarrow\rangle \right) = d\mathcal{E}(t) = \langle g|\hat{H}(t)|e\rangle$$

# Časová Schrödingerova rovnice v nové bázi

- Matice  $H(t)$  v bázi  $\{|e\rangle, |g\rangle\}$

$$H(t) = \begin{pmatrix} \Delta & d\mathcal{E}(t) \\ d\mathcal{E}(t) & -\Delta \end{pmatrix}$$

- Stavový vektor  $|\psi(t)\rangle$  v této bázi —  $\psi(t)$

$$\psi(t) = (C_e(t), C_g(t))^T$$

- Časová Schrödingerova rovnice v maticovém tvaru

$$\begin{pmatrix} \Delta & d\mathcal{E}(t) \\ d\mathcal{E}(t) & -\Delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_e(t) \\ C_g(t) \end{pmatrix} = i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} C_e(t) \\ C_g(t) \end{pmatrix}$$

# Řešení časové Schrödingerovy rovnice

- Bez přítomnosti pole v dutině ( $\mathcal{E}_0 = 0 \implies \mathcal{E}(t) \equiv 0$ ) —  $H \neq H(t)$ , řešení je snadné

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} C_e(t) \\ C_g(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\Delta}{\hbar}t} D_e \\ e^{i\frac{\Delta}{\hbar}t} D_g \end{pmatrix}, \quad D_{e/g} \text{ jsou počáteční podmínky}$$

- Nenulové pole v dutině — hledáme řešení ve stejném tvaru, ale  $D_{e/g}(t)$
- Po dosazení do Schrödingerovy rovnice nalezneme

$$\Delta e^{-i\frac{\Delta}{\hbar}t} D_e(t) + d\mathcal{E}(t) e^{i\frac{\Delta}{\hbar}t} D_g(t) = i\hbar \frac{d}{dt} \left( e^{-i\frac{\Delta}{\hbar}t} D_e(t) \right)$$

$$d\mathcal{E}(t) e^{-i\frac{\Delta}{\hbar}t} D_e(t) - \Delta e^{i\frac{\Delta}{\hbar}t} D_g(t) = i\hbar \frac{d}{dt} \left( e^{i\frac{\Delta}{\hbar}t} D_g(t) \right)$$

- Připomeňme tvar elektrického pole

$$\mathcal{E}(t) = 2\mathcal{E}_0 \cos(\omega t) = \mathcal{E}_0 (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \quad \omega = \frac{2\Delta}{\hbar}$$



# Řešení časové Schrödingerovy rovnice

- Diferenciální rovnice pro  $D_e(t)$  a  $D_g(t)$

$$i\hbar\dot{D}_e(t) = d\mathcal{E}(t)e^{i\omega t}D_g(t) = d\mathcal{E}_0(1 + e^{2i\omega t})D_g(t)$$

$$i\hbar\dot{D}_g(t) = d\mathcal{E}(t)e^{-i\omega t}D_e(t) = d\mathcal{E}_0(1 + e^{-2i\omega t})D_e(t)$$

- Přiblížení —  $d\mathcal{E}_0 \ll \Delta$  —  $D_e(t)$  a  $D_g(t)$  se mění velmi pomalu v porovnání s  $e^{\pm 2i\omega t}$
- V rovnicích zanedbáme členy  $e^{\pm 2i\omega t}$
- Výsledné přibližné rovnice

$$i\hbar\dot{D}_e(t) = d\mathcal{E}_0D_g(t), \quad i\hbar\dot{D}_g(t) = d\mathcal{E}_0D_e(t)$$

# Řešení přibližných rovnic

- První rovnici zderivujeme podle času a dosadíme ze druhé

$$\ddot{D}_e(t) = - \left( \frac{d\varepsilon_0}{\hbar} \right)^2 D_e(t)$$

- Obecné řešení je lineární kombinace  $\cos\left(\frac{d\varepsilon_0}{\hbar}t\right)$  a  $\sin\left(\frac{d\varepsilon_0}{\hbar}t\right)$
- Počáteční podmínka —  $D_e(0) = 1$ ,  $D_g(0) = 0$
- Řešení s touto počáteční podmínkou

$$D_e(t) = \cos\left(\frac{d\varepsilon_0}{\hbar}t\right), \quad D_g(t) = -i \sin\left(\frac{d\varepsilon_0}{\hbar}t\right)$$

- Pravděpodobnost nalezení molekuly v excitovaném nebo základním stavu po čase  $t$

$$W_e(t) = |D_e(t)|^2 = \cos^2\left(\frac{d\varepsilon_0}{\hbar}t\right), \quad W_g(t) = |D_g(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{d\varepsilon_0}{\hbar}t\right)$$

# Oscilace mezi excitovaným a základním stavem

- Pravděpodobnost nalezení molekuly v excitovaném nebo základním stavu po čase  $t$

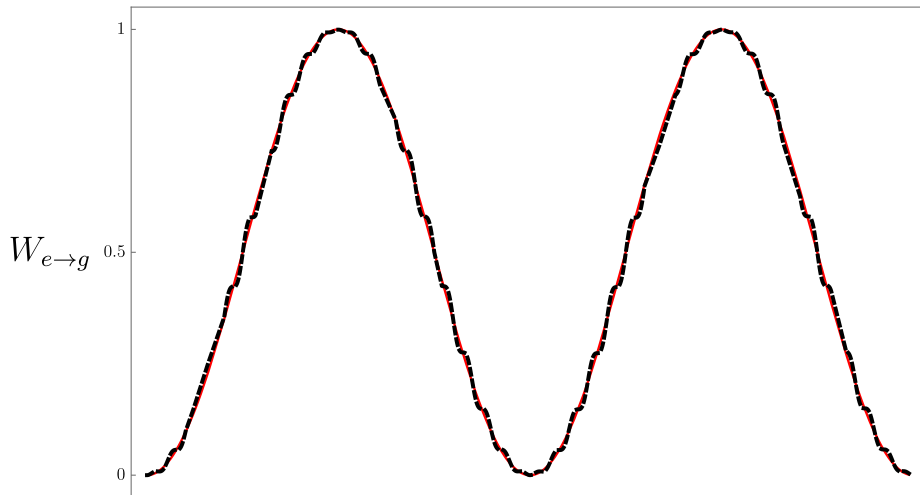
$$W_e(t) = |D_e(t)|^2 = \cos^2\left(\frac{d\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right), \quad W_g(t) = |D_g(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{d\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right)$$

- Vlivem časově závislého elektrického pole  $\mathcal{E}(t)$  dochází k periodickým přechodům mezi excitovaným a základním stavem
- Správná volba času pro přechod  $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$

$$T = T_n = \frac{(2n+1)\pi\hbar}{2d\mathcal{E}_0}, \quad n \in \mathbb{N} \implies W_e(T) = 0, \quad W_g(T) = 1$$

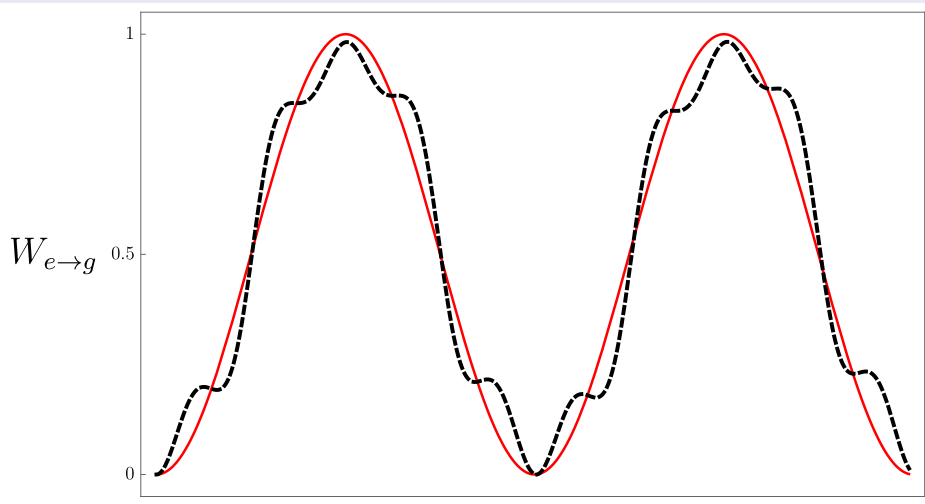
# Porovnání přibližného a numerického řešení

$$d\varepsilon_0 = 0.1\Delta$$



# Porovnání přibližného a numerického řešení

$$d\varepsilon_0 = 0.5\Delta$$



# Porovnání přibližného a numerického řešení

$$d\mathcal{E}_0 = \Delta$$

