

Tomasz Sowiński

Oddziaływanie układów dwupoziomowych z kwantowym polem elektromagnetycznym

Zastosowanie metod
kwantowej teorii pola do opisu qubitów

Rozprawa doktorska

przedstawiona Radzie Wydziału Fizyki
Uniwersytetu Warszawskiego

przygotowana w Centrum Fizyki Teoretycznej
Polskiej Akademii Nauk

pod kierunkiem prof. dra hab. Iwo Białynickiego-Biruli



Warszawa, 2008

*Pracę dedykuję
mojej ukochanej żonie Agnieszce*

Podziękowania

Pragnę w szczególny sposób podziękować mojemu Mistrzowi panu profesorowi Iwo Białynickiemu-Biruli za wieloletnią naukową opiekę, stworzenie mi wspaniałych warunków rozwoju oraz za niekończące się dyskusje naukowe, które otwarły mi oczy na piękno Praw Przyrody.

Podziękowania kieruję również do wszystkich pracowników Centrum Fizyki Teoretycznej PAN za wspaniałą atmosferę naukowej pracy oraz za wiele inspirujących dyskusji, które pozwoliły mi poznać różne spojrzenia na wiele ważnych problemów i każdego dnia skłaniały do dalszego poszukiwania.

Spis treści

Wstęp	xi
1. Fizyka układów dwupoziomowych	1
1.1. Opis teoretyczny	1
1.1.1. Przestrzeń Hilberta	1
1.1.2. Sfera Blocha	3
1.2. Fizyczna realizacja	3
1.2.1. Unieruchomiona cząstka ze spinem $1/2$	5
1.2.2. Atom dwupoziomowy	8
1.2.3. Polaryzacja fotonu	10
1.3. Analiza hamiltonianu oddziaływania	10
1.3.1. Multipolowy rozkład pola elektromagnetycznego	11
1.3.2. Oddziaływanie ze spinem w sferycznym potencjale	12
1.3.3. Oddziaływanie z atomem dwupoziomowym	15
1.3.4. Możliwości uogólnienia opisu	16
1.3.5. Pole kanonicznie sprzężone	17
1.4. Model Jaynesa-Cummingsa	18
1.5. Metody przybliżone dla qubitów	19
1.5.1. Przybliżenie wirującej fali (RWA)	19
1.5.2. Standardowy rachunek zaburzeń	21
2. Kwantowa teoria pola układów dwupoziomowych	23
2.1. Druga kwantyzacja	24
2.1.1. Operatory kreacji i anihilacji	25
2.1.2. Operatory jednocząstkowe i dwucząstkowe	26
2.2. Symetrie hamiltonianu	28
2.2.1. Zachowanie momentu pędu	28
2.2.2. Odwrócenie czasu	30
2.3. Równania dynamiki	31
2.3.1. Obraz Heisenberga	31
2.3.2. Obraz oddziaływania	32
2.4. Feynmanowskie funkcje korelacji	33
2.4.1. Propagatory Feynmana pól swobodnych	37
2.4.2. Konsekwencje symetrii przesunięcia w czasie	40
2.5. Podstawowe twierdzenia kwantowej teorii pola	42
2.5.1. Twierdzenie Gell-Manna i Lowa	42

2.5.2. Twierdzenie Wicka	43
2.6. Reguły Feynmana	45
2.6.1. Reguły rysowania diagramów	46
2.6.2. Reguły obliczania diagramów	48
2.6.3. Analiza spójności diagramów	49
2.7. Związek podstawowy pomiędzy propagatorami	53
2.7.1. Propagatory swobodne jako funkcje Greena	53
2.7.2. Związek między propagatorami elektronowymi	54
2.7.3. Związek między propagatorami fotonowymi	56
3. Propagatory pól oddziałujących	59
3.1. Rozwinięcie perturbacyjne propagatorów	59
3.1.1. Propagator elektronu	59
3.1.2. Propagator fotonu i macierz przejścia	60
3.2. Renormalizacja przerwy energetycznej	63
3.2.1. Istota renormalizacji	64
3.2.2. Wyznaczenie poprawki masowej	65
3.3. Rozpraszanie fotonu na qubicie	67
3.3.1. Drugi rząd rachunku zaburzeń	67
3.3.2. Czwarty rząd rachunku zaburzeń	69
3.3.3. Macierz przejścia	71
3.3.4. Amplituda rozpraszania fotonu	72
4. Reakcja qubitu na małe zaburzenie	77
4.1. Kwantowa teoria liniowej odpowiedzi	77
4.2. Funkcje liniowej odpowiedzi układów dwupoziomowych	81
4.3. Związek z propagatorami pola elektromagnetycznego	82
4.4. Reprezentacja spektralna propagatorów	85
4.4.1. Macierz spektralna	86
4.4.2. Rozkład spektralny propagatorów	87
4.4.3. Zależność między propagatorami	87
4.5. Macierz przejścia i funkcje liniowej odpowiedzi	89
4.5.1. Podatność magnetyczna układu spinowego	90
4.5.2. Polaryzowalność atomu dwupoziomowego	90
5. Atom dwupoziomowy z degeneracją	93
5.1. Hamiltonian atomu dipolowego	93
5.2. Teoria pola dla atomu dipolowego	98
5.2.1. Druga kwantyzacja	98
5.2.2. Ewolucja operatorów w czasie	99
5.2.3. Propagator swobodnego pola fermionowego	100
5.2.4. Reguły Feynmana	101
5.3. Poprawki radiacyjne do propagatorów	102
5.3.1. Renormalizacja przerwy energetycznej	102
5.3.2. Poprawki radiacyjne propagatora fotonu	103

Podsumowanie	107
Z. Szczegóły rachunków perturbacyjnych	109
Z.1. Macierze Pauliego w bazie momentu pędu	109
Z.2. Poprawki radiacyjne dla układu spinowego	111
Z.2.1. Poprawka masowa $\Sigma^{(2a)}(p_0)$	111
Z.2.2. Diagram kijankowy	112
Z.2.3. Poprawka radiacyjna $P^{(4b)}(k_0)$	113
Z.2.4. Poprawka radiacyjna $P^{(4c)}(k_0)$	116
Z.2.5. Poprawka radiacyjna $P^{(4d)}(k_0)$	119
Z.2.6. Poprawka radiacyjna $P^{(4e)}(k_0)$	120
Z.2.7. Poprawki radiacyjne $P^{(4f)}(k_0)$, $P^{(4g)}(k_0)$ i $P^{(4h)}(k_0)$	121
Z.3. Poprawki radiacyjne dla atomu dwupoziomowego (TLA)	122
Z.3.1. Poprawka masowa $\hat{\Sigma}^{(2a)}(p_0)$	122
Z.3.2. Diagram kijankowy	123
Z.3.3. Poprawka radiacyjna $\hat{P}^{(4b)}(k_0)$	123
Z.3.4. Poprawka radiacyjna $\hat{P}^{(4c)}(k_0)$	124
Z.3.5. Poprawka radiacyjna $\hat{P}^{(4d)}(k_0)$	125
Z.3.6. Poprawki radiacyjne $\hat{P}^{(4f)}(k_0)$, $\hat{P}^{(4g)}(k_0)$	126
Z.4. Poprawki radiacyjne dla atomu dipolowego	127
Z.4.1. Poprawka masowa $\check{\Sigma}^{(2a)}(p_0)$	127
Z.4.2. Diagram kijankowy	128
Z.4.3. Poprawka radiacyjna $\check{P}^{(4b)}(k_0)$	128
Z.4.4. Poprawka radiacyjna $\check{P}^{(4c)}(k_0)$	129
Z.4.5. Poprawka radiacyjna $\check{P}^{(4d)}(k_0)$	130
Z.4.6. Poprawki radiacyjne $\check{P}^{(4f)}(k_0)$ i $\check{P}^{(4g)}(k_0)$	131
Bibliografia	133

Wstęp

*„Wyjaśnianie nowych zjawisk za pomocą zjawisk już znanych
jest największą sztuką fizyki teoretycznej.”*

Richard Feynman

Kwantowe układy dwupoziomowe, nazywane od czasów słynnej pracy Benjamina Schumachera [Sch95] również *qubitami*, są najprostszymi obiektami kwantowymi. Są one kwantowymi odpowiednikami *bitów* – najmniejszych porcji klasycznej informacji. Tym samym leżą one w samym centrum zainteresowań burzliwie rozwijającej się dziedziny nauki z pogranicza fizyki i teorii informacji zwanej *informatyką kwantową*. Bardzo często w tym kontekście qubity traktuje się jako obiekty całkowicie odseparowane od otoczenia. To sprawia, że stają się one obiektami czysto abstrakcyjnymi – pozbawionymi własności fizycznych. Za rozumowaniami prowadzonymi w tym duchu oczywiście nadal stoi pewien fizyczny obraz, ale przewidywanie ilościowe wyników doświadczeń, jeśli w ogóle możliwe, staje się bardzo trudne i wymaga dodatkowych argumentów fenomenologicznych. Takie podejście daje jedynie możliwość badania ograniczeń jakie na przechowywanie i przesyłanie kwantowej informacji nakłada sama matematyczna struktura wynikająca wprost z praw mechaniki kwantowej.

W swojej rozprawie chciałbym się skupić na fizycznych własnościach qubitów. Kluczowym elementem, bez którego nie sposób pojąć natury tych własności jest zrozumienie sposobu w jaki układy dwupoziomowe oddziałują z otoczeniem. Wynika to bezpośrednio z faktu, że jedynym sposobem doświadczalnego kontrolowania, jak i wykonywania pomiarów na obiektach kwantowych jest właśnie oddziaływanie. I choć wszystkie swobodne qubity są opisywane w ten sam sposób, to ze względu na różne ich realizacje fizyczne należy się spodziewać, że w ogólności będą one miały różne własności. Dodatkowo, nawet gdybyśmy zupełnie nie interesowali się problemem kontrolowania qubitów to nadal musielibyśmy uwzględniać ich oddziaływanie z otoczeniem. Nie istnieją bowiem żadne fizyczne możliwości „wyłączenia” tego oddziaływania i wszystkie dynamiczne własności qubitu, takie jak choćby czas życia w stanie wzbudzone, są ich bezpośrednią konsekwencją. Należy przy tym podkreślić, że zajmowanie się fizycznymi własnościami tych szczególnych układów kwantowych nie jest problemem jedynie akademickim i ma wymiar również praktyczny. Nie kwestionowanym przez nikogo faktem jest bowiem to, że właśnie fizyczne własności qubitów będą w przyszłości nakładały ograniczenia na ope-

racje kwantowe i tym samym mogą być główną przeszkodą w praktycznym zrealizowaniu idei komputera kwantowego.

Przedstawiona praca wyrasta z obserwacji, że do opisu układów dwupoziomowych można zastosować wyrafinowane metody kwantowej teorii pola. Choć w pierwszym odruchu wydaje się to zbędnym skomplikowaniem opisu, bardzo szybko okazuje się, że jest to nie tylko inny, bardzo elegancki sposób zrozumienia ich dynamiki, ale również prosta droga do otrzymania konkretnych rezultatów, które dotychczasowymi metodami były bardzo trudno lub w ogóle nieosiągalne [Bia07]. Unikamy przy tym potrzeby używania jakichkolwiek dodatkowych argumentów fenomenologicznych. Wszystkie wnioski płyną wprost z pierwszych zasad, na których opieramy nasze rozumowanie.

Opis układów dwupoziomowych w języku operatorów kreacji i anihilacji, które są podstawowym elementem sformułowania teoriopolewego był stosowany już wcześniej (patrz np. [Lou73]). Niemniej jednak do tej pory nikt nie wykorzystał w pełni możliwości jakie daje takie podejście. Zasadniczym elementem przedstawionego w pracy sformułowania jest przetłumaczenie wszystkich ważnych pytań na język propagatorów i systematyczne używanie diagramów Feynmana. W ten sposób diametralnie zostają uproszczone rachunki perturbacyjne, a interpretacja otrzymanego wyniku znacznie ułatwiona.

Struktura pracy

Pierwszy rozdział rozprawy jest krótkim wprowadzeniem w zagadnienie układów dwupoziomowych. Choć rozpoczyna się on od omówienia najprostszej teoretycznie sytuacji qubitów całkowicie odizolowanego, szybko staje się jasne, że podstawowym problemem jest badanie oddziaływania tych układów z otoczeniem. Opisane są dwie podstawowe realizacje doświadczalne układów dwupoziomowych, które w następnych rozdziałach są dogłębnie analizowane pod kątem fizycznych konsekwencji wynikających z oddziaływania z polem elektromagnetycznym. Omówiony jest również pierwszy historyczny model układów dwupoziomowych, tzw. *model Jaynesa-Cummingsa* [Jay63] oraz często spotykane w literaturze tzw. *przybliżenie wirującej fali*.

W drugim rozdziale sformułowany jest problem oddziaływania układów dwupoziomowych z kwantowym polem elektromagnetycznym w języku kwantowej teorii pola. Choć opisywane w tym rozdziale metody są doskonale znane w innych działach fizyki teoretycznej, to ze względu na fakt, że takie podejście nie było dotąd stosowane w kontekście qubitów duży nacisk położyłem na gruntowne wytłumaczenie stosowanych metod. Takie podejście ma też duży walor dydaktyczny. Okazuje się bowiem, że przedstawiony formalizm pozwala bardzo dobrze zrozumieć różne zaawansowane metody kwantowej teorii pola i poznać na elementarnych przykładach różne jej składniki takie jak propagatory Feynmana, diagramatyczny rachunek zaburzeń, analiza spektralna propagatorów, metody przedłużenia analitycznego czy problem renormalizacji. Ten ostatni przykład jest bardzo pouczający, bo choć w opisywanej teorii nie występują żadne rozbieżności nadal istnieje potrzeba przeprowadzenia renormalizacji przerwy energetycznej. Na tym przykładzie można zatem odróżnić

problemy czysto matematyczne od fizycznych konsekwencji teorii, które np. w elektrodynamice kwantowej ze względu na występujące nieskończone wyrażenia są ze sobą nierozdzielnie połączone.

W trzecim rozdziale wykorzystuję opracowaną teorię do wyznaczenia fizycznych własności układów dwupoziomowych. Wykonana jest renormalizacja metodą przeciwczołnów przerwy energetycznej qubitu oraz obliczona jest amplituda rozpraszania fotonu na qubicie w drugim i czwartym rzędzie rachunku zaburzeń. W tym rozdziale zostaje bardzo uwypuklona różnica pomiędzy układem dwupoziomowym realizowanym jako cząstka obdarzona spinem, a atomem dwupoziomowym. Własności dynamiczne tych układów wynikające z istniejącego oddziaływania z polem elektromagnetycznym okazują się diametralnie różne. Najbardziej znamienne jest to w czwartym rzędzie rachunku zaburzeń, gdzie pojawia się problem dodatkowego przesunięcia rezonansu dla układu spinowego, a nieobecny dla atomu dwupoziomowego. W rozdziale tym zostaje również potwierdzony fenomenologiczny przepis *tych samych znaków* dla amplitudy rozpraszania fotonu.

Czwarty rozdział rozprawy poświęcony jest poszukiwaniu odpowiedzi na pytanie o zmianę własności układu dwupoziomowego pod wpływem zewnętrznego zaburzenia elektromagnetycznego. Zgodnie z kwantową teorią liniowej odpowiedzi odpowiedź na tak postawione pytanie zawarta jest w odpowiednich propagatorach *retardowanych*, a nie *chronologicznych* jak było to w przypadku zagadnienia rozproszeniowego. Tym samym powstaje potrzeba wyznaczenia propagatorów, dla których nieznane są metody perturbacyjne. Stosując ogólną metodę analizy spektralnej propagatorów zostają one skonstruowane na podstawie propagatorów feynmanowskich co pozwala odtworzyć postać podatności magnetycznej (dla układu spinowego) i polaryzowalności (dla atomu dwupoziomowego) aż do czwartego rzędu rachunku zaburzeń. Otrzymany wynik na polaryzowalność atomu różni się od innego błędnego wyniku uzyskanego wcześniej [Lou06]. W tym rozdziale zostaje również potwierdzony fenomenologiczny przepis *przeciwnych znaków* dla polaryzowalności atomu i tym samym toczący się od dłuższego czasu spór [And98, Buc00, Ste01, Buc01, And03, Mil04, Berm06] o odpowiedni przepis zostaje rozstrzygnięty na gruncie teoretycznym. Okazuje się, że oba przepisy są poprawne, ale w różnych sytuacjach fizycznych.

Ostatni rozdział jest poświęcony przykładowemu rozszerzeniu omawianych metod na inne sytuacje fizyczne. W rozdziale tym przeanalizowane są własności atomu o dwóch poziomach energetycznych, z których jeden jest trzykrotnie zdegenerowany. Wszystkie obliczenia przeprowadzone są do czwartego rzędu rachunku zaburzeń i wynika z nich, że własności takiego atomu są całkowicie analogiczne do własności atomu dwupoziomowego.

Opisane w rozprawie metody zaczerpnięte z elektrodynamiki kwantowej oraz uzyskane tą drogą oryginalne wyniki teoretyczne zostały opublikowane w przeglądowej pracy

- I. Białynicki-Birula, T. Sowiński
„*Quantum electrodynamics of qubits*”
Phys. Rev. A **76**, 062106 (2007)

Fizyka układów dwupoziomowych

„Nieoddziałujące cząstki materii są abstrakcyjne.”

Niels Bohr

Zrozumienie natury oddziaływań układów dwupoziomowych z otoczeniem jest w praktyce niemożliwe bez zrozumienia w jakich konkretnie sytuacjach fizycznych można takie układy realizować. W pierwszym rozdziale rozprawy skupimy się zatem na szczegółowym opisanu realizacji, które będą leżały w kręgu naszego zainteresowania. Nie powinno być przy tym niespodzianką, że natura qubitów będzie nierozzerwalnie związana ze zjawiskami elektromagnetycznymi. Są to bowiem dziś jedyne oddziaływania, które potrafimy doświadczalnie kontrolować z fenomenalną wręcz dokładnością. Wszystkie dzisiejsze eksperymenty z zakresu tzw. *inżynierii kwantowej* są prowadzone właśnie w takich warunkach, w których wszystkie inne oddziaływania są zanedbywalnie małe.

1.1. Opis teoretyczny

1.1.1. Przestrzeń Hilberta

Układ dwupoziomowy jest najprostszym, nietrywialnym przykładem układu kwantowego. Abstrakcyjnie mówiąc jest to układ niezmienniczy ze względu na przesunięcia w czasie, którego przestrzeń stanów jest dwuwymiarową przestrzenią Hilberta. Ze względu na założoną symetrię przesunięcia w czasie istnieje hermitowski operator \mathcal{H}_{2D} działający w tej przestrzeni, który reprezentuje obserwabłą energii i jest nazywany *hamiltonianem*. Wektory własne tego operatora będziemy oznaczali $|0\rangle$ i $|1\rangle$, a odpowiadające im wartości własne odpowiednio $-m_0$ i m_0 .¹

Ponieważ hamiltonian jest hermitowski, to jego wektory własne są wzajemnie ortogonalne i stanowią bazę w przestrzeni stanów, tzn. dowolny wek-

¹Ze względu na fakt, że fizycznie mierzalna jest jedynie różnica energii pomiędzy poziomami energetycznymi możemy w przypadku układu dwupoziomowego przyjąć, że wartości własne hamiltonianu mają przeciwne wartości. Oznaczenie m_0 wprowadziliśmy celowo, aby w przyszłości było podkreślone podobieństwo do elektrodynamiki kwantowej. Będzie to wyjaśnione w następnym rozdziale.

tor $|\psi\rangle$ reprezentujący stan układu dwupoziomowego ma rozkład w tej bazie

$$|\psi\rangle = \psi_0|0\rangle + \psi_1|1\rangle, \quad (1.1)$$

gdzie $\psi_0 = \langle 0|\psi\rangle$ oraz $\psi_1 = \langle 1|\psi\rangle$.

Zgodnie z ogólnymi zasadami obowiązującymi w teorii kwantowej zakładamy, że dla każdej wartości $\varphi \in \mathbb{R}$ wektor $e^{i\varphi}|\psi\rangle$ reprezentuje dokładnie ten sam stan układu co wektor $|\psi\rangle$. Fizycznie oznacza to, że globalna faza wektora reprezentującego stan nie ma fizycznego znaczenia². Będziemy często mówili, że wektor $|0\rangle$ reprezentuje układ w stanie podstawowym, a $|1\rangle$ w stanie wzbudzonym. Hamiltonian \mathcal{H}_{2D} w wyróżnionej przez nas bazie jest oczywiście operatorem diagonalnym i ma postać

$$\mathcal{H}_{2D} = m_0 (|1\rangle\langle 1| - |0\rangle\langle 0|). \quad (1.2)$$

Bardzo często przy opisie układów dwupoziomowych używamy innego równoważnego podejścia. Opis ten opiera się na spostrzeżeniu, że jeśli ustalimy już bazę w przestrzeni Hilberta to cała informacja o stanie kwantowym zawarta jest w dwóch zespolonych liczbach ψ_0 i ψ_1 z rozkładu (1.1), które mają interpretację amplitudy prawdopodobieństwa, że układ znajduje się odpowiednio w stanie podstawowym lub wzbudzonym. Dowolny stan kwantowy $|\psi(t)\rangle$ możemy zatem reprezentować za pomocą dwuwymiarowego zespolonego wektora zbudowanego z tych liczb

$$\psi(t) \equiv \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_0(t) \end{pmatrix}. \quad (1.3)$$

Taki wektor jest niczym innym jak *funkcją falową*, która opisuje stan naszego układu. Hamiltonian w takim opisie jest pewną kwadratową macierzą 2×2 , która jak łatwo sprawdzić ma postać³

$$\mathcal{H}_{2D} = m_0 \sigma_z. \quad (1.4)$$

Hamiltonian każdego swobodnego układu dwupoziomowego (niezależnie od jego fizycznej realizacji) daje się przedstawić w tej właśnie postaci. Używając słowa qubit bardzo często zapomina się, że swobodne układy dwupoziomowe są jedynie matematycznym modelem, którego nie daje się doświadczalnie zrealizować. Qubit jako układ fizyczny jest bowiem zawsze w jakiś sposób sprzęgnięty do otoczenia. O tym nieustannym oddziaływaniu układu dwupoziomowego z otoczeniem należy zawsze pamiętać, gdyż po pierwsze daje ono nam możliwość wykonywania *fizycznych* pomiarów na układzie. Po drugie zaś to właśnie te oddziaływania decydują o najważniejszych jego własnościach układu, które jesteśmy w stanie zmierzyć doświadczalnie. Doświadczalna realizacja układu dwupoziomowego ma zatem decydujący wpływ na jego fizyczne własności.

²Będąc skrupulatnym matematycznie należałoby zatem powiedzieć, że stan układu jest reprezentowany przez *promień* w przestrzeni Hilberta, a nie przez wektor.

³Do oznaczenia macierzy reprezentującej hamiltonian w takim podejściu będziemy używali takiego samego oznaczenia jak dla samego hamiltonianu. Nie powinno to powodować żadnych nieporozumień.

1.1.2. Sfera Blocha

Zanim przejdziemy do opisu doświadczalnych realizacji układów, które można z dobrym przybliżeniem traktować jako układy dwupoziomowe przedstawmy jeszcze ciekawy sposób geometrycznej wizualizacji stanów kwantowych takiego układu. W tym celu rozpatrzmy pewien stan układu, który jest reprezentowany przez unormowany wektor $|\psi\rangle$ z przestrzeni Hilberta. Oczywiście wektor ten ma jednoznaczny rozkład na stany bazowe (1.1), a warunek unormowania wymaga, aby spełniona była zależność

$$|\psi_0|^2 + |\psi_1|^2 = 1. \quad (1.5)$$

Bez zmniejszania ogólności, ze względu wspomnianą dowolność wyboru globalnej fazy, możemy przyjąć, że jedna z amplitud, np. ψ_0 jest dodatnią liczbą rzeczywistą. Tym samym dowolny stan naszego układu możemy zawsze zapisać w postaci

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle, \quad (1.6)$$

gdzie θ i φ są dwoma rzeczywistymi liczbami z zakresów

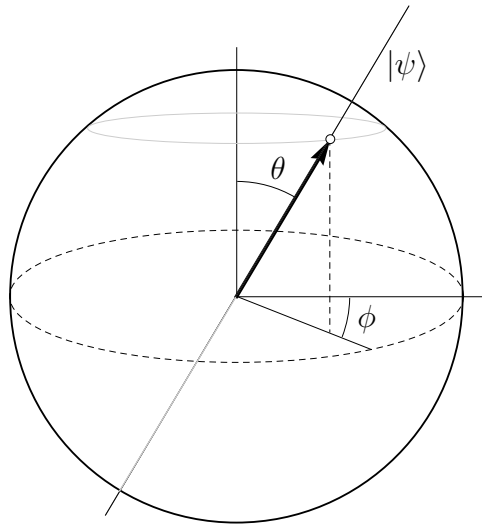
$$0 \leq \theta < \pi, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi. \quad (1.7)$$

Takie przedstawienie stanu kwantowego ma bardzo jasną interpretację geometryczną. Otóż każdy stan może być reprezentowany przez punkt na jednostkowej sferze, tzw. *sferze Blocha*, o współrzędnych (θ, φ) (patrz rysunek 1.1.). Ta wręcz banalna obserwacja pokazuje, że stany kwantowe pojedynczego qubitu mają bardzo prostą strukturę geometryczną. Taka geometryczna wizualizacja stanów kwantowych pojedynczego qubitu jest często punktem wyjścia do badania struktur geometrycznych stanów układów bardziej skomplikowanych (dyskutowanych np. w [Ben06]).

1.2. Fizyczna realizacja

Bardzo ważnym krokiem w zrozumieniu własności układów dwupoziomowych jest uzmysłowienie sobie w jakich eksperymentach fizycznych można takie układy realizować. Bowiem dopiero w konkretnej sytuacji doświadczalnej możemy rozstrzygnąć czy badany układ w ogóle może być modelowany w przybliżeniu dwupoziomowym. Sam fakt, że teoretycznie takie układy umielibyśmy opisać nie świadczy przecież o tym, że można je zrealizować w przyrodzie. To musi rozstrzygnąć doświadczenie.

Gdy już uda nam się zaproponować fizyczną realizację układu dwupoziomowego, kolejnym krokiem jest zrozumienie w jaki sposób układ ten oddziałuje ze światem zewnętrznym. Jest to dla nas bardzo ważne, bo przecież oddziaływania są jedynym narzędziem fizyka pozwalającym dany układ badać i wpływać na jego własności. Nie powinno ulegać zatem żadnej wątpliwości, że to oddziaływania tak naprawdę determinują obserwowalne własności układów. Takimi wielkościami fizycznymi, których nie da się ani zrozumieć, ani



Rysunek 1.1: Sfera Blocha. Każdemu punktowi na sferze o współrzędnych (θ, ϕ) odpowiada dokładnie jeden promień z dwuwymiarowej przestrzeni Hilberta. Promień ten reprezentuje stan kwantowy $|\psi\rangle$ układu dwupoziomowego.

tym bardziej przewidzieć bez znajomości sposobu oddziaływania z otoczeniem jest np. *czas życia* w stanie wzbudzonym lub zmiana własności pod wpływem zewnętrznego zaburzenia.

Powyższe uwagi przekonują nas, że jeśli chcemy traktować układ dwupoziomowy jako prawdziwy układ fizyczny, a taka myśl przyświeca tej rozprawie, to musimy przede wszystkim zrozumieć w jakich doświadczeniach układy możemy traktować jako dwupoziomowe i w jaki sposób komunikują się one z otoczeniem.

W kręgu naszego zainteresowania są zatem wszystkie układy fizyczne, których hamiltonian daje się przedstawić w następującej postaci

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{2D} + \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_I, \quad (1.8)$$

gdzie $\mathcal{H}_{2D} = m_0\sigma_z$ jest hamiltonianem opisującym swobodny układ dwupoziomowy, \mathcal{H}_A hamiltonianem opisującym swobodną dynamikę otoczenia, a \mathcal{H}_I oddziaływanie pomiędzy tymi dwoma układami. Będziemy często używali wspólnego oznaczenia \mathcal{H}_0 na sumę hamiltonianów swobodnych qubitu i otoczenia.

Pokrótkie przedstawię teraz różne doświadczalne realizacje układów dwupoziomowych. Oczywiście wszystkie takie realizacje opierają się na pewnej idealizacji i uproszczeniu prawdziwej sytuacji doświadczalnej. Prawdziwe układy dwupoziomowe rzecz jasna w przyrodzie nie istnieją.

1.2.1. Unieruchomiona cząstka ze spinem $1/2$

Jako pierwszy przykład doświadczalnej możliwości zrealizowania układu dwupoziomowego rozpatrzmy dowolną cząstkę elementarną obdarzoną spinem $1/2$ i znajdującą się w pewnym zewnętrznym stacjonarnym potencjale. Nie wnikamy przy tym jaką naturę ma ten potencjał. Ważne jest jedynie to, że na jego skutek funkcja falowa tej cząstki jest zlokalizowana w jakimś obszarze przestrzeni. Załóżmy, że rozważana cząstka jest obdarzona niezerowym momentem magnetycznym μ i tym samym oddziałuje z zewnętrznym polem magnetycznym. Nawet jeśli to zewnętrzne pole ma charakter czysto kwantowy (jak np. niemierzalne w klasycznych doświadczeniach próżniowe fluktuacje indukcji magnetycznej) to oddziaływanie takie będzie istniało. Jeśli dodatkowo założymy, że cząstka nie posiada ładunku elektrycznego lub jest on na tyle mały, że wpływ fluktuującego pola elektrycznego możemy zaniedbać, to hamiltonian opisujący taką sytuację będzie miał postać

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{Ext}} + \mathcal{H}_{\text{EM}} - \mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathcal{B}(\mathbf{r}). \quad (1.9)$$

Hamiltonian \mathcal{H}_{Ext} opisuje dynamikę przestrzenną cząstki w zewnętrznym potencjale, \mathcal{H}_{EM} jest hamiltonianem swobodnego kwantowego pola elektromagnetycznego, a ostatni człon jest powszechnie znanym sprzężeniem spinowych stopni swobody do pola magnetycznego zaproponowanym przez Pauliego w 1927 roku [Pau27]. Hamiltonian \mathcal{H}_{EM} zbudowany jest jedynie z operatorów pola elektromagnetycznego i oczywiście nigdy bezpośrednio nie wpływa na stopnie swobody związane z cząstką.

Jak już wspominaliśmy hamiltonian \mathcal{H}_{Ext} opisuje zewnętrzny i stacjonarny potencjał, który utrzymuje cząstkę w pewnym obszarze przestrzeni. Załóżmy zatem, że znamy wszystkie funkcje własne χ_i tego hamiltonianu oraz odpowiadające im energie własne E_i , tzn. że rozwiązaliśmy następujące zagadnienie własne

$$\mathcal{H}_{\text{Ext}} \chi_i(\mathbf{r}) = E_i \chi_i(\mathbf{r}). \quad (1.10)$$

Dla przykładu gdybyśmy rozpatrywali elektron w zewnętrznym potencjale kulombowskim, to funkcje $\chi_i(\mathbf{r})$ byłyby dobrze znanymi funkcjami falowymi dla atomu wodoru.

Ponieważ \mathcal{H}_{Ext} jest operatorem hermitowskim to wartości własne E_i są rzeczywiste, a funkcje własne $\chi_i(\mathbf{r})$ stanowią zupełny zbiór w przestrzeni funkcji faowych i są ortogonalne w następującym sensie

$$\int d^3r \chi_i^*(\mathbf{r}) \chi_j(\mathbf{r}) = \delta_{ij}. \quad (1.11)$$

Teraz dokonamy przybliżenia, które pozwoli nam zredukować nasz problem do zagadnienia układu dwupoziomowego. W tym celu założymy, że zewnętrzne pole magnetyczne, do którego sprzęga się spin cząstki jest na tyle małe w porównaniu z polem wywołującym uwięzienie, że amplitudy przejść pomiędzy stanami opisanymi różnymi przestrzennymi funkcjami falowymi

indukowanymi przez to sprzężenie są zaniedbywalne w porównaniu z amplitudami przejść pomiędzy spinowymi stopniami swobody. Tym samym jeśli w chwili początkowej cząstka znajduje się w stanie przestrzennym opisanym funkcją falową $\chi_k(\mathbf{r})$ to podczas ewolucji pozostanie w tym stanie.

Fizyczne uzasadnienie takiego przybliżenia zostanie przedstawione w dalszej części. W tym momencie ważny jest dla nas jedynie wniosek jaki płynie z takiego założenia. Oznacza on bowiem, że jeśli rzeczywiście mamy do czynienia z taką sytuacją, to funkcja falowa $\varphi(\mathbf{r}, t)$ opisująca naszą cząstkę w dowolnej chwili czasu daje się zapisać jako iloczyn

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \chi_k(\mathbf{r}) \psi(t), \quad \psi(t) = \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_0(t) \end{pmatrix} \quad (1.12)$$

Tym samym możemy pozbyć się wszystkich przestrzennych stopni swobody z naszego opisu. Aby tego dokonać należy w pierwszym kroku wypisać równanie Schrödingera dla tej konkretnej funkcji falowej

$$i\chi_k(\mathbf{r}) \partial_t \psi(t) = [\mathcal{H}_{\text{Ext}} \chi_k(\mathbf{r})] \psi(t) - \mu \boldsymbol{\sigma} \cdot [\chi_k(\mathbf{r}) \mathcal{B}(\mathbf{r})] \psi(t). \quad (1.13)$$

Następnie należy pomnożyć powyższe równanie przez $\chi_k^*(\mathbf{r})$ i wykonać całkowanie po całej przestrzeni. W wyniku tej operacji, wykorzystując warunek unormowania funkcji falowej, otrzymujemy równanie na ewolucję spinowej części funkcji falowej

$$i\partial_t \psi(t) = \left(E_k - \mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \int d^3r \rho(\mathbf{r}) \mathcal{B}(\mathbf{r}) \right) \psi(t). \quad (1.14)$$

W powyższym wzorze wielkość $\rho(\mathbf{r}) = \chi_k^*(\mathbf{r}) \chi_k(\mathbf{r})$ jest gęstością prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w punkcie \mathbf{r} w dowolnym stanie spinowym. Wykonując prostą transformację unitarną funkcji falowej

$$\psi(t) \rightarrow e^{-iE_k t} \psi(t) \quad (1.15)$$

łatwo można pozbyć się stałej energii ruchu przestrzennego E_k .

Przedstawione powyżej rozumowanie pokazuje, że zawsze gdy mamy do czynienia z cząstką o spinie $1/2$, której przestrzenne stopnie swobody są zamrożone, tzn. gdy zewnętrzne oddziaływanie jest na tyle słabe, że nie indukuje przejść do innych stanów przestrzennych, to hamiltonian takiego układu redukuje się do postaci

$$\mathcal{H}_R = \mathcal{H}_{\text{EM}} - \mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \int d^3r \rho(\mathbf{r}) \mathcal{B}(\mathbf{r}). \quad (1.16)$$

Jak widać układ taki jest całkowicie symetryczny ze względu na obroty, tzn. niezależnie od wyboru przestrzennego układu współrzędnych hamiltonian ma taką samą postać.

Aby układ opisany hamiltonianem (1.16) miał cechy układu dwupoziomego musimy złamać jego symetrię. W tym celu założymy, że pole magnetyczne

$\mathcal{B}(\mathbf{r})$ jest superpozycją dwóch pól: stałego klasycznego pola magnetycznego B_0 i pozostałej części, która ma charakter czysto kwantowy. W języku kwantowego pola elektromagnetycznego możemy powiedzieć, że operator $\mathcal{B}(\mathbf{r})$ daje się rozłożyć na sumę dwóch składników

$$\mathcal{B}(\mathbf{r}) = B_0 + B(\mathbf{r}), \quad \text{gdzie } B_0 = \langle \mathcal{B}(\mathbf{r}) \rangle. \quad (1.17)$$

Bez zmniejszania ogólności naszych rozważań możemy oczywiście tak dobrać układ współrzędnych, że wektor zewnętrznego pola B_0 będzie miał tylko składową w kierunku z . Tym samym hamiltonian (1.16) przyjmie postać⁴

$$\mathcal{H}_R = \mu B_0 \sigma_z + \mathcal{H}_{EM} - \mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \int d^3r \rho(\mathbf{r}) \mathcal{B}(\mathbf{r}). \quad (1.18)$$

Jest to hamiltonian opisujący cząstkę o spinie $1/2$ z unieruchomionymi przestrzennymi stopniami swobody, która znajduje się w zewnętrznym stałym polu magnetycznym B_0 i oddziałuje z kwantowym polem elektromagnetycznym. Porównując ten hamiltonian ze wzorem (1.8) widzimy, że układ taki ma wszystkie cechy układu dwupoziomowego. Stała m_0 ma w tym przypadku interpretację iloczynu μB_0 .

Na zakończenie pozostało uzasadnić prawidłowość przyjętego przybliżenia. W tym celu posłużmy się przykładem, który może również służyć jako propozycja doświadczalnej realizacji takiego układu dwupoziomowego. Rozważmy elektron w atomie wodoru, który znajduje się w stanie podstawowym, tzn. przestrzenna część funkcji falowej dana jest wzorem

$$\chi_G(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}, \quad (1.19)$$

gdzie $a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 \mu_0}$ jest promieniem Bohra. Odstęp energetyczny pomiędzy tym stanem, a pierwszym stanem wzbudzonym wynosi ok. 10 eV. Jeśli taki atom umieścilibyśmy w bardzo silnym zewnętrznym stałym polu magnetycznym o indukcji rzędu $B_0 = 10$ T, to różnica energii pomiędzy stanami spinowymi elektronu wynikająca ze sprzężenia spinu do pola magnetycznego będzie wynosiła zaledwie

$$\Delta E = 2m_0 = 2\mu B_0 \approx 1.1 \cdot 10^{-3} \text{ eV}. \quad (1.20)$$

Z tego prostego rachunku jasno wynika, że odstęp energetyczny pomiędzy stanami spinowymi jest co najmniej cztery rzędy wielkości mniejszy niż energia potrzebna do przeniesienia elektronu na pierwszy stan przestrzennie wzbudzony. Jeśli zatem fluktuacje próżniowego pola będą indukowały jakiegokolwiek przejścia, to w pierwszej kolejności będą to przejścia pomiędzy stanami spinowymi⁵.

⁴Układ współrzędnych wybraliśmy w taki sposób, aby zewnętrzne pole magnetyczne B_0 miało zwrot przeciwny do zwrotu wyróżnionego przez oś z .

⁵Inną, bardzo ciekawą możliwością doświadczalnego zrealizowania takiego układu dwupoziomowego jest umieszczenie pojedynczego elektronu w tzw. kropce kwantowej (patrz np. [Han07]). W takiej sytuacji również mamy do czynienia z „zamrożeniem” przestrzennych stopni swobody cząstki.

1.2.2. Atom dwupoziomowy

Innym sposobem doświadczalnego zrealizowania układu dwupoziomowego jest wykorzystanie struktury poziomów energetycznych w atomie. Dla ustalenia uwagi założmy, że mamy do czynienia z pewnym atomem opisany hamiltonianem \mathcal{H}_{AT} , dla którego znamy zbiór funkcji własnych $\{\chi_i\}$, które opisują poszczególne stany elektronu w tym atomie⁶. Ze względu na fakt, że elektron znajdujący się w atomie ma ładunek elektryczny będzie on oddziaływał z fluktuującym kwantowym polem elektromagnetycznym znajdującym się w otoczeniu atomu. Taki układ złożony z elektronu w atomie oraz oddziałującego z nim pola elektromagnetycznego jest opisywany następującym hamiltonianem⁷

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{AT}} + \mathcal{H}_{\text{EM}} - e \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}). \quad (1.21)$$

Ponieważ funkcje $\{\chi_i\}$ są funkcjami własnymi operatora hermitowskiego to stanowią zupełny i ortonormalny zbiór funkcji. To oznacza, że zawsze istnieje rozkład

$$-e \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) \chi_i(\mathbf{r}) = \sum_j \alpha_{ij} \chi_j(\mathbf{r}), \quad (1.22)$$

gdzie wielkości α_{ij} są operatorami danymi wzorami⁸

$$\alpha_{ij} = -e \int d^3r \chi_j^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) \chi_i(\mathbf{r}). \quad (1.23)$$

Ze wzoru (1.23) wynika bezpośrednio, że zachodzi związek $\alpha_{ij}^\dagger = \alpha_{ji}$, gdyż operator pola elektrycznego $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ reprezentuje obserwabę i jest zatem hermitowski. To oznacza jednocześnie, że wszystkie amplitudy diagonalne α_{ii} są hermitowskie.

W tym miejscu warto podkreślić jeszcze jedną ciekawą własność rozkładu (1.22), z której za chwilę skorzystamy. Wynika ona z obserwacji, że funkcje własne χ_i są wyznaczone z dokładnością do globalnych faz i możemy je ustalić wg swojego uznania. Jeśli zatem ustalimy jeden konkretny stan χ_k , to zawsze możemy tak podobierać fazy pozostałych stanów, że wszystkie amplitudy przejścia α_{ki} będą hermitowskie.

Wykorzystując rozkład (1.22) widzimy, że działanie hamiltonianu (1.21) na dowolny stan własny χ_i ma postać

$$\mathcal{H} \chi_i(\mathbf{r}) = E_i \chi_i(\mathbf{r}) + \sum_j \alpha_{ij} \chi_j(\mathbf{r}). \quad (1.24)$$

⁶Nie będziemy w tym miejscu precyzowali o jaki atom nam chodzi. Rozważania przeprowadzimy na bardzo wysokim poziomie ogólności.

⁷Hamiltonian oddziaływania naładowanej elektrycznie cząstki z polem elektromagnetycznym zapisany w formie relatywistycznie niezmienniczej ma postać iloczynu czteropędu i czteropotencjału pola $p^\mu A_\mu(x)$. Wybierając w odpowiedni sposób cechowanie można go sprowadzić do używanej przez nas postaci.

⁸Wielkości α_{ij} byłyby liczbami zespolonymi gdybyśmy pole elektryczne $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ traktowali klasycznie. W tym przypadku są one operatorami.

Przybliżenie, które pozwala nam zredukować omawianą sytuację do układu dwupoziomowego opiera się na założeniu, że w rozkładzie (1.22) spośród wszystkich operatorów α_{ij} dominują dwa: α_{12} oraz sprzężony do niego α_{21} . W praktyce warunek ten oznacza, że przejścia pomiędzy stanami χ_1 i χ_2 indukowane przez zewnętrzne pole elektryczne są dużo bardziej prawdopodobne niż przejścia do każdego z pozostałych stanów. Warto podkreślić w tym miejscu, że nie wnioskujemy przy tym o fizyczny powód takiej własności rozważanego przez nas układu. W konkretnej sytuacji doświadczalnej można zrealizować taki warunek na wiele sposobów, ale nie jest to przedmiotem naszego zainteresowania. Ważny jest fakt, że jest to możliwe⁹.

Zauważmy, że jeśli jest spełniony opisany powyżej warunek, to możemy użyć następującego przybliżenia w rozwinięciu (1.22) dla wyróżnionych stanów χ_1 i χ_2

$$-e \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) \chi_1(\mathbf{r}) = \sum_j \alpha_{1j} \chi_j(\mathbf{r}) \approx \alpha_{12} \chi_2(\mathbf{r}), \quad (1.25a)$$

$$-e \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) \chi_2(\mathbf{r}) = \sum_j \alpha_{2j} \chi_j(\mathbf{r}) \approx \alpha_{21} \chi_1(\mathbf{r}). \quad (1.25b)$$

Przyjmując takie przybliżenie hamiltonian całego układu rozpada się na sumę prostą dwóch hamiltonianów, z których jeden działa tylko w podprzestrzeni rozpinanej przez dwa wyróżnione przez nas stany χ_1 i χ_2 . Drugi natomiast działa tylko w podprzestrzeni pozostałych stanów własnych hamiltonianu \mathcal{H}_{AT} i w ogólności jest bardzo skomplikowany ze względu na sprzężenie $\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r})$.

Przedstawione powyżej rozumowanie oznacza, że jeśli w chwili początkowej układ będzie się znajdował w podprzestrzeni rozpinanej przez funkcje $\chi_1(\mathbf{r})$ i $\chi_2(\mathbf{r})$, to pozostanie on w tej podprzestrzeni podczas ewolucji. Rozkładając stan układu w takiej sytuacji w tej bazie

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_1 \chi_1(\mathbf{r}) + \psi_2 \chi_2(\mathbf{r}), \quad (1.26)$$

równanie Schrödingera można zredukować do następującej formy

$$i\partial_t \psi(t) = \hat{\mathcal{H}}_{\text{R}} \psi(t), \quad (1.27)$$

gdzie

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{R}} = \begin{pmatrix} E_1 & \alpha_{12} \\ \alpha_{12} & E_2 \end{pmatrix}, \quad \psi(t) = \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix}. \quad (1.28)$$

Dodatkowo, zmieniając fazę funkcji falowej następująco

$$\psi(t) \rightarrow e^{-\frac{it}{2}(E_1+E_2)} \psi(t) \quad (1.29)$$

sprowadzamy pełny hamiltonian rozpatrywanego układu do postaci (1.8)

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{R}} = m_0 \sigma_z + \mathcal{H}_{\text{EM}} - e \sigma_x \int d^3r \hat{\rho}(\mathbf{r}) \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad (1.30)$$

⁹Doświadczalnie taką sytuację realizuje się najczęściej umieszczając atom w klasycznej monochromatycznej fali elektromagnetycznej, której częstość jest bardzo zbliżona do częstości wybranego przejścia atomowego.

w którym użyliśmy następujących oznaczeń

$$m_0 = \frac{1}{2}(E_1 - E_2), \quad (1.31a)$$

$$\widehat{\rho}(\mathbf{r}) = \chi_2^*(\mathbf{r}) \chi_1(\mathbf{r}). \quad (1.31b)$$

Z przedstawionego powyżej rozumowania wynika, że dowolny atom, w którym przejście pomiędzy dwoma wyróżnionymi stanami elektronu dominuje nad wszelkimi innymi przejściami można traktować jak układ dwupoziomowy. Jak widać oddziaływanie z zewnętrznym polem elektromagnetycznym ma zupełnie inną naturę niż w przypadku układu spinowego i dlatego nie można się spodziewać, że układy te będą miały takie same własności.

1.2.3. Polaryzacja fotonu

Na przełomie XX i XXI wieku zostały opanowane metody doświadczalnego wytwarzania pojedynczych fotonów o ściśle określonych własnościach [Lou00, Kur00, Mic00, San01, Yua02]. To w oczywisty sposób otwiera nowe możliwości w kodowaniu i przetwarzaniu kwantowej informacji, gdyż przestrzeń stanów polaryzacyjnych fotonu jest dwuwymiarową przestrzenią Hilberta. Tym samym sam foton może być traktowany jako inna doświadczalna realizacja układu dwupoziomowego. Taki układ dwupoziomowy ma oczywiście zupełnie inną fizyczną naturę niż opisany wcześniej układ spinowy czy atom dwupoziomowy (TLA). W tamtych sytuacjach pole elektromagnetyczne stanowiło otoczenie dla qubitów. Tym razem to odpowiednia konfiguracja samego pola elektromagnetycznego jest układem dwupoziomowym. Próba udzielenia odpowiedzi na pytanie co jest w takim przypadku otoczeniem nie jest tak oczywista i pozostawiamy ją bez odpowiedzi. Choć samo zagadnienie fotonowych realizacji qubitów jest bardzo ciekawe, to w dalszej części rozprawy nie będziemy się w ogóle nim zajmowali. Należy zatem zawsze pamiętać, że opisywane w rozprawie metody nie mają zastosowania do tych realizacji.

1.3. Analiza hamiltonianu oddziaływania

W poprzednim punkcie pokazaliśmy jakie warunki muszą być spełnione, aby układ fizyczny można było z dobrym przybliżeniem traktować jako układ dwupoziomowy oddziałujący z zewnętrznym polem elektromagnetycznym. Jak pokazaliśmy sytuacje takie, w zależności od realizacji, opisywane są następującymi hamiltonianami¹⁰

$$\mathcal{H} = m_0 \sigma_z + \mathcal{H}_{\text{EM}} - \mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \int d^3r \rho(\mathbf{r}) \mathbf{B}(\mathbf{r}) \quad (\text{spin } 1/2), \quad (1.32a)$$

$$\widehat{\mathcal{H}} = m_0 \sigma_z + \mathcal{H}_{\text{EM}} - e \sigma_x \int d^3r \widehat{\rho}(\mathbf{r}) \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}). \quad (\text{TLA}). \quad (1.32b)$$

¹⁰Od tej pory nie będziemy używali indeksu R na oznaczenie zredukowanego hamiltonianu.

Jak widzimy w wyniku wykonanych przybliżeń oddziaływanie pomiędzy układem dwupoziomowym, a zewnętrznym polem elektromagnetycznym zależy w sposób istotny od własności przestrzennych stanu kwantowego, w którym znajduje się elektron. We wzorach tych jawnie bowiem występuje pewna przestrzenna gęstość prawdopodobieństwa $\rho(\mathbf{r})$ lub $\widehat{\rho}(\mathbf{r})$. Wielkość ta, choć różna w różnych sytuacjach, nie zmienia się podczas ewolucji i w związku z tym w każdej konkretnej sytuacji możemy przyjąć, że jest ona zadana z góry.

Przytoczone powyżej spostrzeżenie prowadzi w rezultacie do znacznego uproszczenia rachunków. Okazuje się bowiem, że efektywnie tylko część pola elektromagnetycznego bierze udział w oddziaływaniu z układem dwupoziomowym. W języku modów pola elektromagnetycznego oznacza to, że nie wszystkie mody pola mogą indukować rozpatrywane przejście. Aby lepiej zrozumieć dlaczego tak się dzieje rozpatrzmy w tym podpunkcie bardziej konkretne doświadczalne realizacje układów dwupoziomowych – elektron w stanie podstawowym atomu wodoru oraz przejście dipolowe w atomie pomiędzy stanami niezdegenerowanymi. Zanim jednak to zrobimy przyjrzyjmy się użytecznemu rozkładowi pola elektromagnetycznego na mody, które są zgodne z symetrią kulistą.

1.3.1. Multipolowy rozkład pola elektromagnetycznego

W problemach elektromagnetycznych z symetrią kulistą bardzo użyteczne jest rozłożenie kwantowego pola elektromagnetycznego na tzw. multipole elektromagnetyczne – zupełny zbiór funkcji wektorowych, które są bezdywergencyjnymi funkcjami własnymi operatora momentu pędu i spełniają równanie Helmholtza. Rozkład taki ma postać [Bia75, Jac99, Bia07]

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{JM\lambda} \int_0^\infty dk \left[\mathbf{E}_{JMk}^{(\lambda)}(\mathbf{r}) c_{JM}^{(\lambda)}(k) + \mathbf{E}_{JMk}^{*(\lambda)}(\mathbf{r}) c_{JM}^{\dagger(\lambda)}(k) \right], \quad (1.33a)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \sum_{JM\lambda} \int_0^\infty dk \left[\mathbf{B}_{JMk}^{(\lambda)}(\mathbf{r}) c_{JM}^{(\lambda)}(k) + \mathbf{B}_{JMk}^{*(\lambda)}(\mathbf{r}) c_{JM}^{\dagger(\lambda)}(k) \right]. \quad (1.33b)$$

W powyższym rozkładzie parametr λ może przyjmować tylko dwie wartości historycznie oznaczane e oraz m , które rozróżniają tzw. elektryczne i magnetyczne multipole. Operatory $c_{JM}^{(\lambda)}(k)$ i $c_{JM}^{\dagger(\lambda)}(k)$ są odpowiednio operatorami anihilującymi i kreującymi fotony, które mają

- energię równą $\hbar\omega_k = \hbar ck$,
- kwadrat całkowitego momentu pędu równy $\hbar^2 J(J+1)$,
- rzut całkowitego momentu pędu na oś z równy $\hbar M$,
- i parzystość określoną przez λ .

Operatory te spełniają naturalne dla operatorów kreacji i anihilacji reguły komutacyjne

$$\left[c_{JM}^{(\lambda)}(k), c_{J'M'}^{\dagger(\lambda')}(k') \right] = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \delta_{\lambda\lambda'} \delta(k - k'). \quad (1.34)$$

Podobnie jak przy innym, dużo częściej stosowanym (choć w naszym przypadku mniej użytecznym) rozkładzie pola elektromagnetycznego na fale płaskie, hamiltonian pola swobodnego wyrażony przez te operatory ma standardową postać „sumy” hamiltonianów niezależnych jednowymiarowych oscylatorów harmoniczych¹¹

$$\mathcal{H}_{\text{EM}} = \frac{1}{2} \int d^3r [\mathbf{E}^2(\mathbf{r}) + \mathbf{B}^2(\mathbf{r})] = \sum_{JM\lambda} \int_0^\infty dk \hbar\omega_k c_{JM}^{\dagger(\lambda)}(k) c_{JM}^{(\lambda)}(k). \quad (1.35)$$

Funkcje $E_{JMk}^{(\lambda)}(\mathbf{r})$ i $B_{JMk}^{(\lambda)}(\mathbf{r})$ występujące w rozkładzie (1.33) otrzymuje się z rozwiązań skalarnego równania Helmholtza, które można zapisać w postaci¹²

$$T_{JMk}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{k}{\pi J(J+1)}} j_J(kr) Y_{JM}(\mathbf{n}), \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (1.36)$$

W powyższym wzorze $j_J(kr)$ jest kulistą funkcją Bessela, a $Y_{JM}(\mathbf{n})$ standardową harmoniką sferyczną. Związek pomiędzy multipolami elektromagnetycznymi, a funkcjami $T_{JMk}(\mathbf{r})$ jest następujący [Bia75, Jac99, Bia07]

$$\mathbf{E}_{JMk}^{(e)}(\mathbf{r}) = i\nabla \times \mathbf{L} T_{JMk}(\mathbf{r}), \quad (1.37a)$$

$$\mathbf{B}_{JMk}^{(e)}(\mathbf{r}) = k\mathbf{L} T_{JMk}(\mathbf{r}), \quad (1.37b)$$

$$\mathbf{E}_{JMk}^{(m)}(\mathbf{r}) = k\mathbf{L} T_{JMk}(\mathbf{r}), \quad (1.37c)$$

$$\mathbf{B}_{JMk}^{(m)}(\mathbf{r}) = -i\nabla \times \mathbf{L} T_{JMk}(\mathbf{r}). \quad (1.37d)$$

W powyższych wzorach użyliśmy standardowego oznaczenia $\mathbf{L} = -i\mathbf{r} \times \nabla$ na operator momentu pędu.

Na zakończenie tych rozważań warto podkreślić, że w rozkładzie (1.33), w odróżnieniu od multipolowego rozkładu pola skalarnego, nie występują multipole z $J = 0$. Bezdywergencyjne pole wektorowe nie może mieć bowiem składników skalarnych. Widać to również bezpośrednio z definicji (1.37) multipoli elektromagnetycznych. Operator momentu pędu \mathbf{L} daje w wyniku 0, gdy działa na sferycznie symetryczne funkcje.

1.3.2. Oddziaływanie ze spinem w sferycznym potencjale

Rozpatrzmy teraz szczególny przypadek doświadczalnej realizacji układu dwupoziomowego – cząstki obdarzonej spinem, która znajduje się w stanie kwantowym, którego przestrzenna część funkcji falowej jest sferycznie symetryczna. W takim przypadku funkcja $\rho(\mathbf{r})$ określająca gęstość prawdopodobieństwa

¹¹Pomijamy tutaj problem uporządkowania operatorów, który jest zagadnieniem dobrze zrozumianym i wyjaśnionym (patrz np. [Bia75]). Dla ścisłości wszystkie iloczyny operatorów pola elektromagnetycznego należy rozumieć jako iloczyny normalne czego nie oznaczamy wprost.

¹²Czytelnika mogłaby zmartwić niejednoznaczność tej definicji dla $J = 0$. Jak się jednak zaraz okaże takich sytuacji nie musimy brać w ogóle pod uwagę.

znalezienia cząstki w danym miejscu zależy jedynie od radialnej składowej położenia r . Hamiltonian oddziaływania ma zatem postać

$$\mathcal{H}_I = -\mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \int d^3r \rho(r) \mathbf{B}(r). \quad (1.38)$$

Po wstawieniu do tego wyrażenia rozwinięcia (1.33b) i prostych przekształceniach otrzymujemy następujące wyrażenie

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_I &= -\mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \sum_{JM} \int_0^\infty dk \int d^3r \rho(r) \left(c_{JM}^{(e)}(k) k \mathbf{L} - i c_{JM}^{(m)}(k) \nabla \times \mathbf{L} \right) T_{JMk}(\mathbf{r}) + h.c. \\ &= -\mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \sum_{JM} \int_0^\infty dk \int d^3r \rho(r) \left[c_{JM}^{(e)}(k) k \mathbf{L} + c_{JM}^{(m)}(k) (2\nabla + i \mathbf{L} \times \nabla) \right] T_{JMk}(\mathbf{r}) + h.c. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Ostatnia równość została otrzymana dzięki wykorzystaniu prostej do sprawdzenia tożsamości $i\nabla \times \mathbf{L} = -i\mathbf{L} \times \nabla - 2\nabla$. Łatwo jest się przekonać, że ze względu na postać funkcji $\rho(r)$ w występującej tu sumie bardzo dużo elementów jest równych zero. W tym celu należy po pierwsze wykonać całkowanie przez części i skorzystać z odpowiednio szybkiego zanikania funkcji $\rho(r)$ w nieskończoności. Otrzymamy wtedy

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_I &= -\mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \sum_{JM} \int_0^\infty dk \int d^3r \left[T_{JMk}(\mathbf{r}) \left(c_{JM}^{(e)}(k) k \mathbf{L} + 2c_{JM}^{(m)}(k) \nabla \right) \rho(r) \right. \\ &\quad \left. + i c_{JM}^{(m)}(k) \mathbf{L} \rho(r) \times \nabla T_{JMk}(\mathbf{r}) \right] + h.c. \end{aligned} \quad (1.40)$$

Po przepisaniu hamiltonianu oddziaływania do takiej postaci od razu widzimy, że wszystkie człony, w których występuje wyrażenie $\mathbf{L}\rho(r)$ nie dają wkładu do sumy. Funkcja $\rho(r)$ zależy bowiem jedynie od zmiennej radialnej i tym samym działający na nią operator momentu pędu daje w wyniku 0. Pozostają zatem tylko te człony, w których znajduje się gradient funkcji rozkładu $\nabla\rho(r) = \rho'(r)\mathbf{n}$

$$\mathcal{H}_I = -2\mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \sum_{JM} \int_0^\infty dk \int d^3r \rho'(r) \mathbf{n} T_{JMk}(\mathbf{r}) c_{JM}^{(m)}(k) + h.c. \quad (1.41)$$

Okazuje się jednak, że również w tej sumie większość elementów jest równych zero. Wynika to tym razem bezpośrednio z własności harmonik sferycznych $Y_{JM}(\mathbf{n})$, które znajdują się w definicji funkcji $T_{JMk}(\mathbf{r})$. Harmoniki sferyczne są bowiem wzajemnie ortogonalne w następującym sensie

$$\int d\Omega Y_{JM}^*(\mathbf{n}) Y_{J'M'}(\mathbf{n}) = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}, \quad (1.42)$$

a kartezjańskie składowe wektora jednostkowego $\mathbf{n} = \left(\frac{x}{r}, \frac{y}{r}, \frac{z}{r} \right)$ wyrażają się liniowo przez harmoniki wektorowe z $J = 1$. Jak łatwo sprawdzić zachodzą

następujące związki

$$\frac{x}{r} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left(\frac{Y_{1,-1}(\mathbf{n}) - Y_{1,1}(\mathbf{n})}{\sqrt{2}} \right), \quad (1.43a)$$

$$\frac{y}{r} = i\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left(\frac{Y_{1,-1}(\mathbf{n}) + Y_{1,1}(\mathbf{n})}{\sqrt{2}} \right), \quad (1.43b)$$

$$\frac{z}{r} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{1,0}(\mathbf{n}). \quad (1.43c)$$

Zatem całka względem zmiennych kątowych z wyrażenia $\mathbf{n} T_{JMk}(\mathbf{r})$ pozostawi jedynie wkłady od tych wyrażen, które zbudowane są z harmonik sferycznych z $J = 1$. Tym samym hamiltonian oddziaływania (1.41) przyjmie znacznie uproszczoną postać

$$\mathcal{H}_I = -2\mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \int_0^\infty dk \sqrt{\frac{2k}{3}} \left[\mathbf{a}(k) + \mathbf{a}^\dagger(k) \right] \int_0^\infty dr r^2 \rho'(r) j_1(kr). \quad (1.44)$$

Wprowadziliśmy tutaj nowe oznaczenie $\mathbf{a}^\dagger(k)$ i $\mathbf{a}(k)$ na operatory kreacji i anihilacji aktywnych modów pola elektromagnetycznego w bazie kartezjańskiej

$$a_x(k) = \frac{c_{1,-1}^{(m)}(k) - c_{1,1}^{(m)}(k)}{\sqrt{2}}, \quad (1.45a)$$

$$a_y(k) = -i \frac{c_{1,-1}^{(m)}(k) + c_{1,1}^{(m)}(k)}{\sqrt{2}}, \quad (1.45b)$$

$$a_z(k) = c_{1,0}^{(m)}(k). \quad (1.45c)$$

Korzystając z tych definicji oraz relacji komutacyjnych (1.34) łatwo sprawdzić, że relacje komutacyjne dla operatorów $\mathbf{a}(k)$ oraz $\mathbf{a}^\dagger(k)$ mają standardową postać

$$\left[a_i(k), a_j^\dagger(k') \right] = \delta_{ij} \delta(k - k'). \quad (1.46)$$

Zauważmy, że oddziaływanie układu spinowego, którego przestrzenna funkcja falowa jest sferycznie symetryczna z kwantowym polem elektromagnetycznym sprowadza się w istocie do oddziaływania z pewnym dipolowym kwantowym polem wektorowym

$$\boldsymbol{\Phi}(k) = \frac{\mathbf{a}^\dagger(k) + \mathbf{a}(k)}{\sqrt{2k}}. \quad (1.47)$$

Pole to skonstruowane jest z *magnetycznych* dipolowych modów pola elektromagnetycznego. Wszystkie inne mody nie biorą udziału w oddziaływaniu i w związku z tym będziemy je pomijać w dalszej analizie. Cała zależność od przestrzennych stopni swobody jest przy tym zakodowana w pewnym efektywnym parametrze sprzężenia g , który zależy tylko od k . Jeśli zdefiniujemy ten parametr wg wzoru

$$g(k) = -\frac{4\mu k}{\sqrt{3}} \int_0^\infty dr r^2 \rho'(r) j_1(kr) = -\frac{\mu k}{\pi\sqrt{3}} \int d^3r \rho'(r) j_1(kr) \quad (1.48)$$

to pełny hamiltonian opisujący tą sytuację będzie miał postać

$$\mathcal{H} = m_0\sigma_z + \sum_i \int_0^\infty dk \omega_k a_i^\dagger(k)a_i(k) + \sum_i \sigma_i \int_0^\infty dk g(k)\Phi_i(k). \quad (1.49)$$

Na zakończenie tej części dyskusji zauważmy jeszcze, że parametr sprzężenia $g(k)$ jest funkcją proporcjonalną do trójwymiarowej transformaty Fouriera gęstości prawdopodobieństwa $\rho(r)$. Rzeczywiście, wykorzystując definicję funkcji Bessela $j_1(kr)$ można dość prosto pokazać [Bia07], że zachodzi związek

$$g(k) = \frac{\mu k^2}{\pi\sqrt{3}}\rho(k), \quad (1.50)$$

gdzie funkcja $\rho(k)$ jest trójwymiarową transformacją Fouriera funkcji $\rho(r)$

$$\rho(k) = \int d^3r e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\rho(r). \quad (1.51)$$

1.3.3. Oddziaływanie z atomem dwupoziomowym

Rozważmy teraz problem atomu dwupoziomowego oddziałującego z zewnętrznym polem elektromagnetycznym. Jak już wcześniej wyjaśniliśmy hamiltonian opisujący taką sytuację ma postać

$$\hat{\mathcal{H}} = m_0\sigma_z + \mathcal{H}_{\text{EM}} - e\sigma_x \int d^3r \hat{\rho}(\mathbf{r}) \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad (1.52)$$

gdzie

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \chi_2^*(\mathbf{r})\chi_1(\mathbf{r}). \quad (1.53)$$

Podobnie jak to było w przypadku oddziałującego układu spinowego, w tej sytuacji również nie wszystkie mody pola elektromagnetycznego biorą udział w oddziaływaniu. Tym razem jest to bezpośrednia konsekwencja konstrukcji tego modelu układu dwupoziomowego. Jak bowiem pamiętamy rozpoczyna się ona od zagadnienia prawdziwego atomu, w którym na skutek zewnętrznego pola elektromagnetycznego jedno z przejść pomiędzy stanami elektronowymi znacznie dominuje nad innymi. To pozwalało nam z dobrym przybliżeniem zredukować problem do zagadnienia atomu tylko z dwoma poziomami energetycznymi. Poziomy te mają przy tym dobrze określoną energię i całkowity moment pędu (tzn. jego kwadrat i rzut na jedną z osi). Tym samym przejście pomiędzy wyróżnionymi stanami może być indukowane tylko przez takie multipolowe stany pola elektromagnetycznego, które mają odpowiednie liczby kwantowe J i M określające ich moment pędu. Oczywiście w zależności od tego z jakimi stanami mamy do czynienia w konkretnej sytuacji aktywne będą inne mody pola elektromagnetycznego. Zawsze jednak będą to multipole o konkretnych wartościach J i M . Ze względu na fakt, że oddziaływanie odbywa się przez sprzężenie do pola elektrycznego będą to tym razem multipole *elektryczne*.

W ten oto fenomenologiczny sposób, podobnie jak robią to inni autorzy [Lou73, Lou06], dochodzimy do wniosku, że w modelu atomu dwupoziomego hamiltonian oddziaływania przybiera postać

$$\widehat{\mathcal{H}}_I = \sigma_x \int_0^\infty dk \widehat{g}(k) \Phi(k). \quad (1.54)$$

W powyższym wzorze, analogicznie jak to zrobiliśmy w przypadku układu spinowego, wprowadziliśmy specjalne oznaczenie $\Phi(k)$ na ten składnik pola elektromagnetycznego, który jest aktywny w tej sytuacji. Inaczej niż było to w przypadku układu spinowego, jest to pole skalarne, które wyraża się przez odpowiednie operatory kreacji $b^\dagger(k)$ i anihilacji $b(k)$ aktywnego modu¹³

$$\Phi(k) = \frac{b^\dagger(k) + b(k)}{\sqrt{2k}}. \quad (1.55)$$

Wprowadzony we wzorze (1.54) parametr sprzężenia $\widehat{g}(k)$ charakteryzuje siłę sprzężenia poszczególnych modów. Fenomenologicznie możemy go otrzymać z parametru $g(k)$ zastępując dipolowy moment magnetyczny μ i funkcję jego rozkładu w przestrzeni pędów $\rho(k)$ odpowiednio przez dipolowy moment elektryczny d i jego funkcję rozkładu $\kappa(k)$ ¹⁴

$$\widehat{g}(k) = \frac{dk^2}{\pi\sqrt{3}} \kappa(k). \quad (1.56)$$

Tym samym pełny hamiltonian opisujący oddziaływanie atomu dwupoziomego z kwantowym polem elektromagnetycznym ma postać

$$\widehat{\mathcal{H}} = m_0 \sigma_z + \int_0^\infty dk \omega_k b^\dagger(k) b(k) + \sigma_x \int_0^\infty dk \widehat{g}(k) \Phi(k). \quad (1.57)$$

Przedstawione powyżej, czysto heurystyczne, rozumowanie prowadzące do hamiltonianu (1.57) zostanie potwierdzone ścisłym rachunkiem w rozdziale 5., gdy będziemy rozważać atom z przejściem dipolowym pomiędzy stanami 1S i 2P. Tymczasem czytelnik może traktować ten hamiltonian atomu dwupoziomego jako zadany z góry bez wnikania w jego pochodzenie.

1.3.4. Możliwości uogólnienia opisu

Przedstawione powyżej sytuacje fizyczne są oczywiście pewnymi szczególnymi przypadkami wybranymi spośród wszystkich możliwych realizacji układów dwupoziomowych. Opisane w dalszej części metody opisu takich układów są jednak bardzo uniwersalne i dają się zastosować w innych sytuacjach, np. gdy elektron nie znajduje się w sferycznym potencjale, ale np. w prostokątnej

¹³Dla odróżnienia, że tym razem mamy do czynienia z multipolami elektrycznymi będziemy stosowali oznaczenia $b^\dagger(k)$ i $b(k)$ dla operatorów kreacji i anihilacji.

¹⁴Celowo w tym miejscu wprowadziliśmy nową funkcję rozkładu $\kappa(k)$, gdyż jak się okaże w rozdziale 5. nie jest to transformata Fouriera funkcji $\widehat{\rho}(r)$.

studni potencjału (kropce kwantowej). Jedyłą różnicą będzie sprzężenie do innych modów pola elektromagnetycznego. W każdym konkretnym przypadku trzeba oczywiście sprawdzić jakie mody pola biorą udział w oddziaływaniu i odpowiednio zmodyfikować hamiltonian oddziaływania. Zazwyczaj będzie to jednak modyfikacja dość trywialna – oprócz całki pędowej będzie znajdowała się jeszcze jakaś suma po innych liczbach kwantowych pola. Może się również zmienić parametr sprzężenia $g(k)$.

Ze względu na fakt, że uogólnienie naszego opisu na inne sytuacje fizyczne jest bardzo proste, jak również dlatego, że chcemy dojść do konkretnych wyników ilościowych, od tej pory, zawsze gdy będziemy mówili o układzie spinowym lub atomie dwupoziomowym (TLA) będziemy mieli na myśli układy opisane odpowiednio hamiltonianami (1.49) i (1.57).

1.3.5. Pole kanonicznie sprzężone

W dalszej analizie układów dwupoziomowych będziemy rozważali dynamiczne skutki istnienia oddziaływania pomiędzy polem elektromagnetycznym, a qubitami. W związku z tym użyteczne jest wprowadzenie dodatkowego pola, które jest kanonicznym partnerem dla pola $\Phi(k)$. Ze względu na fakt, że swobodne pole elektromagnetyczne jest zbiorem niezależnych jednowymiarowych oscylatorów harmoniczych naturalnym kandydatem na operator kanonicznego pędu dla pola $\Phi(k)$ (patrz wzór (1.47)) jest następujący operator

$$\pi(k) = i\sqrt{\frac{k}{2}} [a^\dagger(k) - a(k)]. \quad (1.58)$$

Wykorzystując relacje komutacyjne (1.46) łatwo się przekonać, że pola $\Phi(k)$ i $\pi(k)$ spełniają relacje komutacyjne dla położenia i pędów

$$[\Phi_i(k), \pi_j(k')] = i\delta_{ij}\delta(k - k'). \quad (1.59)$$

W przypadku atomu dwupoziomowego sytuacja jest całkowicie analogiczna. Operatorem pędu kanonicznie sprzężonego do aktywnych modów pola elektrycznego $\Phi(k)$ jest pole

$$\pi(k) = i\sqrt{\frac{k}{2}} [b^\dagger(k) - b(k)]. \quad (1.60)$$

Relacje komutacyjne pomiędzy polem $\Phi(k)$, a $\pi(k)$ są następujące

$$[\Phi(k), \pi(k')] = i\delta(k - k'). \quad (1.61)$$

Hamiltonian swobodnego pola elektromagnetycznego (1.35) w obu tych przypadkach wyraża się następująco

$$\mathcal{H}_{\text{EM}} = \frac{1}{2} \int_0^\infty dk \left[\pi^2(k) + k^2 \Phi^2(k) \right] \quad (\text{Spin } 1/2), \quad (1.62a)$$

$$\mathcal{H}_{\text{EM}} = \frac{1}{2} \int_0^\infty dk \left[\pi^2(k) + k^2 \Phi^2(k) \right] \quad (\text{TLA}). \quad (1.62b)$$

1.4. Model Jaynesa-Cummingsa

Przy omawianiu fizycznych realizacji układów dwupoziomowych nie sposób pominąć historycznie pierwszego modelu Jaynesa-Cummingsa, który został sformułowany i dogłębnie przeanalizowany w 1963 roku w klasycznej pracy [Jay63]. W modelu tym zakłada się, że warunki fizyczne są tak dobrane, że atom dwupoziomowy oddziałuje dokładnie z jednym modem kwantowego pola elektromagnetycznego. Jest to zatem szczególny przypadek sytuacji opisanej w punkcie 1.3.3., którą otrzymuje się kładąc $\hat{g}(k) = g_0\delta(k - k_0)$. Tym samym hamiltonian Jaynesa-Cummingsa ma dość prostą postać

$$\mathcal{H}_{\text{JC}} = m_0\sigma_z + \Omega a^\dagger a + g_0\sigma_x (a^\dagger + a). \quad (1.63)$$

W powyższym wzorze $\Omega = \omega_{k_0}$ jest częstością modu pola elektromagnetycznego biorącego w oddziaływaniu, a operatory a oraz a^\dagger są operatorami anihilacji i kreacji dla wzbudzeń tego modu pola. Jak widać hamiltonian ten można również rozumieć jako opisujący układ dwupoziomowy o przerwie energetycznej $2m_0$ oddziałujący z kwantowym oscylatorem harmonicznym o częstości własnej Ω .

Choć model Jaynesa-Cummingsa może się wydawać dużym teoretycznym uproszczeniem prawdziwej fizycznej sytuacji, to w istocie może on bardzo dobrze opisywać niektóre sytuacje doświadczalne. Jest tak wtedy, gdy w sposób doświadczalny znacznie zredukujemy dostępne mody pola elektromagnetycznego, np. poprzez zamknięcie układu we wnęce rezonansowej. Wtedy, ze względu na warunki brzegowe, ciągłe spektrum pola elektromagnetycznego zostanie zredukowane do dyskretnych wartości. Dobierając odpowiednio kształt wnęki można tak dopasować częstości modów, że tylko jeden z nich będzie „pasował” do przejścia w atomie dwupoziomowym i będzie odizolowany od pozostałych. Jeśli dodatkowo, silnym zewnętrznym promieniowaniem laserowym, wzmocnimy ten mod pola, to nierezonansowe spontaniczne emisje innych fotonów będzie można zaniedbać i układ taki będzie można z bardzo dobrym przybliżeniem opisywać hamiltonianem \mathcal{H}_{JC} . Analizą teoretyczną i doświadczalną takich sytuacji zajmuje się cała gałąź optyki kwantowej, którą z języka angielskiego w literaturze nazywa się *Cavity Quantum Electrodynamics* (patrz np. [Dut05]).

Warto w tym miejscu dodać, że model Jaynesa-Cummingsa był pierwszą teoretyczną próbą udzielenia odpowiedzi na pytanie o to jaka jest różnica pomiędzy oddziaływaniem układów kwantowych z klasycznym i kwantowym polem elektromagnetycznym. Choć półklasyczna teoria oddziaływania, w której pole elektromagnetyczne traktowane jest klasycznie, pozwala opisywać wiele eksperymentalnie stwierdzonych faktów [All75], to istnieją zjawiska, których w ten sposób wytłumaczyć się nie da. Sztandarowym przykładem różniącym oddziaływanie z kwantowym polem elektromagnetycznym od oddziaływania z polem klasycznym jest tzw. zjawisko *collapse-revival*, które zostało przewidziane dla modelu Jaynesa-Cummingsa, a nie zachodzi w modelu półklasycznym [Cum65, Ebe80]. Jest ono bowiem bezpośrednią konsekwencją

cją dyskretnej struktury stanów pola elektromagnetycznego (istnienia fotonów). Wspomniane zjawisko polega na dość zaskakującym przebiegu czasowym obsadzenia stanu wzbudzonego atomu dwupoziomowego. Jeśli w chwili początkowej pole elektromagnetyczne we wnętrzu było w stanie koherentnym, to wraz z upływem czasu obsadzenie stanu wzbudzonego atomu dwupoziomowego bardzo szybko spada niemal do zera jak $e^{-(t/t_0)^2}$. Następnie przez dość długi czas nie zmienia się, aby później powrócić w tym samym tempie do początkowej wartości. W idealnej sytuacji bez dyssypacji proces ten powtarza się okresowo.

Zjawisko collapse-revival zostało po raz pierwszy doświadczalnie potwierdzone w roku 1987 przez grupę Gerharda Rempe [Rem87] i od tego momentu uznawane jest za jeden z fundamentalnych dowodów eksperymentalnych istnienia fotonów.

1.5. Metody przybliżone dla qubitów

Własności układów dwupoziomowych oddziałujących z kwantowym polem elektromagnetycznym są bardzo trudne do przeanalizowania. Jest to związane bezpośrednio z faktem, że nie potrafimy znaleźć stanów własnych pełnego hamiltonianu \mathcal{H} . Nawet w przypadku tak diametralnego uproszczenia jakim jest przybliżenie Jaynesa-Cummingsa jest to niemożliwe. Aby zatem znaleźć jakieś własności qubitów w takiej sytuacji pozostaje jedynie wykorzystać metody przybliżone.

1.5.1. Przybliżenie wirującej fali (RWA)

Jedną z metod przybliżonego rozwiązania przedstawionego problemu jest dalsze uproszczenie modelu. Najczęściej w tym kontekście używa się tzw. *przybliżenia wirującej fali* (ang. RWA – rotating wave approximation). Polega ono na pominięciu pewnych członów w hamiltonianie oddziaływania pomiędzy polem, a układem dwupoziomowym. Jako pierwsi takiego uproszczenia dokonali już Jaynes i Cummings we wspomnianej pracy [Jay63] i dlatego prześledźmy je na tym właśnie przykładzie. W pozostałych przypadkach jest ono całkowicie analogiczne.

Aby zrozumieć istotę przybliżenia RWA przepisujemy hamiltonian (1.63) do postaci

$$\mathcal{H}_{\text{JC}} = m_0 \sigma_z + \Omega a^\dagger a + \frac{g_0}{\sqrt{2}} (\sigma_+ + \sigma_-) (a^\dagger + a), \quad (1.64)$$

gdzie wprowadziliśmy nowe operatory

$$\sigma_+ = \frac{\sigma_x + i\sigma_y}{\sqrt{2}}, \quad \sigma_- = \frac{\sigma_x - i\sigma_y}{\sqrt{2}}. \quad (1.65)$$

Łatwo sprawdzić, że operatory te spełniają następujące reguły antykomutacyjne

$$[\sigma_z, \sigma_+] = 2\sigma_+, \quad [\sigma_z, \sigma_-] = -2\sigma_-, \quad [\sigma_+, \sigma_-] = 2\sigma_z. \quad (1.66)$$

Wykonajmy teraz transformację unitarną generowaną przez hamiltonian swobodny

$$\mathcal{H}_0 = m_0\sigma_z + \Omega a^\dagger a. \quad (1.67)$$

Transformacja ta pozwoli nam sprawdzić jakie zmiany w ewolucji układu wynikają z istnienia oddziaływania¹⁵. W żargonie naukowym często mówi się, że „odwirowujemy dynamikę swobodną” i stąd pochodzi nazwa tego przybliżenia.

Łatwo sprawdzić, że po takiej transformacji hamiltonian całego układu będzie miał następującą postać

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{JC}}(t) &= e^{-i\mathcal{H}_0 t} \mathcal{H}_{\text{JC}} e^{i\mathcal{H}_0 t} \\ &= m_0\sigma_z + \Omega a^\dagger a + \frac{g_0}{2}(\sigma_+ e^{i\Omega t} + \sigma_- e^{-i\Omega t})(a^\dagger e^{2im_0 t} + a e^{-2im_0 t}) \\ &= m_0\sigma_z + \Omega a^\dagger a \\ &\quad + \frac{g_0}{2} [a\sigma_+ e^{i(\Omega-2m_0)t} + a^\dagger\sigma_- e^{-i(\Omega-2m_0)t} + a^\dagger\sigma_+ e^{i(\Omega+2m_0)t} + a\sigma_- e^{-i(\Omega+2m_0)t}]. \end{aligned} \quad (1.68)$$

Jak było wytłumaczone wcześniej model Jaynesa-Cummingsa jest dobrym modelem dla realistycznych sytuacji doświadczalnych, gdy częstość aktywnego modu pola elektromagnetycznego Ω jest bardzo dobrze dopasowana do przerwy energetycznej w atomie $2m_0$. Ten warunek w istocie oznacza, że częstość $\Omega + 2m_0$ jest dużo większa niż $\Omega - 2m_0$. W związku z tym, dwa ostatnie człony w powyższym hamiltonianie zmieniają się bardzo szybko na rozważanych przez nas skalach czasowych i w praktyce uśredniają się do zera. Dobrym przybliżeniem jest więc pominięcie tych członów w rozpatrywanym przez nas modelu. Po wykonaniu odwrotnej transformacji unitarnej tak uproszczonego hamiltonianu otrzymujemy hamiltonian Jaynesa-Cummingsa w obrazie Schrödingera w przybliżeniu wirującej fali

$$\mathcal{H}_{\text{JC}}^{\text{RWA}} = m_0\sigma_z + \Omega a^\dagger a + \frac{g_0}{\sqrt{2}}(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger). \quad (1.69)$$

Jak wykazali autorzy tego modelu [Jay63] układ opisywany takim hamiltonianem można całkowicie rozwiązać (Szczegóły można znaleźć w wielu pozycjach, np. [All75]).

Porównując otrzymany w tym przybliżeniu hamiltonian z pełnym hamiltonianem (1.64) widzimy, że istota tego przybliżenia polega na pominięciu dwóch wyrażeń $\sigma_+ a^\dagger$ oraz $\sigma_- a$. Wyrażenia te są odpowiedzialne za nierezonansowe procesy fizyczne – procesy, które w jawny sposób nie zachowują energii. Pierwszy człon jest odpowiedzialny za wzbudzenie atomu z jednoczesnym wyemitowaniem fotonu, a drugi za deekscytację atomu przy jednoczesnym pochłonięciu fotonu. Pominięcie tych procesów wydaje się zatem bardzo dobrym przybliżeniem przy wyznaczaniu fizycznych własności qubitów. W takim przybliżeniu jednak nie daje się poprawnie opisać własności układu, które zależą od procesów spontanicznych. Jest to duży mankament tego przybliżenia, gdyż od tych własności zależą praktyczne możliwości sterowania qubitem.

¹⁵Jest to nic innego jak zapisanie dynamiki układu w obrazie oddziaływania.

1.5.2. Standardowy rachunek zaburzeń

Chcąc zachować w pełni własności hamiltonianu opisującego qubit jedyną alternatywą dla przybliżenia wirującej fali staje się prowadzenie rachunku zaburzeń. Ta przybliżona metoda opiera się na założeniu, że oddziaływanie pomiędzy układem dwupoziomowym, a polem elektromagnetycznym jest na tyle słabe, że można je traktować jako małe zaburzenie w stosunku do hamiltonianu swobodnego. W takim podejściu, w kolejnych krokach rachunku zaburzeń wyrażamy kolejne przybliżenia stanów własnych (i energii własnych) pełnego hamiltonianu \mathcal{H} poprzez stany własne (i energie własne) hamiltonianu niezaburzonego \mathcal{H}_0 [Lip50].

Podstawowym mankamentem tej metody jest konieczność wykonywania bardzo wielu skomplikowanych rachunków. Wyznaczenie poprawki do wartości oczekiwanej jakiegoś operatora należy bowiem rozpocząć od znalezienia odpowiedniego przybliżenia dla stanu kwantowego. Wraz z przechodzeniem do kolejnych rzędów rachunku perturbacyjnego błyskawicznie rośnie liczba członów i nawet dla tak prostego układu jak układ dwupoziomowy wykonanie poprawnych obliczeń w czwartym rzędzie rachunku nie jest w praktyce możliwe [Lou06, Bia07]. Pominięcie jakiegokolwiek z członów zmusza natomiast do stosowania dodatkowych heurystycznych argumentów, aby otrzymanemu przybliżeniu nadać sens fizyczny. To wszystko sprawia, że zatarte zostaje rozróżnienie pomiędzy prawdziwymi, a wynikającymi jedynie z niedoskonałości metod matematycznych pozornymi własnościami układów dwupoziomowych.

W następnym rozdziale sformułujemy całkowicie inne podejście perturbacyjne do zagadnienia qubitów oddziałujących z kwantowym polem elektromagnetycznym. Będziemy się wzorowali na znanych od wielu lat metodach elektrodynamiki kwantowej, które z powodzeniem były wykorzystywane do sytuacji dużo bardziej skomplikowanych. Jak się okaże w następnych rozdziałach również w przypadku naszego dość prostego układu kwantowego metody te będą bardzo skuteczne.

Kwantowa teoria pola układów dwupoziomowych

*„Nie ma nic bardziej praktycznego
niż dobra teoria.”*

James Clerk Maxwell

Niniejszy rozdział stanowi centralny punkt mojej rozprawy. Sformułujemy w nim kwantową teorię oddziaływania jednego układu dwupoziomowego (realizowanego jako unieruchomiona cząstka obdarzona spinem lub atom dwupoziomowy) z kwantowym polem elektromagnetycznym. Opis ten będzie oparty na metodach kwantowej teorii pola, które oprócz tego, że pozwalają znacznie uprościć i uporządkować rachunki perturbacyjne dają również możliwość dogłębnego zrozumienia natury procesów stojących za zjawiskami spontanicznymi indukowanymi przez otoczenie. Jak się okaże pozwoli to rzucić nowe światło na znane od lat problemy [All75, Berm06, Jay63, Lou06, Mil04] związane ze zrozumieniem dynamiki jaka rządzi tymi prostymi układami fizycznymi.

Opis tak prostych układów kwantowych jakimi są układy dwupoziomowe w języku kwantowej teorii pola pozwala także lepiej zrozumieć istotę samej teorii pola. Będziemy bowiem mieli do czynienia z kwantową teorią pola o znacznie zredukowanej liczbie stopni swobody¹. Pojawia się w niej znane z innych teorii pola zagadnienia takie jak: diagramy i propagatory Feynmana, amplituda rozpraszania, renormalizacja, własności analityczne propagatorów i inne. Ze względu jednak na prostotę naszego modelu będzie można wszystkie rachunki doprowadzić do samego końca bez zbędnego zagłębiania się w problemy czystej matematycznej techniki. Ze względu na fakt, że w naszej teorii nie pojawiają się żadne rozbieżności nie ma żadnych matematycznych wątpliwości co do wykonywanych rachunków². Ze względu na zredukowanie stopni swobody nie trzeba natomiast wykonywać powszechnych w innych teoriach

¹Jest to chyba najprostsza realizacja układu fizycznego, w której teoriopole sformułowanie nie jest trywialne.

²Warto podkreślić, że choć w tej teorii nigdzie nie pojawiają się żadne rozbieżności nasza teoria nadal wymaga renormalizacji. To bardzo uwypukla jej sens fizyczny. Renormalizacja nie jest bowiem zabiegiem czysto matematycznym usuwania niewygodnych nieskończoności, ale jest procedurą nadawania fizycznego znaczenia wielkościom pojawiającym się w obliczeniach.

pola czterowymiarowych całek, które wymagają stosowania metod łączenia mianowników i obrotu Wicka. To wszystko pozwala nam skupić się na problemach czysto fizycznych i dogłębnie je analizować.

2.1. Druga kwantyzacja

Punktem wyjścia teoriopolewego sformułowania każdej teorii kwantowej jest zmiana sposobu opisu stanów kwantowych. Wynika on z obserwacji, że pewne procesy kwantowe łatwiej opisuje się, gdy zrezygnujemy z założenia o ustalonej liczbie cząstek w układzie. Istnieją dwa zasadnicze źródła tej obserwacji:

- procesy elektromagnetyczne w jawny sposób nie zachowują liczby cząstek; w różnych procesach mogą powstawać lub znikać fotony; może też w pewnych warunkach dochodzić do kreacji rzeczywistych par cząstka-antycząstka;
- procesy polegające na zmianie stanu kwantowego danej cząstki (np. przejście na inny stan energetyczny), które oczywiście zachowują liczbę cząstek można traktować jako złożenie dwóch procesów niezachowujących liczby cząstek (zniszczenie cząstki na jednym poziomie i wykreowanie jej na innym); opis taki okazuje się bardzo pomocny przy wyliczaniu konkretnych mierzalnych wielkości fizycznych.

Procedurę, która rozszerza opis danego układu kwantowego na stany o dowolnej liczbie cząstek nazywamy *drugą kwantyzacją*. Aby lepiej przybliżyć tę ideę rozważmy pewien układ dwupoziomowy realizowany jako atom dwupoziomowy. Jak już wspominaliśmy w takim układzie elektron może znajdować się tylko w jednym ze stanów energetycznych (i ich superpozycjach). Procedura drugiej kwantyzacji polega w tym przypadku na rozszerzeniu tego opisu i dopuszczeniu również dwóch innych stanów tego układu – stanu $|N\rangle$, w którym na żadnym z tych dwóch poziomów nie ma żadnego elektronu oraz stanu $|B\rangle$, w którym na każdym z nich jest cząstka (Rys. 2.1). Ze względu na fakt, że elektrony są fermionami nie jest możliwe dalsze rozszerzenie tego opisu bez dopuszczenia innych stanów jednocząstkowych. Nakłada to również warunek na stan $|B\rangle$, który powinien być antysymetryczny ze względu na zamianę cząstek. W przypadku układu dwupoziomowego druga kwantyzacja polega zatem na rozszerzeniu dwuwymiarowej przestrzeni Hilberta reprezentującej stany pojedynczego elektronu na czterowymiarową, w której każdy z poziomów energetycznych (niezależnie od drugiego) może być obsadzony przez jeden elektron. Właśnie dlatego opis ten często nazywa się *reprezentacją liczby obsadzeń*. Ten formalny zabieg jest oczywiście niezależny od tego z jaką realizacją układu dwupoziomowego mamy do czynienia.

Dotychczasowy opis:



Opis w języku drugiej kwantyzacji:



Rysunek 2.1: *Druga kwantyzacja.* Rozszerzamy dwuwymiarową przestrzeń Hilberta układu dwupoziomowego reprezentującą stany pojedynczego elektronu do przestrzeni czterowymiarowej, w której dopuszczamy również stany zero- i dwucząstkowe.

2.1.1. Operatory kreacji i anihilacji

Kolejnym krokiem do sformułowania teoriopolewego jest wprowadzenie nowych, czysto abstrakcyjnych operatorów *kreacji* i *anihilacji*, które działają w naszej rozszerzonej przestrzeni Hilberta i zmieniają liczbę obsadzeń na poszczególnych poziomach energetycznych. W naszym przypadku jest to niezmiernie proste, gdyż istnieją tylko dwa poziomy energetyczne, na których mogą przebywać elektrony. Tym samym wystąpią tylko dwie pary tych operatorów. I tak operatory kreacji $\psi_{\downarrow}^{\dagger}$ i $\psi_{\uparrow}^{\dagger}$ zwiększają o jeden liczbę obsadzeń odpowiednio na poziomie dolnym i górnym. Łatwo sprawdzić, że takie operatory można zdefiniować następująco

$$\psi_{\downarrow}^{\dagger} = |B\rangle\langle e| - |g\rangle\langle N|, \quad (2.1a)$$

$$\psi_{\uparrow}^{\dagger} = |B\rangle\langle g| + |e\rangle\langle N|. \quad (2.1b)$$

Znak minus w definicji operatora $\psi_{\downarrow}^{\dagger}$ zapewnia, że stan $|B\rangle$ jest antysymetryczny ze względu na przestawienie cząstek (tak powinno być, bo elektrony są fermionami)³. Rzeczywiście, jeśli podziałamy na stan próżniowy $|N\rangle$ oboma operatorami w różnych kolejnościach, to otrzymamy stany różniące się znakiem, tzn.

$$\psi_{\downarrow}^{\dagger}\psi_{\uparrow}^{\dagger}|N\rangle = |B\rangle, \quad \psi_{\uparrow}^{\dagger}\psi_{\downarrow}^{\dagger}|N\rangle = -|B\rangle. \quad (2.2)$$

Operatorom kreacji (2.1) odpowiadają sprzężone do nich operatory anihilacji, które zmniejszają liczbę obsadzeń na poszczególnych poziomach o jeden. Mają one postać

$$\psi_{\downarrow} = |e\rangle\langle B| - |N\rangle\langle g|, \quad (2.3a)$$

$$\psi_{\uparrow} = |g\rangle\langle B| + |N\rangle\langle e|. \quad (2.3b)$$

³Oczywiście odpowiednią symetrię stanu $|B\rangle$ można zapewnić dobierając względne fazy pomiędzy operatorami na różne sposoby. Operatory kreacji (i anihilacji) nie mają jednak bezpośredniej interpretacji fizycznej i w związku z tym każdy taki wybór jest równie dobry.

Tak zdefiniowane operatory kreacji i anihilacji spełniają reguły antykomutacyjne, które powinny być spełnione ze względu na związek spinu ze statystyką. Rzeczywiście wykorzystując bezpośrednio definicje (2.1) i (2.3) bardzo łatwo jest sprawdzić, że zachodzą następujące związki

$$\{\psi_{\uparrow}, \psi_{\downarrow}\} = 0 = \{\psi_{\uparrow}^{\dagger}, \psi_{\downarrow}^{\dagger}\}, \quad (2.4a)$$

$$\{\psi_{\uparrow}, \psi_{\uparrow}\} = \{\psi_{\downarrow}, \psi_{\downarrow}\} = 0 = \{\psi_{\uparrow}^{\dagger}, \psi_{\uparrow}^{\dagger}\} = \{\psi_{\downarrow}^{\dagger}, \psi_{\downarrow}^{\dagger}\}, \quad (2.4b)$$

$$\{\psi_{\uparrow}, \psi_{\downarrow}^{\dagger}\} = 0 = \{\psi_{\downarrow}, \psi_{\uparrow}^{\dagger}\}, \quad (2.4c)$$

$$\{\psi_{\uparrow}, \psi_{\uparrow}^{\dagger}\} = \{\psi_{\downarrow}, \psi_{\downarrow}^{\dagger}\} = 1 \quad (2.4d)$$

lub w skrócie

$$\{\psi_{\alpha}, \psi_{\beta}^{\dagger}\} = \delta_{\alpha\beta}, \quad \{\psi_{\alpha}, \psi_{\beta}\} = \{\psi_{\alpha}^{\dagger}, \psi_{\beta}^{\dagger}\} = 0. \quad (2.5)$$

Operator pola fermionowego

Aby opis układu w języku drugiej kwantyzacji jeszcze bardziej przybliżyć do sformułowania teoriopoleowego wprowadźmy *operator pola* elektronu – dwuelementowy wektor składający się z operatorów anihilacji odpowiednio na górnym i dolnym stanie energetycznym. Operator ten i jego sprzężenie hermitowskie wyrażają się następująco

$$\Psi \equiv \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix}, \quad \Psi^{\dagger} = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}^{\dagger} & \psi_{\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Naszym celem jest sformułowanie całej teorii układów dwupoziomowych w języku tych właśnie operatorów.

2.1.2. Operatory jednocząstkowe i dwucząstkowe

Wprowadzenie operatorów kreacji i anihilacji pozwala nam przetłumaczyć wszystkie operatory pochodzące ze starego sformułowania (działające przestrzeni qubitów rozpinanej przez wektory $|g\rangle$ i $|e\rangle$) na operatory zapisane w nowym podejściu. Jest to oczywiście bardzo dobrze zrozumiana i wielokrotnie opisana procedura (patrz np. [Fet71]), jednak dla tak prostego układu jak przez nas rozważany można jeszcze lepiej ją zrozumieć. W tym celu zauważmy, że dowolny operator \mathcal{A} działający w przestrzeni qubitów musi dać się zapisać w następującej postaci

$$\mathcal{A} = A_{gg}|g\rangle\langle g| + A_{eg}|e\rangle\langle g| + A_{ge}|g\rangle\langle e| + A_{ee}|e\rangle\langle e|. \quad (2.7)$$

Operatory elementarne, z których zbudowany jest operator \mathcal{A} można bezpośrednio wyrazić przez zachowujące liczbę cząstek (operator \mathcal{A} nie wyprowadza poza podprzestrzeń qubitową, gdzie liczba elektronów zawsze wynosi 1) kombinacje operatorów kreacji i anihilacji. Poszukiwane kombinacje (choć można

znaleźć również inne równoważne) mają postać

$$|g\rangle\langle e| = \psi_{\uparrow}\psi_{\downarrow}^{\dagger} \quad (2.8a)$$

$$|e\rangle\langle g| = \psi_{\downarrow}\psi_{\uparrow}^{\dagger} \quad (2.8b)$$

$$|g\rangle\langle g| = \psi_{\uparrow}\psi_{\downarrow}^{\dagger}\psi_{\downarrow}\psi_{\uparrow}^{\dagger} \quad (2.8c)$$

$$|e\rangle\langle e| = \psi_{\downarrow}\psi_{\uparrow}^{\dagger}\psi_{\uparrow}\psi_{\downarrow}^{\dagger} \quad (2.8d)$$

Wykorzystując te związki można zatem przetłumaczyć każdy operator działający w przestrzeni qubitów na operator, który będzie działał w naszej rozszerzonej przestrzeni. Będzie miał on oczywiście tę własność, że będzie zerował stany spoza tej podprzestrzeni. Mogłoby się wydawać, że nie ma zatem żadnej korzyści z tego, niewątpliwie bardziej skomplikowanego, opisu układów dwupoziomowych. Jak się jednak okaże w dalszej części tego rozdziału takie podejście pozwala użyć zaawansowanych metod kwantowej teorii pola, które w starym języku były poza naszym zasięgiem. Będziemy jeszcze wielokrotnie wracać do tej kwestii w dalszej części rozprawy.

Hamiltonian

Ponieważ umiemy już przetłumaczyć każdy operator działający w podprzestrzeni qubitowej do nowego języka możemy to zrobić również z hamiltonianami (1.49) i (1.57). Zaczniemy w tym celu od hamiltonianu swobodnego

$$\mathcal{H}_{2D} = m_0(|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|). \quad (2.9)$$

Wykorzystując wzory (2.8) oraz reguły antykomutacyjne (2.5) łatwo pokazać, że hamiltonian swobodny wyraża się przez operatory kreacji i anihilacji następująco

$$\mathcal{H}_{2D} = m_0(\psi_{\uparrow}^{\dagger}\psi_{\uparrow} - \psi_{\downarrow}^{\dagger}\psi_{\downarrow}). \quad (2.10)$$

Jeśli wykorzystamy natomiast definicję operatora pola (2.6) hamiltonian ten będzie miał postać

$$\mathcal{H}_{2D} = m_0\Psi^{\dagger}\sigma_z\Psi, \quad (2.11)$$

gdzie σ_z jest macierzą Pauliego, która działa w w przestrzeni operatorów pola Ψ – dwuelementowych wektorów złożonych z operatorów kreacji i anihilacji. Podobną procedurę możemy wykonać dla hamiltonianów oddziaływania. Ostatecznie pełne hamiltoniany w obu tych realizacjach układu dwupoziomowego będą miały postać

$$\mathcal{H} = m_0\Psi^{\dagger}\sigma_z\Psi + \sum_i \int_0^{\infty} dk \omega_k a_i^{\dagger}(k)a_i(k) + \Psi^{\dagger}\sigma \cdot \Psi \cdot \int_0^{\infty} dk g(k) \Phi(k), \quad (2.12a)$$

$$\hat{\mathcal{H}} = m_0\Psi^{\dagger}\sigma_z\Psi + \int_0^{\infty} dk \omega_k b^{\dagger}(k)b(k) + \Psi^{\dagger}\sigma_x \Psi \int_0^{\infty} dk \hat{g}(k) \Phi(k) \quad (2.12b)$$

W tym miejscu warto podkreślić, że macierze Pauliego występujące we wzorach (2.11) i (2.12) pełnią zupełnie inną funkcję niż we wzorach (1.49)

i (1.57). W starym sformułowaniu działały one w dwuwymiarowej przestrzeni funkcji falowych (1.3). Wymiar tej przestrzeni odpowiadał wymiarowi przestrzeni Hilberta, w której reprezentowaliśmy stany układu. Teraz macierze te działają w przestrzeni dwuelementowych operatorów pola, a każdy z ich elementów jest operatorem w czterowymiarowej przestrzeni Hilberta liczby obsadzeń. Ta zasadnicza i subtelna różnica jest bardzo często źródłem wielu nieporozumień przy stosowaniu kwantowej teorii pola do opisu układów bardziej skomplikowanych. W naszym przypadku, dzięki diametralnie zredukowanej liczbie stopni swobody, różnica ta wydaje się dobrze uchwycona i uwypuklona.

2.2. Symetrie hamiltonianu

Zanim przejdziemy do analizowania dynamicznych własności układów dwupoziomowych przeanalizujemy jeszcze występujące w naszej teorii symetrie. Jak w każdej teorii fizycznej istnienie odpowiednich symetrii prowadzi do zachowania pewnych wielkości, co bardzo upraszcza analizę problemu. W przypadku układów dwupoziomowych okaże się, że istnienie lub nieistnienie symetrii obrotowej jest jedną z podstawowych własności odróżniających spinowy układ dwupoziomowy od atomu dwupoziomowego (TLA). Jest to dodatkowy argument za tym, że te dwie realizacje układów dwupoziomowych, ze względu na inne oddziaływanie z otoczeniem, mają zupełnie różne własności fizyczne.

2.2.1. Zachowanie momentu pędu

Hamiltonian (2.12a) dla układu dwupoziomowego realizowanego jako unieruchomiony spin jest niezmienniczy ze względu na obrót wokół osi z . Hamiltonian oddziaływania w tym przypadku jest nawet niezmienniczy ze względu na wszystkie obroty w przestrzeni (jest bowiem iloczynem skalarnym dwóch wektorów), ale symetria jest złamana ze względu na zewnętrzne stałe pole magnetyczne B_0 , które rozszczepia poziomy energetyczne i prowadzi do hamiltonianu swobodnego $m_0\Psi^\dagger\sigma_z\Psi$. Ta niezmienniczość hamiltonianu ze względu na obrót wokół osi z prowadzi oczywiście do zasady zachowania odpowiedniej składowej momentu pędu całego układu. Można to sprawdzić bezpośrednim rachunkiem wykorzystując definicję operatora całkowitego momentu pędu, który ma w tym przypadku postać

$$M = \frac{1}{2}\Psi^\dagger\boldsymbol{\sigma}\Psi - i \int_0^\infty dk \mathbf{a}^\dagger(k) \times \mathbf{a}(k). \quad (2.13)$$

Pierwszy człon jest operatorem momentu pędu dla układu spinowego, a drugi momentu pędu pola elektromagnetycznego. Istnienie symetrii obrotu wokół osi z oznacza, że generator tych obrotów (trzecia składowa momentu pędu), który jest postaci

$$M_z = \frac{1}{2}\Psi^\dagger\sigma_z\Psi - i \int_0^\infty dk [a_x^\dagger(k)a_y(k) - a_y^\dagger(k)a_x(k)]. \quad (2.14)$$

jest operatorem przemiennym z hamiltonianem (2.12a). Łatwo się przekonać, że tak jest w istocie.

Hamiltonian w bazie momentu pędu

Zachowanie momentu pędu podczas oddziaływania staje się oczywiste, gdy operator momentu pędu i hamiltonian oddziaływania zapiszemy w bazie momentu pędu. Aby tego dokonać wprowadźmy operatory pola elektromagnetycznego, które zmieniają o jedną jednostkę rzut momentu pędu pola elektromagnetycznego. W odróżnieniu do definicji (1.45) operatorów kreacji i anihilacji w bazie kartezjańskiej zdefiniujemy następujące pola

$$\Phi_+(k) = \frac{c_{1,-1}^{(m)}(k) - c_{1,1}^{(m)\dagger}(k)}{\sqrt{2}}, \quad (2.15a)$$

$$\Phi_-(k) = \frac{c_{1,-1}^{(m)\dagger}(k) - c_{1,1}^{(m)}(k)}{\sqrt{2}} = \Phi_+^\dagger(k), \quad (2.15b)$$

$$\Phi_0(k) = \frac{c_{1,0}^{(m)}(k) + c_{1,0}^{(m)\dagger}(k)}{\sqrt{2}}. \quad (2.15c)$$

Łatwo sprawdzić, że tak zdefiniowane pola rzeczywiście zmieniają rzut momentu pędu o ustaloną wartość. Zauważmy bowiem, że przy takich definicjach pole $\Phi_+(k)$ kreuje jeden foton z $M_z = +1$ lub anihiluje foton z $M_z = -1$. Jego działanie powoduje więc zawsze zwiększenie rzutu momentu pędu o jedną jednostkę. Analogicznie pole $\Phi_-(k)$ kreuje foton z $M_z = -1$ lub anihiluje foton z $M_z = +1$ i tym samym zmniejsza rzut momentu pędu o jedną jednostkę. Pole $\Phi_0(k)$ nie zmienia natomiast rzutu momentu pędu. Trzecia składowa momentu pędu (2.14) w tej bazie wyraża się następująco

$$M_z = \frac{1}{2}\Psi^\dagger\sigma_z\Psi + \int_0^\infty dk \left[a_+^\dagger(k)a_+(k) - a_-^\dagger(k)a_-(k) \right], \quad (2.16)$$

gdzie zastosowaliśmy skróconą notację dla operatorów

$$a_+(k) = c_{1,1}^{(m)}(k), \quad a_-(k) = c_{1,-1}^{(m)}(k). \quad (2.17)$$

Wykorzystując powyższe definicje hamiltonian oddziaływania dla układu spinowego można zapisać w postaci

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_I = \Psi^\dagger\sigma_+\Psi \int_0^\infty dk g(k)\Phi_-(k) + \Psi^\dagger\sigma_-\Psi \int_0^\infty dk g(k)\Phi_+(k) \\ + \Psi^\dagger\sigma_z\Psi \int_0^\infty dk g(k)\Phi_0(k), \end{aligned} \quad (2.18)$$

gdzie

$$\sigma_+ = \frac{\sigma_x + i\sigma_y}{\sqrt{2}}, \quad \sigma_- = \frac{\sigma_x - i\sigma_y}{\sqrt{2}}. \quad (2.19)$$

Przy tak zapisanym hamiltonianie oddziaływania jest oczywiste, że jego działanie zachowuje rzut momentu pędu. Dla ustalenia uwagi rozpatrzmy pierwszy człon tego hamiltonianu, który sprzęga operator $\Psi^\dagger \sigma_+ \Psi$ do pola Φ_- . Operator działający w podprzestrzeni fermionowej przesuwa elektron ze stanu podstawowego do stanu wzbudzonego zwiększając moment pędu qubitów o 1. Jednocześnie pole Φ_- zmniejsza moment pędu o 1 kreując lub anihilując odpowiedni foton. Rzut momentu pędu całego układu pozostaje zatem niezmienny. Analogiczne argumenty można przedstawić dla dwóch pozostałych członów hamiltonianu oddziaływania (2.18).

Przypadek atomu dwupoziomowego

Przypadek atomu dwupoziomowego (TLA) jest zupełnie inny. Złamana jest bowiem dodatkowo symetria stanu wzbudzonego – pole elektromagnetyczne indukuje przejście o określonej różnicy momentów pędu. W związku z tym hamiltonian (2.12b) nie jest przemienny z żadną ze składowych operatorów momentu pędu (2.13). W związku z tym w przypadku atomu dwupoziomowego nie ma żadnej niezmienniczości względem obrotów przestrzennych. Jest to kolejna fundamentalna różnica pomiędzy dwoma, wydawałoby się bardzo podobnymi, realizacjami układów dwupoziomowych.

W rozdziale 5. będziemy rozważali atom dwupoziomowy ze zdegenerowanym stanem wzbudzonym. To pozwoli nam rozważyć pełne dipolowe oddziaływanie z polem elektromagnetycznym i przywróci symetrię obrotów wokół osi z .

2.2.2. Odwrócenie czasu

Oba rozważane przez nas przypadki układów dwupoziomowych (tzn. układ spinowy jak i atom dwupoziomowy) są niezmiennicze ze względu na odwrócenie czasu. Ta niezmienniczość wynika bezpośrednio z faktu, że obie teorie są szczególnymi przypadkami pełnej elektrodynamiki kwantowej, która ma tę własność⁴.

Niezmienniczość ze względu na odwrócenie czasu jest bardzo ważnym elementem naszej teorii. Jest ona na przykład niezbędnym warunkiem prawidłowego opisywania procesów związanych z optycznym tłumieniem [Ste01]. Można ją również wykorzystać w wyliczaniu konkretnych własności fizycznych układu. Wynika z niej bowiem, że wykonując rachunki w dziedzinie częstości zmiana znaku rzutu momentu pędu odpowiada zmianie znaku częstości. Nie ma w związku z tym potrzeby prowadzenia rachunków dla wszystkich wartości momentu pędu, gdyż te dla ujemnej wartości można otrzymać odwracając znak częstości. Z tej fundamentalnej własności naszej teorii będziemy korzystać przy wykonywaniu obliczeń dla układu spinowego w rachunku zaburzeń w następnym rozdziale.

⁴Niezmienniczość tą można również wykazać bezpośrednim rachunkiem.

2.3. Równania dynamiki

Najbardziej interesujące są dla nas oczywiście dynamiczne konsekwencje oddziaływania pomiędzy układem dwupoziomowym, a polem elektromagnetycznym. Jak już podkreślaliśmy kilkakrotnie właśnie to oddziaływanie jest odpowiedzialne za wszystkie istotne mierzalne własności fizycznych qubitów. Naszym celem, którego oczywiście nie możemy w pełni osiągnąć, jest zatem zrozumienie dynamiki zadawanej przez pełen hamiltonian naszej teorii. Wszystkie metody, którymi będziemy się posługiwać, aby zrozumieć tą dynamikę opierają się na bardzo fundamentalnym związku jaki istnieje pomiędzy dynamiką w obrazie Heisenberga, a dynamiką w obrazie oddziaływania zwanym czasami obrazem Diraca. Związek ten zostanie sformułowany w dalszej części tego rozdziału. Teraz przestudujmy własności operatorów w tych dwóch obrazach.

2.3.1. Obraz Heisenberga

Obraz Heisenberga jest najbardziej intuicyjnym sposobem rozumienia czasowych zależności różnych wielkości fizycznych w języku kwantowej teorii pola. Przypomnijmy, że jest on zdefiniowany w ten sposób, że cała dynamika zawarta jest w zależnych od czasu operatorach pola [Fet71, Bia75]. Ewolucja w czasie dowolnego operatora $\Upsilon(t)$ w tym obrazie zadana jest przez operację unitarną generowaną przez pełny hamiltonian rozważanej teorii

$$\Upsilon(t) = e^{i\mathcal{H}t} \Upsilon e^{-i\mathcal{H}t}. \quad (2.20)$$

Zgodnie z ogólną metodą [Fet71, Bia75], aby znaleźć równania dynamiki na operatory pola musimy zadać równoczesowe relacje komutacyjne dla operatorów w obrazie Heisenberga. Są one takie same jak ich odpowiedniki w teorii swobodnej. Zgodnie z tym przepisem relacje te wynikają bezpośrednio ze wzorów (1.59) i (1.61) oraz (2.5) i mają następującą postać⁵

$$\left\{ \Psi_\alpha(t), \Psi_\beta^\dagger(t) \right\} = \delta_{\alpha\beta}, \quad (2.21a)$$

$$[\Phi_i(k, t), \pi_j(k', t)] = \delta_{ij} \delta(k - k'). \quad (2.21b)$$

Łatwo się przekonać, że powyższe reguły (anty)komutacyjne prowadzą do następujących równań dynamiki na interesujące nas operatory pola

$$(i\partial_t - m_0\sigma_z) \Psi(t) = \sum_i \int_0^\infty dk g(k) \Phi_i(k, t) \sigma_i \Psi(t), \quad (2.22a)$$

$$(\partial_t^2 + k^2) \Phi_i(k, t) = -g(k) \Psi^\dagger(t) \sigma_i \Psi(t). \quad (2.22b)$$

⁵Od tej pory, zawsze gdy nie będzie to powodowało nieporozumień, będziemy traktowali model atomu dwupoziomowego jako szczególny przypadek modelu spinowego. Model TLA otrzymujemy z modelu spinowego kładąc $i = j = x$. Oba modele będą różniły się jednak wynikami poszczególnych obliczeń. Wtedy, tak jak już to wcześniej robiliśmy, będziemy model atomu dwupoziomowego wyróżniali znakiem $\hat{}$ nad odpowiednimi wielkościami.

Jak widać są to cztery (w przypadku TLA dwa) sprzężone ze sobą w sposób nieliniowy równania operatorowe. Gdybyśmy umieli je rozwiązać w sposób ścisły posiadalibyśmy całkowitą wiedzę na temat własności rozważanego przez nas układu w zadanym stanie kwantowym w każdej chwili czasu. Niestety, sposób ścisłego rozwiązywania równań tego typu nie jest dziś znany. Tym samym będziemy musieli się uciekać do metod przybliżonych rachunku perturbacyjnego.

2.3.2. Obraz oddziaływania

Innym sposobem opisu czasowych zależności w układzie jest obraz oddziaływania. W obrazie tym wszystkie operatory ewoluują zgodnie z hamiltonianami teorii swobodnej, a cała informacja o oddziaływaniach zawarta jest w ewolucji stanów kwantowych zadanej przez hamiltonian oddziaływania.

Zgodnie z definicją ewolucja dowolnego operatora $\Upsilon(t)$ w obrazie oddziaływania jest generowana przez hamiltonian teorii swobodnej wg wzoru

$$\Upsilon(t) = e^{i\mathcal{H}_0 t} \Upsilon e^{-i\mathcal{H}_0 t}. \quad (2.23)$$

Stosując ten przepis do operatorów pola elektromagnetycznego (1.47) i pola fermionowego (2.6) łatwo sprawdzić, że operatory w tym obrazie spełniają następujące równania

$$(i\partial_t - m_0\sigma_z) \Psi(t) = 0, \quad (2.24a)$$

$$(\partial_t^2 + k^2) \Phi_i(k, t) = 0. \quad (2.24b)$$

W przeciwieństwie do równań (2.22) te równania są całkowicie od siebie odprężnione i można bardzo łatwo podać ich rozwiązanie. Jeśli nałożymy następujące warunki początkowe

$$\Psi(0) = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \end{pmatrix}, \quad (2.25a)$$

$$\Phi_i(k, 0) = \frac{a_i(k) + a_i^\dagger(k)}{\sqrt{2k}}, \quad (2.25b)$$

$$\dot{\Phi}_i(k, 0) = i\sqrt{\frac{k}{2}} [a_i(k) - a_i^\dagger(k)], \quad (2.25c)$$

to rozwiązania tych równań mają postać

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow e^{-im_0 t} \\ \psi_\downarrow e^{im_0 t} \end{pmatrix}, \quad (2.26a)$$

$$\Psi^\dagger(t) = \left(\psi_\uparrow^\dagger e^{im_0 t}, \psi_\downarrow^\dagger e^{-im_0 t} \right), \quad (2.26b)$$

$$\Phi_i(k, t) = \frac{a_i(k)e^{-i\omega_k t} + a_i^\dagger(k)e^{i\omega_k t}}{\sqrt{2k}}. \quad (2.26c)$$

Korzystając z równania (2.23) można bez problemu również otrzymać hamiltonian oddziaływania w tym obrazie. W tym celu należy wstawić do tego wzoru wyrażenie na hamiltonian oddziaływania (2.12a). W rezultacie otrzymujemy

$$\mathcal{H}_I(t) = e^{i\mathcal{H}_0 t} \mathcal{H}_I e^{-i\mathcal{H}_0 t} = \Psi^\dagger(t) \sigma \Psi(t) \cdot \int_0^\infty dk g(k) \Phi(k, t). \quad (2.27)$$

Wyrażenie to okaże się niezbędne przy formułowaniu reguł rachunku perturbacyjnego w kwantowej teorii pola.

2.4. Feynmanowskie funkcje korelacji

Podstawowymi obiektami, którymi zajmuje się kwantowa teoria pola są tzw. *wielopunktowe funkcje korelacji operatorów* czasami nazywane wielopunktowymi funkcjami Greena. Funkcje te, choć nie mają bezpośredniej interpretacji fizycznej, pozwalają wyliczać wszystkie interesujące nas wielkości fizyczne, a jednocześnie daje się je w uporządkowany sposób wyznaczać w rachunku zaburzeń.

W dalszej części tego rozdziału będziemy prowadzili pewne ogólne rozważania, które będą miały zastosowanie zarówno dla operatorów pola elektromagnetycznego jak i pola fermionowego. W związku z tym, aby uprościć notację, wprowadźmy wspólne oznaczenie $\Upsilon(t)$ dla operatorów pola $\Psi(t)$, $\Psi^\dagger(t)$ i $\Phi(t)$ w obrazie oddziaływania. Tzn. pisząc $\Upsilon_1(t_1)$ będziemy mieli na myśli jeden z operatorów $\Psi(t_1)$, $\Psi^\dagger(t_1)$ lub $\Phi_{i_1}(k_1, t_1)$. Odpowiadający mu operator w obrazie Heisenberga będziemy oznaczali $\Upsilon(t)$. Pisząc $\Upsilon_1(t_1)$ będziemy mieli na myśli zatem jeden z operatorów $\Psi(t_1)$, $\Psi^\dagger(t_1)$ lub $\Phi_{i_1}(k_1, t_1)$. Notację tą już stosowaliśmy w poprzednim rozdziale w przy definiowaniu obrazów Heisenberga i oddziaływania.

Iloczyn chronologiczny

Pierwszym krokiem do wprowadzenia definicji funkcji korelacji jest zdefiniowanie operatora uporządkowania chronologicznego operatorów. Jeśli rozważymy iloczyn n różnych operatorów pola $\Upsilon_1 \cdots \Upsilon_n$ to operator uporządkowania chronologicznego \mathbb{T} działa w ten sposób na taki iloczyn, że porządkuje te operatory wg. rosnącego czasu. Porządkowanie to respektuje przy tym związek spinu ze statystyką. Tzn.

$$\mathbb{T} \Upsilon_1 \cdots \Upsilon_n = \sum_{\sigma \in S_n} (-1)^\kappa \theta(t_{\sigma_1} - t_{\sigma_2}) \cdots \theta(t_{\sigma_{n-1}} - t_{\sigma_n}) \Upsilon_{\sigma_1}(t_{\sigma_1}) \cdots \Upsilon_{\sigma_n}(t_{\sigma_n}), \quad (2.28)$$

gdzie sumowanie odbywa się po wszystkich permutacjach σ zbioru n -elementowego, a κ jest liczbą przestawień operatorów fermionowych potrzebnych do uzyskania wyjściowej kolejności.

Wielopunktowa funkcja Greena

Z definicji n -punktową feynmanowską funkcją korelacji operatorów będziemy nazywali funkcję zespoloną n argumentów czasowych, która powstaje przez obliczenie wartości oczekiwanej w stanie podstawowym iloczynu chronologicznego n rozważanych przez nas operatorów

$$\mathcal{G}(t_1, \dots, t_n) = -i \langle G | \mathbb{T} \Upsilon_1(t_1) \cdots \Upsilon_n(t_n) | G \rangle. \quad (2.29)$$

Ze względu na fakt, że funkcja ta nie musi mieć bezpośredniej interpretacji fizycznej możemy ją dowolnie unormować pamiętając przy tym, aby robić to konsekwentnie (w naszej definicji pomnożyliśmy tę funkcję przez $-i$, aby rozważane przez nas później funkcje korelacji były rzeczywiste). Podkreślmy w tym miejscu, że występujący w tej definicji stan $|G\rangle$ jest stanem podstawowym pełnego hamiltonianu \mathcal{H} . Nie jest on zatem iloczynem tensorowym stanów podstawowych swobodnego qubitu $|g\rangle$ oraz swobodnego pola elektromagnetycznego $|\emptyset\rangle$ występujących w teorii bez oddziaływania.

Zanim przejdziemy dalej warto jeszcze zwrócić uwagę na fakt, że zawarte w przytoczonej powyżej definicji założenie, że interesują nas jedynie wartości oczekiwane obliczane w stanie podstawowym układu $|G\rangle$ ma swoje fizyczne uzasadnienie. Otóż do końca rozprawy będziemy zakładali, że nasz układ traktowany jako całość (tzn. układ dwupoziomowy wraz z polem elektromagnetycznym) znajdują się w stanie podstawowym $|G\rangle$ pełnego hamiltonianu. Mówiąc językiem fizyki statystycznej zakładamy, że układ jest całkowicie odizolowany od otoczenia i znajduje się w temperaturze zera bezwzględnego. Takie założenie jest oczywiście tylko przybliżeniem prawdziwej sytuacji fizycznej. I choć nie jest to przedmiotem tej pracy warto zasygnalizować, że istnieje możliwość stosowania metod kwantowej teorii pola w sytuacjach bardziej ogólnych, w których cały układ znajduje się w stałym kontakcie z termostatem, tzn. gdy układ ma ustaloną temperaturę. Prace nad formalizmem metod kwantowej teorii pola dla skończonych temperatur zostały zapoczątkowane w latach 50. poprzedniego stulecia przez Takeo Matsubarę klasyczną pracą [Mat55], a następnie bardzo rozwinięte przez innych autorów, m.in. w [Kub57, Wat56, Mar59, Lut60]. Ponieważ formalizm ten opiera się na bardzo ogólnych zasadach wydaje się bardzo możliwe zastosowanie go również w przypadku układów dwupoziomowych.

Propagatory Feynmana

W całej klasie funkcji korelacji (2.29) podstawową rolę pełnią funkcje dwupunktowe, które historycznie nazywa się *propagatorami Feynmana*. Opisują one elementarny proces propagacji pól w czasie. Z definicji mają one postać

$$\mathcal{S}_{F\alpha\beta}(t, t') = -i \langle G | \mathbb{T} \Psi_\alpha(t) \Psi_\beta^\dagger(t') | G \rangle, \quad (2.30a)$$

$$\mathcal{D}_{Fij}(k, k', t, t') = -i \langle G | \mathbb{T} \Phi_i(k, t) \Phi_j(k', t') | G \rangle. \quad (2.30b)$$

Propagatory \mathcal{S}_F i \mathcal{D}_F będziemy nazywali odpowiednio propagatorem pola elektronowego i pola fotonowego w teorii oddziałującej. Znaczna część mojej rozprawy jest poświęcona badaniu własności tych właśnie propagatorów, bo jak się okazuje jest w nich zakodowane bardzo wiele fizycznych własności oddziałującego układu dwupoziomowego z zewnętrznym polem elektromagnetycznym.

Pierwszą, dość oczywistą, własność propagatora fotonowego (2.30b) widać wprost z definicji. Jest on symetryczny ze względu na zamianę miejscami odpowiadających sobie argumentów, tzn.

$$\mathcal{D}_{Fij}(k, k', t, t') = \mathcal{D}_{Fji}(k', k, t', t). \quad (2.31)$$

Własność ta jest bezpośrednią konsekwencją faktu, że pole $\Phi(t)$ jest rzeczywiste.

Propagator wierzchołkowy

Inną, bardzo ważną w naszych rozważaniach, funkcją korelacji jest trójpunktowa funkcja postaci

$$\mathcal{V}_i(k, t_1, t_2, t_3)_{\alpha\beta} = -i\langle G | \mathbb{T} \Phi_i(k, t_1) \Psi_\alpha(t_2) \Psi_\beta^\dagger(t_3) | G \rangle, \quad (2.32)$$

którą będziemy nazywali *propagatorem wierzchołkowym*. Jest ona istotna, bo jak się okazuje opisuje ona elementarny proces oddziaływania jednego kwantu pola elektromagnetycznego z naszym układem dwupoziomowym. W zależności od sytuacji może to być proces spontanicznej emisji lub pochłonięcia fotonu przy przejściu między stanami układu dwupoziomowego.

Zauważmy, że rozważana przez nas funkcja Greena \mathcal{V} jest, tak jak wszystkie obiekty postaci (2.29), zwykłą funkcją zespoloną zależną od trzech momentów czasu i kilku innych parametrów. W związku z tym można ją przedstawić w następującej postaci⁶

$$\begin{aligned} & i\mathcal{V}_i(k, t, t', t'')_{\alpha\beta} \\ &= \int_0^\infty dk_1 g(k_1) \int_{-\infty}^\infty dt_1 \int_{-\infty}^\infty dt_2 \int_{-\infty}^\infty dt_3 \\ & \quad \mathcal{D}_{Fij}(k, t, k_1, t_1) \mathcal{S}_F(t', t_2)_{\alpha\gamma} \Gamma_j(t_1, t_2, t_3)_{\gamma\delta} \mathcal{S}_F(t_3, t'')_{\delta\beta}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Przy tak dobranej definicji (jeśli tylko znalazłbyśmy propagatory \mathcal{S}_F i \mathcal{D}_F) cała informacja o trzypunktowej funkcji \mathcal{V} zawarta jest w funkcji Γ , która jest czymś w rodzaju jądra całkowego. Funkcje tego typu stanowią bardzo ważny element perturbacyjnych rozważań w każdej teorii pola i mają nazwę *funkcji wierzchołkowych*. W przyszłości okaże się, że przedstawienie propagatora wierzchołkowego w tej właśnie postaci jest bardzo użyteczne, nawet gdy nie znamy postaci samej funkcji Γ .

⁶We wzorze tym nie wypisujemy jawnie sumy po powtarzających się wskaźnikach spinowych γ, δ i wektorowym j .

Związek z fizycznymi obserwabłami

Na zakończenie tego podrozdziału wytłumaczymy jeszcze dlaczego funkcje korelacji zdefiniowane wzorem (2.29) stoją w centrum naszego zainteresowania. W tym celu powinniśmy wrócić na chwilę do podrozdziału 2.3.1., w którym stwierdziliśmy że cała informacja o własnościach układu kwantowego zawarta jest w operatorach pola w obrazie Heisenberga. Gdybyśmy umieli rozwiązać równania (2.22) to umielibyśmy obliczać wszystkie interesujące nas wielkości fizyczne charakteryzujące układ w zadanym stanie kwantowym.

Przytoczony przed chwilą fakt o pełnej informacji zawartej w operatorach pola zachodzi również dla funkcji korelacji. Okazuje się bowiem, że gdybyśmy znali wszystkie wielopunktowe funkcje korelacji typu (2.29) dla operatorów pola naszego układu, to również moglibyśmy wyliczyć wszystkie interesujące nas wielkości. Tym samym posiadalibyśmy całą wiedzę o własnościach rozważanego przez nas układu.

Aby lepiej zrozumieć ten związek posłużmy się przykładem. Rozważmy w tym celu swobodny hamiltonian układu dwupoziomowego, którego wartość oczekiwaną w stanie podstawowym całego układu chcemy znaleźć. Interesuje nas zatem wielkość

$$\langle \mathcal{H}_{2D} \rangle = m_0 \sum_{\alpha\beta} \langle G | \Psi_{\alpha}^{\dagger}(t) [\sigma_z]_{\alpha\beta} \Psi_{\beta}(t) | G \rangle. \quad (2.34)$$

W powyższym wzorze w sposób jawny wypisaliśmy wskaźniki spinowe α i β . Rzeczywiście z tego wzoru widać, że gdybyśmy znali operatory pola $\Psi(t)$ to moglibyśmy obliczyć interesującą nas wielkość. Łatwo jest jednak pokazać, że tą wielkość można również wyznaczyć znając propagator Feynmana \mathcal{S}_F . Zachodzi bowiem następujący ciąg równości

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H}_{2D} \rangle &= m_0 \sum_{\alpha\beta} \langle G | \Psi_{\alpha}^{\dagger}(t) [\sigma_z]_{\alpha\beta} \Psi_{\beta}(t) | G \rangle \\ &= m_0 \lim_{t' \rightarrow t^+} \sum_{\alpha\beta} [\sigma_z]_{\alpha\beta} \langle G | \Psi_{\alpha}^{\dagger}(t') \Psi_{\beta}(t) | G \rangle \\ &= -i m_0 \lim_{t' \rightarrow t^+} \sum_{\alpha\beta} [\sigma_z]_{\alpha\beta} \mathcal{S}_{F\beta\alpha}(t, t') \\ &= -i m_0 \lim_{t' \rightarrow t^+} \text{Tr} \left[\sigma_z \mathcal{S}_F(t, t') \right]. \end{aligned} \quad (2.35)$$

W powyższym ciągu równości symbol t^+ oznacza chwilę czasu infinitezymalnie późniejszą od chwili czasu t . To zapewnia, że w liniice trzeciej operatory pola ustawiają się w odpowiedniej kolejności. Ostatnia równość powstaje z poprzedniej jeśli zauważymy, że suma po spinowych stopniach swobody może być rozumiana jako ślad z iloczynu dwóch macierzy σ_z i \mathcal{S}_F .

Ten prosty przykład jest ilustracją bardziej ogólnego faktu, o którym wspominaliśmy – znajomość wszystkich funkcji korelacji pozwala obliczać wartości oczekiwane w stanie podstawowym wszystkich interesujących wielkości.

Na zakończenie tego podpunktu powiedzmy jeszcze dlaczego stosowanie opisu przez funkcje korelacji, a nie bezpośrednio przez operatory pola jest takie użyteczne. Otóż, jak się okaże w dalszej części pracy, istnieje bardzo systematyczny i dość prosty sposób prowadzenia perturbacyjnych rachunków w języku funkcji korelacji. Jak pokazujemy każdą n -punktową funkcję korelacji operatorów w obrazie Heisenberga w każdym rzędzie rachunku zaburzeń daje się prosto zbudować z dwupunktowych funkcji korelacji (propagatorów Feynmana) operatorów pól swobodnych. Tak dobrych metod perturbacyjnych nie znamy natomiast dla samych operatorów pola.

2.4.1. Propagatory Feynmana pól swobodnych

Zdefiniowane przez nas w poprzednim punkcie funkcje korelacji były zbudowane z operatorów w obrazie Heisenberga. Te właśnie funkcje są dla nas najbardziej interesujące, gdyż jak pokazaliśmy to w nich zakodowana jest pełna wiedza o naszym oddziaływającym układzie. Aby jednak prowadzić systematyczny rachunek zaburzeń będziemy potrzebowali również funkcji korelacji dla układów nieoddziaływających. Dokładniej mówiąc propagatorów Feynmana dla pola elektronowego i elektromagnetycznego w sytuacji, gdy nie ma między nimi oddziaływania. Są one zbudowane ze swobodnych operatorów pola spełniających równania dynamiki w obrazie oddziaływania (2.24). Propagatory te są zdefiniowane analogicznie do propagatorów (2.30)

$$S_{F\alpha\beta}(t, t') = -i\langle g, \emptyset | \mathbb{T} \Psi_\alpha(t) \Psi_\beta^\dagger(t') | g, \emptyset \rangle, \quad (2.36a)$$

$$D_{Fij}(k, k', t, t') = -i\langle g, \emptyset | \mathbb{T} \Phi_i(k, t) \Phi_j(k', t') | g, \emptyset \rangle. \quad (2.36b)$$

Zauważmy, że w przeciwieństwie do wzorów (2.30) w przytoczonej powyżej definicji wartości oczekiwane są obliczane względem stanu $|g, \emptyset\rangle$, który jest stanem podstawowym hamiltonianu teorii swobodnej \mathcal{H}_0 , a nie pełnego hamiltonianu \mathcal{H} . Dla uproszczenia dalszej notacji stan ten będziemy w skrócie oznaczać po prostu jako $|g\rangle$.

Zdefiniowane powyżej funkcje korelacji będziemy w dalszej części pracy nazywali odpowiednio propagatorem swobodnego fermionu i propagatorem swobodnego fotonu. Ze względu na fakt, że znamy jawne rozwiązania równań dynamiki (2.24) możemy te propagatory, w przeciwieństwie do propagatorów (2.30), wyznaczyć w sposób bezpośredni.

Propagator swobodnego fotonu

Zgodnie ze wzorem (2.36b) propagator swobodnego fotonu zdefiniowany jest następująco

$$D_{Fij}(k, k', t, t') = -i\langle g | \mathbb{T} \Phi_i(k, t) \Phi_j(k', t') | g \rangle. \quad (2.37)$$

Wykorzystując wzór na ewolucję operatora pola w obrazie oddziaływania (2.26c) oraz fakt, że operatory anihilacji $a_i(k)$ zerują się działając na stan podstawowy $|g\rangle$ możemy napisać

$$\begin{aligned} iD_{Fij}(k, k', t, t') &= \theta(t - t') \langle g | \Phi_i(k, t) \Phi_j(k', t') | g \rangle + \theta(t' - t) \langle g | \Phi_j(k', t') \Phi_i(k, t) | g \rangle \\ &= \theta(t - t') \frac{1}{2\sqrt{kk'}} \langle g | a_i(k) e^{-ikt} e^{ik't'} a_j^\dagger(k') | g \rangle \\ &\quad + \theta(t' - t) \frac{1}{2\sqrt{kk'}} \langle g | a_j(k') e^{-ik't'} e^{ikt} a_i^\dagger(k) | g \rangle \\ &= \left(\theta(t - t') e^{-ik(t-t')} + \theta(t' - t) e^{-ik(t'-t)} \right) \frac{\delta_{ij} \delta(k - k')}{2k}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Ostatnią równość otrzymaliśmy dzięki wykorzystaniu reguł komutacyjnych (1.46). Powyższy rachunek pokazuje, że propagator fotonowy D_{Fij} zależy jedynie od różnicy czasów $t - t'$. Jak pokażemy w punkcie 2.4.2. jest to przejaw dużo ogólniejszej reguły, która wynika z niezmienniczości naszej teorii ze względu na przesunięcie w czasie.

Propagator D_F ma proste przedstawienie w dziedzinie częstości. Aby je uzyskać wykorzystajmy wzór na przedstawienie spektralne funkcji Heviside'a

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{i e^{-i\omega t}}{\omega + i\epsilon}. \quad (2.39)$$

Wstawiając ten związek do wzoru (2.38) otrzymujemy

$$iD_{Fij}(k, k', t, t') = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \left(\frac{e^{-i(k_0+k)(t-t')}}{k_0 + i\epsilon} + \frac{e^{-i(k_0+k)(t'-t)}}{k_0 + i\epsilon} \right) \frac{\delta_{ij} \delta(k - k')}{2k}. \quad (2.40)$$

Wzór ten można znacznie uprościć poprzez wykonanie odpowiedniej zamiany zmiennej całkowania k_0 w pierwszej i drugiej całce

$$k_0 \rightarrow k_0 - k \quad \text{ i } \quad k_0 \rightarrow -k_0 - k.$$

To prowadzi do następującego wyrażenia na propagator swobodnego fotonu

$$\begin{aligned} D_{Fij}(k, k', t, t') &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} e^{-ik_0(t-t')} \left(\frac{1}{k_0 - k + i\epsilon} - \frac{1}{k_0 + k - i\epsilon} \right) \frac{\delta_{ij} \delta(k - k')}{2k} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} e^{-ik_0(t-t')} \frac{\delta_{ij} \delta(k - k')}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} e^{-ik_0(t-t')} D_{Fij}(k, k', k_0). \end{aligned} \quad (2.41)$$

W ostatniej linijce funkcja $D_{Fij}(k, k', k_0)$ jest transformatą Fouriera propagatora w dziedzinie częstości⁷

$$D_{Fij}(k, k', k_0) = \frac{\delta_{ij} \delta(k - k')}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon}. \quad (2.42)$$

⁷Do oznaczenia propagatora i jego transformaty Fouriera będziemy używali tych samych oznaczeń. Odróżniać je zawsze będzie odpowiedni argument.

Propagator swobodnego elektronu

Znajdźmy teraz propagator swobodnego elektronu w podobny sposób jak zrobiliśmy to dla propagatora fotonowego. Zgodnie ze wzorem (2.36a) jest on zdefiniowany następująco

$$S_{F\alpha\beta}(t, t') = -i\langle g | \mathbb{T} \Psi_\alpha(t) \Psi_\beta^\dagger(t') | g \rangle. \quad (2.43)$$

Wykorzystując równania ewolucji (2.26a) i (2.26b) łatwo pokazać, że wyraża się on następująco

$$\begin{aligned} iS_{F\alpha\beta}(t, t') &= \theta(t - t') \langle g | \Psi_\alpha(t) \Psi_\beta^\dagger(t') | g \rangle - \theta(t' - t) \langle g | \Psi_\beta^\dagger(t') \Psi_\alpha(t) | g \rangle \\ &= e^{-im_\alpha t} e^{im_\beta t'} \left(\theta(t - t') \langle g | \psi_\alpha \psi_\beta^\dagger | g \rangle - \theta(t' - t) \langle g | \psi_\beta^\dagger \psi_\alpha | g \rangle \right). \end{aligned} \quad (2.44)$$

Z jawnego przedstawienia operatorów kreacji (2.1) i anihilacji (2.3) wynika natomiast, że występujące tutaj wartości oczekiwane w stanie podstawowym mają postać

$$\langle g | \psi_\alpha \psi_\beta^\dagger | g \rangle = \langle g | \psi_\uparrow \psi_\uparrow^\dagger | g \rangle \delta_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\uparrow} = (\mathbf{P}_\uparrow)_{\alpha\beta}, \quad (2.45a)$$

$$\langle g | \psi_\beta^\dagger \psi_\alpha | g \rangle = \langle g | \psi_\downarrow^\dagger \psi_\downarrow | g \rangle \delta_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\downarrow} = (\mathbf{P}_\downarrow)_{\alpha\beta}. \quad (2.45b)$$

W powyższych wzorach wprowadziliśmy nowe oznaczenie na operatory rzutowe $\mathbf{P}_{\uparrow/\downarrow}$, które są macierzami 2×2 we wskaźnikach α oraz β i mają postać

$$\mathbf{P}_\downarrow = \frac{1 - \sigma_z}{2}, \quad \mathbf{P}_\uparrow = \frac{1 + \sigma_z}{2}. \quad (2.46)$$

Propagator elektronu ma zatem postać⁸

$$iS_F(t, t') = \theta(t - t') \mathbf{P}_\uparrow e^{-im_0(t-t')} - \theta(t' - t) \mathbf{P}_\downarrow e^{im_0(t-t')}. \quad (2.47)$$

Jak widać propagator elektronu, podobnie jak to było w przypadku propagatora fotonu, jest funkcją jedynie różnicy czasów. Wykorzystując ponownie wzór na transformatę Fouriera funkcji Heviside'a (2.39) i wykonując analogiczne jak w poprzednim przypadku przesunięcie zmiennej całkowania możemy znaleźć wzór na transformatę Fouriera propagatora swobodnego elektronu

$$S_F(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} e^{-ip_0(t-t')} S_F(p_0). \quad (2.48)$$

Wielkość $S_F(p_0)$ jest propagatorem elektronu w dziedzinie częstości i dana jest następującymi równoważnymi wzorami

$$S_F(p_0) = \frac{\mathbf{P}_\uparrow}{p_0 - m_0 + i\epsilon} + \frac{\mathbf{P}_\downarrow}{p_0 + m_0 - i\epsilon} \quad (2.49a)$$

$$= \frac{\sigma_z}{p_0 \sigma_z - m_0 + i\epsilon} \quad (2.49b)$$

$$= \frac{p_0 + m_0 \sigma_z}{p_0^2 - m_0^2 + i\epsilon}. \quad (2.49c)$$

⁸Od tej pory będziemy często pomijali jawne wypisywanie wskaźników spinowych α i β mając zawsze w pamięci, że propagator elektronu jest w tych wskaźnikach macierzą 2×2 .

Analogia z pełną elektrodynamiką kwantową

Na zakończenie tego punktu warto jest jeszcze przyjrzeć się na poziomie propagatora swobodnego elektronu analogii pomiędzy teorią qubitu, a pełną elektrodynamiką, w której elektrony posiadają również przestrzenne stopnie swobody. W pełnej elektrodynamice odpowiednikiem propagatora $S_F(p_0)$ jest propagator, który jest funkcją czteropędu p_μ

$$S_F^{QED}(p^\mu) = \frac{1}{p_\mu \gamma^\mu - m_0 + i\epsilon}. \quad (2.50)$$

Jak widzimy ma on bardzo podobną strukturę do propagatora przez nas otrzymanego. Istotną różnicą jest to, że jest on macierzą 4×4 działającą w przestrzeni wewnętrznych stopni swobody elektronu. Wynika to oczywiście z faktu, że pełna elektrodynamika wymaga do opisu elektronu pól bispinorowych. Odpowiednikiem macierzy σ_z jest w tym przypadku macierz γ_0 . Macierze γ_1, γ_2 i γ_3 mnożą przestrzenne składowe pędu i w naszej teorii oczywiście nie mają swoich odpowiedników. Jak już wspominaliśmy w naszej teorii nie występują bowiem przestrzenne stopnie swobody elektronu.

Niepokojącym mógłby się wydawać fakt, że w propagatorze (2.49b) w liczniku znajduje się macierz σ_z , a nie ma odpowiadającej jej macierzy γ_0 w propagatorze (2.50). Nie jest to jednak ani żaden błąd, ani żadna różnica pomiędzy tymi dwoma teoriami. Należy bowiem sobie uświadomić, że w pełnej elektrodynamice (dla wygody prowadzenia rachunków) przyjmuje się, że kanonicznie sprzężonymi operatorami pola fermionowego są pola Ψ oraz $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \gamma_0$, a propagator swobodnego fermionu zdefiniowany jest następująco

$$S_{F\alpha\beta}^{QED}(t_1, t_2) = -i \langle g | \mathbb{T} \Psi_\alpha(\mathbf{p}, t) \bar{\Psi}_\beta(\mathbf{p}', t') | g \rangle. \quad (2.51)$$

To właśnie z różnicy tych definicji bierze się różnica w ostatecznym wzorze na transformatę Fouriera propagatora elektronu. Jak już wspominaliśmy sam propagator nie ma jednak bezpośredniej interpretacji fizycznej i oczywiście obliczone mierzalne własności układu nie zależą od tego jak jest on zdefiniowany. Pomiedzy teorią qubitów, a pełną elektrodynamiką (tak jak się tego spodziewamy) jest zatem pełna analogia.

2.4.2. Konsekwencje symetrii przesunięcia w czasie

W poprzednim punkcie znaleźliśmy jawną postać propagatorów pól swobodnych. Okazało się, że propagatory te mają taką własność, że są funkcjami jedynie różnicy swoich argumentów czasowych. To doprowadziło nas do dużego uproszczenia postaci propagatorów w dziedzinie częstości. Pokażemy teraz, że podobną własność mają również propagatory w teorii z oddziaływaniami, bo wynika ona bezpośrednio z symetrii teorii względem przesunięcia w czasie. W tym celu rozważmy dowolną dwupunktową feynmanowską funkcję korela-

cji, która zgodnie z definicją (2.29) ma postać⁹

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_2(t_1, t_2) &= -i\langle G|\mathbb{T}\Upsilon_1(t_1)\Upsilon_2(t_2)|G\rangle \\ &= -i\theta(t_1 - t_2)\langle G|\Upsilon_1(t_1)\Upsilon_2(t_2)|G\rangle \pm i\theta(t_2 - t_1)\langle G|\Upsilon_2(t_2)\Upsilon_1(t_1)|G\rangle.\end{aligned}\quad (2.52)$$

Wykorzystując równanie (2.20) zadającego ewolucję dowolnego operatora w obrazie Heisenberga możemy zapisać tę funkcję w postaci

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_2(t_1, t_2) &= -i\theta(t_1 - t_2)\langle G|e^{i\mathcal{H}t_1}\Upsilon_1e^{i\mathcal{H}(t_2-t_1)}\Upsilon_2e^{-i\mathcal{H}t_2}|G\rangle \\ &\quad \pm i\theta(t_2 - t_1)\langle G|e^{i\mathcal{H}t_2}\Upsilon_2e^{i\mathcal{H}(t_2-t_1)}\Upsilon_1e^{-i\mathcal{H}t_1}|G\rangle.\end{aligned}\quad (2.53)$$

Ze względu jednak na fakt, że stan $|G\rangle$ jest stanem podstawowym i co za tym idzie stanem własnym pełnego hamiltonianu \mathcal{H} , to powyższe równanie można przepisać do postaci

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_2(t_1, t_2) &= -i\theta(t_1 - t_2)e^{iE_G(t_1-t_2)}\langle G|\Upsilon_1e^{i\mathcal{H}(t_2-t_1)}\Upsilon_2|G\rangle \\ &\quad \pm i\theta(t_2 - t_1)e^{iE_G(t_2-t_1)}\langle G|\Upsilon_2e^{i\mathcal{H}(t_2-t_1)}\Upsilon_1|G\rangle,\end{aligned}\quad (2.54)$$

gdzie E_G jest wartością własną hamiltonianu \mathcal{H} w stanie $|G\rangle$.

Równanie (2.54) w jawny sposób pokazuje, że dwupunktowa funkcja korelacji (2.52) zależy jedynie od różnicy argumentów czasowych. To oznacza, że jej transformata Fouriera

$$\mathcal{G}_2(p_1, p_2) = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 e^{-ip_1 t_1} e^{-ip_2 t_2} \mathcal{G}_2(t_1, t_2) \quad (2.55)$$

jest iloczynem funkcji jednej zmiennej i delty Diraca od sumy jej argumentów

$$\mathcal{G}_2(p_1, p_2) = \mathcal{G}_2(p_1)\delta(p_1 + p_2). \quad (2.56)$$

Przedstawione powyżej rozumowanie jest przejawem działania zasady zachowania energii w naszej teorii i ma przez to charakter bardzo ogólny. Opiera się ono jedynie na spostrzeżeniu, że hamiltonian \mathcal{H} nie jest jawną funkcją czasu i wykorzystaniu faktu, że stan podstawowy $|G\rangle$ jest jego stanem własnym. Całkowicie analogicznie można pokazać podobną własność dla dowolnej funkcji korelacji postaci (2.29). Oznacza to, że transformata Fouriera dowolnej funkcji korelacji \mathcal{G}_n jest iloczynem funkcji $n - 1$ zmiennych i jednej globalnej delty zachowania od sumy wszystkich jej argumentów, tzn.

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_n(p_1, \dots, p_n) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n e^{-ip_1 t_1} \cdots e^{-ip_n t_n} \mathcal{G}_n(t_1, \dots, t_n) \\ &= \mathcal{G}_n(p_1, \dots, p_{n-1})\delta(p_1 + \dots + p_n).\end{aligned}\quad (2.57)$$

Spostrzeżenie to wykorzystamy w dalszej części pracy przy prowadzeniu rachunku perturbacyjnego w dziedzinie częstości zamiast dziedzinie czasu.

⁹Górny znak stosujemy dla elektronów, które są fermionami, a dolny dla fotonów, które są bozonami.

Na zakończenie tego podpunktu warto podkreślić, że przedstawiona powyżej analiza nic nie mówi o strukturze funkcji $\mathcal{G}_n(p_1, \dots, p_{n-1})$. W wielu konkretnych sytuacjach może się okazać, że zawiera ona dodatkowe funkcje delta. Wynika to jednak zawsze z innych argumentów niż niezmienniczość teorii ze względu na przesunięcie w czasie.

2.5. Podstawowe twierdzenia kwantowej teorii pola

Wprowadzony przez nas nowy formalizm opisu układów dwupoziomowych w języku pól kwantowych bardzo różnił się od standardowego opisu w języku funkcji falowych. Może on się wydawać interesujący, bo daje nowe spojrzenie na dość proste zagadnienie opisu układu dwupoziomowego oddziałującego z zewnętrznym polem elektromagnetycznym. Do tej pory jednak formalizm ten nie przyniósł żadnych fizycznie interesujących rezultatów. Zmieniliśmy jedynie sposób opisu interesujących nas układów na opis przy pomocy wielopunktowych funkcji korelacji.

Ta fundamentalna zmiana opisu ma jednak bardzo praktyczne znaczenie, bo umożliwia stosowanie bardzo wyrafinowanych metod prowadzenia rachunku perturbacyjnego. Metod tych nie da się zastosować w starym sformułowaniu, gdyż twierdzenia matematyczne, na których się opierają wykorzystują bezpośrednio podstawowe związki jakie istnieją pomiędzy wielopunktowymi funkcjami korelacji. Przedstawię teraz dwa podstawowe twierdzenia, z których wynika całe dobrodziejstwo stosowania tego opisu. Są to bardzo uniwersalne twierdzenia, które stanowią podstawę wszystkich metod kwantowej teorii pola.

2.5.1. Twierdzenie Gell-Manna i Lowa

Jedną z najważniejszych konsekwencji stosowania opisu w języku chronologicznie uporządkowanych funkcji korelacji jest twierdzenie sformułowane w 1951 roku przez Gell-Manna i Lowa [Gel51]. Wyraża ono bezpośredni związek jaki istnieje pomiędzy funkcjami korelacji zbudowanymi z operatorów pola w obrazie Heisenberga (2.29), a odpowiadającymi im funkcjami korelacji zbudowanych z pól swobodnych. Związek ten wyraża się wzorem [Bia75, Bjo65, Fet71]

$$\langle G | \mathbb{T} \Upsilon_1(t_1) \cdots \Upsilon_n(t_n) | G \rangle = \frac{\langle g | \mathbb{T} \Upsilon_1(t_1) \cdots \Upsilon_n(t_n) e^{-i \int dt \mathcal{H}_I(t)} | g \rangle}{\langle g | \mathbb{T} e^{-i \int dt \mathcal{H}_I(t)} | g \rangle}, \quad (2.58)$$

gdzie tak jak ustaliliśmy $\Upsilon_i(t_i)$ i $\Upsilon_i(t_i)$ reprezentują dowolny operator pola odpowiednio w obrazie Heisenberga i obrazie Diraca. Występujący z prawej strony hamiltonian $\mathcal{H}_I(t)$ jest hamiltonianem oddziaływania w obrazie oddziaływania.

Zauważmy, że twierdzenie to jest sformułowane dla chronologicznie uporządkowanych funkcji korelacji. Nie można go zatem stosować (i nie ma on swojego odpowiednika) dla inaczej zdefiniowanych propagatorów (np. propagatorów opóźnionych lub przedwczesnych). Nie znane jest również tak mocne twierdzenie, które łączyłoby bezpośrednio ze sobą operatory pola w obydwu obrazach. Należy się tego spodziewać, bo funkcje korelacji, choć może czasami bardzo skomplikowane, w przeciwieństwie do operatorów pól kwantowych, są zwykłymi funkcjami zespolonymi wielu zmiennych.

Dokonując rozwinięcia funkcji wykładniczych stojących po prawej stronie równania (2.58) otrzymujemy¹⁰ iloraz dwóch nieskończonych sum kolejnych funkcji korelacji operatorów w teorii bez oddziaływań. W zasadzie nie ma żadnych przeszkód, poza trudnościami operacyjnymi, aby wyliczać te sumy rząd po rzędzie tak jak zrobiliśmy to w przypadku propagatorów swobodnych (2.36). Oczywiście w każdym kolejnym rzędzie funkcja korelacji, którą musimy wyznaczyć będzie się składała z większej liczby operatorów pól swobodnych. Z twierdzenia Gell-Manna i Lova wiemy jednak, że ten iloraz nieskończonych sum jest równy funkcji korelacji, która jest w centrum naszego zainteresowania. Tym samym dostajemy narzędzie, choć na razie jeszcze bardzo prymitywne, do wyliczania interesujących nas feynmanowskich funkcji korelacji rząd po rzędzie na podstawie znajomości tylko funkcji korelacji w teorii swobodnej.

2.5.2. Twierdzenie Wicka

Drugim bardzo ważnym twierdzeniem, z którego będziemy korzystali jest twierdzenie Wicka [Wic50]. Twierdzenie Wicka jest tożsamością operatorową, która podaje bezpośredni związek pomiędzy iloczynem chronologicznym \mathbb{T} , a tzw. iloczynem normalnym \mathbb{N} operatorów pola w obrazie oddziaływania. Symbolicznie jego treść można zapisać następująco

$$\begin{aligned} \mathbb{T} \Upsilon_1 \Upsilon_2 \cdots \Upsilon_n &= \mathbb{N} \Upsilon_1 \Upsilon_2 \cdots \Upsilon_n \\ &+ \sum \mathbb{N} \overline{\Upsilon_1 \Upsilon_2} \cdots \Upsilon_n \\ &+ \sum \mathbb{N} \overline{\Upsilon_1 \Upsilon_2 \Upsilon_3 \Upsilon_4} \cdots \Upsilon_n \\ &\vdots \\ &+ \sum \overline{\Upsilon_1 \Upsilon_2 \Upsilon_3 \Upsilon_4} \cdots \overline{\Upsilon_{n-1} \Upsilon_n}. \end{aligned}$$

W powyższym wyrażeniu sumowania odbywają się po wszystkich możliwych zwięzieniach ($\overline{\Upsilon_i \Upsilon_j}$) par operatorów – w drugiej linii tylko jedna para operatorów jest zwięzona, w trzeciej dwie pary itd. Iloczyn normalny dowolnej liczby operatorów \mathbb{N} ma tą własność, że jego wartość oczekiwana w stanie podstawowym $|g\rangle$ jest równa zero. Zwięzienie dwóch operatorów jest natomiast równe

¹⁰Tak powstające szeregi nazywa się ze względów historycznych szeregami Dysona [Dys49].

wartości oczekiwanej ich iloczynu chronologicznego w tym stanie

$$\langle g | \mathbb{N} \Upsilon_i \Upsilon_j | g \rangle = 0, \quad \overline{\Upsilon_i \Upsilon_j} = \langle g | \mathbb{T} \Upsilon_i \Upsilon_j | g \rangle. \quad (2.59)$$

Twierdzenie to niesie bardzo poważne konsekwencje, które umożliwiają radykalnie uprościć rachunek zaburzeń. Wynika bowiem z niego, że wartość oczekiwaną chronologicznego iloczynu dowolnej liczby operatorów pola w teorii bez oddziaływań w stanie podstawowym $|g\rangle$ można zamienić na skończoną sumę iloczynów swobodnych propagatorów feynmanowskich (2.36), których dokładną postać wyliczyliśmy w poprzednim punkcie. Ścisłej mówiąc wprost z twierdzenia Wicka wynika, że

$$\langle g | \mathbb{T} \Upsilon_1 \cdots \Upsilon_n | g \rangle = \sum_{\sigma \in S_n} (-1)^\kappa \langle g | \mathbb{T} \Upsilon_{\sigma_1} \Upsilon_{\sigma_2} | g \rangle \cdots \langle g | \mathbb{T} \Upsilon_{\sigma_{n-1}} \Upsilon_{\sigma_n} | g \rangle. \quad (2.60)$$

W powyższym wzorze sumowanie odbywa się po wszystkich możliwych permutacjach σ zbioru n -elementowego, a κ jest liczbą przestawień fermionowych operatorów pola potrzebnych do uzyskania wyjściowej kolejności. Szczegółowy dowód twierdzenia Wicka oraz przytoczonej jego konsekwencji można znaleźć w wielu pozycjach (np. [Bia75, Fet71, Itz80]) i dlatego dowodu nie będziemy tutaj podawali. Warto niemniej podkreślić, że w zwyczajowym podejściu formułuje się je dla wartości oczekiwanych względem próżni, czyli stanu, na którym zerują się wszystkie operatory anihilacji. W naszym przypadku byłby to zatem stan $|N, \emptyset\rangle$, a nie $|g, \emptyset\rangle$. Okazuje się jednak, że twierdzenie Wicka można sformułować względem dowolnego stanu fermionowego. Wynika to bezpośrednio z faktu, że operatory pola fermionowego spełniają relacje antykomutacyjne i tym samym nie istnieje matematyczne rozróżnienie pomiędzy operatorami kreacji, a anihilacji elektronu w poszczególnych stanach. Nazywając operator anihilacji elektronu w stanie dolnym ψ_\downarrow operatorem kreacji antyelektronu w stanie dolnym $\tilde{\psi}_\downarrow^\dagger$, a operator kreacji elektronu ψ_\downarrow^\dagger operatorem anihilacji antyelektronu $\tilde{\psi}_\downarrow$ relacje antykomutacyjne zostaną zachowane, a stan $|g, \emptyset\rangle$ po takiej zmianie nazw będzie anihilowany przez wszystkie operatory anihilacji (będzie stanem próżni dla takich operatorów). Tym samym również względem stanu $|g, \emptyset\rangle$ można sformułować twierdzenie Wicka¹¹.

Przedstawione powyżej rozumowanie, które pozwala zastosować twierdzenie Wicka względem dowolnego stanu fermionowego ma swój odpowiednik w pełnej elektrodynamice kwantowej. Pierwsze historyczne sformułowanie relatywistycznej kwantowej teorii elektronu podane przez Diraca w 1928 roku [Dir28] przewidywało możliwość zajmowania przez elektrony stanów o ujemnej energii. Aby zachować zgodność teorii z faktami doświadczalnymi Dirac postawił hipotezę, że w stanie podstawowym wszystkie stany energetyczne o ujemnej energii są zajęte (tzw. „morze Diraca”) i sformułował teorię

¹¹Możliwość sformułowania twierdzenia Wicka względem stanu $|g, \emptyset\rangle$ jest bardzo istotna, gdyż twierdzenie Gell-Manna i Lowa zadaje związek pomiędzy funkcjami korelacji obliczalnymi w stanach podstawowych $|G\rangle$ i $|g, \emptyset\rangle$.

elektronów i dziur. We współczesnym sformułowaniu elektrodynamiki kwantowej wykonuje się analogiczną do opisanej powyżej zamianę operatorów kreacji i anihilacji elektronów o ujemnej energii na odpowiednie operatory anihilacji i kreacji pozytonów. Tym samym stan podstawowy teorii staje się jednocześnie stanem próżni elektronowo-pozytonowej (zerują się na nim wszystkie operatory anihilacji).

Na zakończenie podkreślmy, że podobnego rozumowania nie można przeprowadzić dla stanów pola elektromagnetycznego. Wynika to bezpośrednio z faktu, że w tym przypadku operatory pola spełniają reguły komutacyjne i tym samym nie możliwości zamiany operatorów kreacji z operatorami anihilacji bez naruszenia tych reguł.

Jak widzimy wykorzystanie twierdzenia Gell-Manna i Lova oraz twierdzenia Wicka daje możliwość (przynajmniej teoretycznie) wyliczania z dowolną dokładnością dowolnych funkcji korelacji, które są postaci (2.29) i tym samym przewidywania wartości oczekiwanych wielkości istotnych fizycznie. Do wyznaczania tych wielkości nie potrzebujemy nic więcej poza propagatorami Feynmana swobodnych pól (2.36) i hamiltonianem oddziaływania (2.27). Ostatnim krokiem pozostaje usystematyzowanie rachunku perturbacyjnego tak, aby nie trzeba było za każdym razem rozwijać równania (2.58) w szereg i stosować związek (2.60) wynikającego z twierdzenia Wicka. Takie usystematyzowanie zostało już jednak również wypracowane na potrzeby bardziej skomplikowanych kwantowych teorii pola.

2.6. Reguły Feynmana

Z opisanych powyżej twierdzeń kwantowej teorii pola wynika, że każda wielopunktowa funkcja korelacji \mathcal{G} w teorii z oddziaływaniami daje się wyrazić w kolejnych krokach rachunku zaburzeń jako pewna kombinatoryczna suma iloczynów *dwupunktowych* funkcji korelacji odpowiednich pól w obrazie oddziaływania. To spostrzeżenie bardzo upraszcza prowadzenie systematycznego rachunku perturbacyjnego, bo kolejne wyrażenia w dowolnym rzędzie tego rachunku składają się zawsze z tych samych, ustawionych w odpowiedniej kolejności, elementów – propagatorów Feynmana S_F i D_F i wyrażeń typu $V_i(k) = g(k)\sigma_i$ wynikających z hamiltonianu oddziaływania \mathcal{H}_I , które będziemy nazywać *wierzchołkami oddziaływania*.

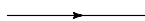
Z tej analizy wynika, że cały problem znalezienia odpowiedniego wyrażenia w danym rzędzie rachunku zaburzeń sprowadza się jedynie do wykonania rozwinięcia wyrażenia (2.58) w szereg względem hamiltonianu oddziaływania i wykonania odpowiednich zwiężeń zgodnie z twierdzeniem Wicka. Cała ta procedura jest bardzo klarowna lecz niestety bardzo żmudna i utrudniająca prowadzenie efektywnych obliczeń. W roku 1949 Richard Feynman [Fey49] opracował metodę diagramatyczną, która pozwala znacznie uprościć rachunki. Metoda ta opiera się na spostrzeżeniu, że każde wyrażenie rachunku perturbacyjnego, dowolnej funkcji korelacji daje się prosto skonstruować jeśli będzie się stosowało do kilku prostych reguł historycznie nazwanych

regułami Feynmana. Reguły Feynmana składają się z dwóch kroków – reguł rysowania diagramów i reguł przypisywania im odpowiednich wyrażeń matematycznych. Przedstawię teraz reguły Feynmana dla naszej teorii układów dwupoziomowych oddziałujących z kwantowym polem elektromagnetycznym.

2.6.1. Reguły rysowania diagramów

Pierwszym krokiem do przeprowadzenia obliczeń w rachunku zaburzeń jest narysowanie wszystkich diagramów zgodnie z zasadami przedstawionymi poniżej. Podkreślmy jeszcze raz, że są one bezpośrednimi konsekwencjami twierdzenia Gell-Manna i Lova oraz twierdzenia Wicka.

- Każdy propagator elektronu iS_F reprezentowany jest przez odcinek o określonej orientacji



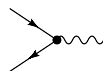
- Każdy propagator fotonu iD_F reprezentowany jest przez linię falowaną bez określonej orientacji



- Każdy wierzchołek oddziaływania $-iV$ reprezentowany jest przez kropkę, w której spotykają się linie propagatorów



- Ze względu na postać hamiltonianu oddziaływania, który sprzęga dwa operatory pola fermionowego z jednym operatorem pola elektromagnetycznego w wierzchołku oddziaływania zawsze spotykają się dwie linie elektronowe (jedna wchodząca, druga wychodząca) oraz linia fotonowa



- Diagram zawierający

- i wychodzących linii elektronowych,
- j wchodzących linii elektronowych,
- k linii fotonowych, które wchodzą lub wychodzą z diagramu,
- n wierzchołków

jest jednym z wkładów do wyrażenia

$$\langle g | \mathbb{T} \Psi_{\alpha_1}(t_1) \cdots \Psi_{\alpha_i}(t_i) \Psi_{\alpha'_1}^\dagger(t'_1) \cdots \Psi_{\alpha'_j}^\dagger(t'_j) \Phi(t''_1) \cdots \Phi(t''_k) e^{-i \int dt \mathcal{H}_I(t)} | g \rangle \quad (2.61)$$

w n -tym rzędzie rachunku zaburzeń.

- Permutacje po różnych zwężeniach wynikające z twierdzenia Wicka w tym języku oznaczają permutowanie po różnych, nierównoważnych sposobach wewnętrznego połączenia w diagramie¹².
- Dla uproszczenia, wszędzie tam gdzie nie powoduje to nieporozumień, nie rysuje się kropek reprezentujących wierzchołki oddziaływania.

Stosując powyższe reguły rysowania diagramów łatwo sprawdzić, że np. wyrażenie

$$\langle g | \mathbb{T} \Psi_\alpha(t_1) \Psi_\beta^\dagger(t_2) e^{-i \int dt \mathcal{H}_1(t)} | g \rangle$$

które zawiera tylko jedną parę linii elektronowych wchodzących i wychodzących ma następujące rozwinięcie w diagramy Feynmana¹³

$$\begin{aligned} & \langle g | \mathbb{T} \Psi_\alpha(t_1) \Psi_\beta^\dagger(t_2) e^{-i \int dt \mathcal{H}_1(t)} | g \rangle \\ &= \text{---} \quad (0 \text{ rząd}) \\ &+ \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \quad (2 \text{ rząd}) \\ &+ \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \\ &+ \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \\ &+ \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \\ &+ \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \quad (4 \text{ rząd}) \\ &+ \dots \quad (\text{Wyższe rzędy}) \end{aligned} \tag{2.62}$$

¹²Z twierdzenia Wicka wynika, że tak na prawdę powinniśmy permutować nie tylko po wszystkich rozróżnialnych połączeniach wewnątrz diagramu, ale również po różnych indeksach nadanych wierzchołkom. Jednak wszystkie diagramy, które różnią się tylko permutacją po nazwach wierzchołków dają dokładnie taki sam wkład w rachunku zaburzeń. Uwzględnienie tylko jednego z tych diagramów jest konsekwencją nie brania pod uwagę czynnika $n!$ pojawiającego się w n -tym rzędzie rachunku zaburzeń na skutek rozwinięcia funkcji wykładniczej w twierdzeniu Gell-Manna i Lowa.

¹³Z przedstawionych reguł rysowania diagramów wynika, że w rozwinięciu akurat tego wyrażenia występują tylko diagramy z parzystą liczbą wierzchołków.

Jak widać rozwinięcie już w pierwszych dwóch nieznikających rzędach rachunku zaburzeń prowadzi do bardzo wielu diagramów. W następnym punkcie pokażemy jednak, że przy rozważaniu problemów fizycznych większości z nich nie trzeba brać w ogóle pod uwagę. Zanim jednak przejdziemy do tego problemu podajmy jeszcze zasady jakimi należy się kierować, aby danemu diagramowi przypisać odpowiadające mu wyrażenia algebraiczne.

2.6.2. Reguły obliczania diagramów

Każdy diagram Feynmana reprezentuje pewne wyrażenie algebraiczne, które odpowiada danemu członowi w rozwinięciu perturbacyjnym. Wyrażenie to jest bezpośrednią konsekwencją twierdzenia Gell-Manna i Lowa oraz twierdzenia Wicka. Rachunek zaburzeń można prowadzić zarówno w dziedzinie czasu (co bezpośrednio wynika z rozwinięcia (2.58)) jak i w dziedzinie częstości. Ten drugi sposób wymaga wykonania transformaty Fouriera wszystkich funkcji korelacji po wszystkich zmiennych czasowych. Wybór sposobu prowadzenia rachunku zaburzeń oczywiście nie zmienia fizycznych wniosków jakie będą z niego płynęły. Ze względu na poczynione w punkcie 2.4.2. obserwacje dotyczące konsekwencji symetrii przesunięcia w czasie łatwiej jest jednak obliczać poszczególne diagramy w dziedzinie częstości i od tej pory skupimy się właśnie na tym sposobie. Ze względu na wspomnianą symetrię, w każdym wierzchołku oddziaływania będzie spełniona zasada zachowania energii.

Reguły przypisywania poszczególnym diagramom odpowiednich wyrażeń algebraicznych w dziedzinie częstości są następujące:

- każdej linii fotonowej pomiędzy dwoma wierzchołkami oddziaływania przypisać wyrażenie

$$iD_F(p_0) = i \frac{\delta_{ij} \delta(k - k')}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon},$$

- każdej linii fermionowej pomiędzy dwoma wierzchołkami oddziaływania przypisać wyrażenie

$$iS_F(p_0) = i \frac{\sigma_z}{p_0 \sigma_z - m + i\epsilon},$$

- każdemu wierzchołkowi oddziaływania należy przypisać wyrażenie

$$-iV_i(k) = -ig(k)\sigma_i,$$

- w każdym wierzchołku obowiązuje zasada zachowania energii co jest odzwierciedlone odpowiednią deltą zachowania częstości dla propagatorów wchodzących i wychodzących z wierzchołka,
- macierze 2×2 odpowiadające propagatorom fermionowym należy mnożyć w kolejności wskazywanej przez kierunek strzałek linii fermionowych,

$$\begin{aligned}
\begin{array}{c} k \qquad k_0 \qquad k' \\ \text{~~~~~} \\ i \qquad \qquad \qquad j \end{array} &= iD_{Fij}(k, k', k_0) = i \frac{\delta_{ij} \delta(k-k')}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon} \\
\begin{array}{c} \longrightarrow \\ p_0 \end{array} &= iS_F(p_0) = i \frac{\sigma_z}{\sigma_z p_0 - m + i\epsilon} \\
\begin{array}{c} \text{~~~~~} \\ k \\ \bullet \\ \text{~~~~~} \\ i \end{array} &= -ig(k)\sigma_i
\end{aligned}$$

Rysunek 2.2: Reguły Feynmana w dziedzinie częstości. W powyższych wzorach wypisano w sposób jawny wszystkie zmienne z wyjątkiem wskaźników macierzowych dla propagatora fermionowego.

- każda zamknięta pętla fermionowa skutkuje wykonaniem śladu po indeksach macierzowych oraz pomnożeniem wyrażenia przez -1 (jest to konsekwencja fermionowej natury operatorów pola).

Otrzymane w ten sposób otrzymane wyrażenie odcałkować po wszystkich wewnętrznych pędach i częstościach oraz wykonać sumowanie po wszystkich wewnętrznych wskaźnikach macierzowych (zarówno fotonowych jak i fermionowych).

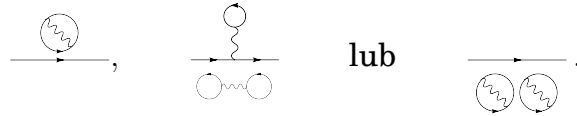
2.6.3. Analiza spójności diagramów

Metoda diagramów Feynmana wydaje się bardzo prosta i skuteczna w wyznaczaniu wkładów w kolejnych rzędach rachunku zaburzeń. Bardzo ważne jest zatem przestudiowanie własności tych diagramów pod względem ich złożoności i w miarę potrzeby rozłożenie ich na prostsze części. Jak widać z przykładowego rozwinięcia diagramatycznego (2.62) tylko do czwartego rzędu rachunku zaburzeń pojawia się bardzo wiele różnych diagramów. Okazuje się jednak, że nie wszystkie z nich są fizycznie interesujące. W praktyce oznacza to, że nie musimy znać wyrażen analitycznych dla wszystkich z nich, aby odpowiadać na fizyczne pytania. Aby wyjaśnić ten problem podzielimy diagramy na tzw. *spójne* i *niespójne*.

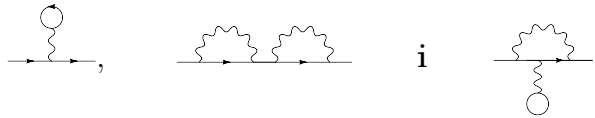
Diagramy spójne i niespójne

Diagramem *niespójnym* będziemy nazywali każdy taki diagram, który składa się przynajmniej z dwóch części, które nie są ze sobą połączone żadną linią fotonową ani fermionową i przynajmniej jedna z tych części nie zawiera żadnej linii wchodzącej ani wychodzącej. Wszystkie inne diagramy będziemy nazywali *spójnymi*. Diagramami niespójnymi są np. następujące diagramy wystę-

pujące w rozwinięciu (2.62)



Przykładami diagramów spójnych z tego rozwinięcia są natomiast diagramy



Zauważmy, że diagramy niespójne mają taką własność, że odpowiadające im wyrażenia algebraiczne są iloczynami wyrażeń dla poszczególnych części spójnych, z których się składają. Jest tak dlatego, że rozdzielone części spójne nie mają żadnych wspólnych zmiennych, po których odbywałoby się sumowanie lub całkowanie wynikające z reguł Feynmana. Własność tą możemy zapisać w sposób symboliczny wykorzystując części spójne danego diagramu. Np. dla diagramu pierwszego z naszego przykładu rozkład ten możemy zapisać w następujący sposób

$$\text{---} \circlearrowleft \text{---} = \text{---} \times \text{---} \circlearrowleft \text{---} \quad (2.63a)$$

Dla diagramu trzeciego ma on natomiast postać

$$\text{---} \circlearrowleft \circlearrowleft \text{---} = \text{---} \times \left(\text{---} \circlearrowleft \text{---} \right) = \text{---} \times \text{---} \circlearrowleft \text{---} \times \text{---} \circlearrowleft \text{---} \quad (2.63b)$$

Obserwacja, że diagramy niespójne faktoryzują się na iloczyny części spójnych ma bardzo praktyczne znaczenie. W konsekwencji oznacza ona bowiem, że rozwinięcie perturbacyjne dowolnego wyrażenia typu

$$\langle g | \mathbb{T} \Upsilon_1(t_1) \cdots \Upsilon_n(t_n) e^{-i \int dt \mathcal{H}_I(t)} | g \rangle \quad (2.64)$$

daje się zapisać jako iloczyn sumy wszystkich występujących w rozwinięciu diagramów spójnych i sumy pozostałych diagramów, którą nazywa się *częścią próżniową*. Łatwo sprawdzić, że dla rozważanego przez nas przykładu (2.62) rozkład ten ma postać

$$\begin{aligned} & \langle g | \mathbb{T} \Psi(t_1) \Psi^\dagger(t_2) e^{-i \int dt \mathcal{H}_I(t)} | g \rangle \\ &= \text{---} + \text{---} \circlearrowleft \text{---} + \text{---} \circlearrowright \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \dots \\ &= (1 + \text{---} \circlearrowleft \text{---} + \text{---} \circlearrowright \text{---} + \dots) \\ & \quad \times (\text{---} + \text{---} \circlearrowright \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \dots). \end{aligned} \quad (2.65)$$

Podobny rozkład zachodzi dla dowolnego wyrażenia typu (2.64). Suma stojąca w pierwszym nawiasie jest nazywana częścią próżniową, gdyż łatwo sprawdzić, że jest ona rozwinięciem perturbacyjnym wyrażenia

$$\langle g | \mathbb{T} e^{-i \int dt \mathcal{H}_I(t)} | g \rangle = 1 + \text{diagram} + \text{diagram} + \dots, \quad (2.66)$$

które opisuje amplitudę przejścia próżnia-próżnia i pojawia się w rozwinięciu każdego wyrażenia (2.64).

Warto w tym miejscu zaznaczyć, że wyrażeniom typu (2.64) nie można nadać bezpośredniej interpretacji fizycznej, bo są to wyrażenia składające się z pól w teorii swobodnej. Stanowią one jednak bardzo ważny składnik pełnej teorii, co wynika bezpośrednio z twierdzenia Gell-Manna i Lowa. Jak pamiętamy twierdzenie to zadaje związek pomiędzy fizycznie ważnymi funkcjami korelacji (2.29) zbudowanymi z pól w obrazie Heisenberga, a wyrażeniami typu (2.64) i (2.66) zbudowanymi z pól w obrazie oddziaływania

$$\langle G | \mathbb{T} \Upsilon_1(t_1) \dots \Upsilon_n(t_n) | G \rangle = \frac{\langle g | \mathbb{T} \Upsilon_1(t_1) \dots \Upsilon_n(t_n) e^{-i \int dt \mathcal{H}_I(t)} | g \rangle}{\langle g | \mathbb{T} e^{-i \int dt \mathcal{H}_I(t)} | g \rangle}. \quad (2.58)$$

Z powyższego wzoru oraz wcześniejszej analizy diagramów niespójnych jasno wynika, że każda fizyczna funkcja korelacji (2.29) jest perturbacyjną sumą odpowiadających jej diagramów spójnych z teorii bez oddziaływań. To oznacza, że np. propagator oddziałującego pola elektronowego jest następującą sumą

$$\begin{aligned} \text{diagram} &= \langle G | \mathbb{T} \Psi(t_1) \Psi^\dagger(t_2) | G \rangle = \frac{\langle g | \mathbb{T} \Psi(t_1) \Psi^\dagger(t_2) e^{-i \int dt \mathcal{H}_I(t)} | g \rangle}{\langle g | \mathbb{T} e^{-i \int dt \mathcal{H}_I(t)} | g \rangle} \\ &= \text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram} + \dots \end{aligned} \quad (2.67a)$$

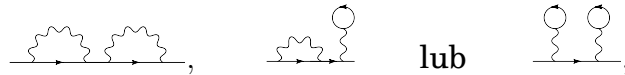
Analogiczna suma dla propagatora pola fotonowego ma postać

$$\begin{aligned} \text{diagram} &= \langle G | \mathbb{T} \Phi_i(k_1, t_1) \Phi_j(k_2, t_2) | G \rangle = \frac{\langle g | \mathbb{T} \Phi_i(k_1, t_1) \Phi_j(k_2, t_2) e^{-i \int dt \mathcal{H}_I(t)} | g \rangle}{\langle g | \mathbb{T} e^{-i \int dt \mathcal{H}_I(t)} | g \rangle} \\ &= \text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram} + \dots \end{aligned} \quad (2.67b)$$

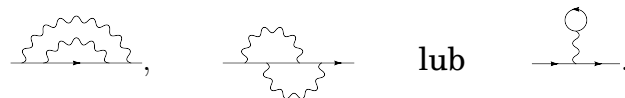
Diagramy mocno i słabo spójne

Diagramy spójne, które jak wykazaliśmy przed chwilą mają znaczenie przy wyliczaniu fizycznie ważnych wielkości można podzielić na dwie rozłączne klasy – diagramy mocno i słabo spójne. Diagramami *słabo spójnymi* będziemy

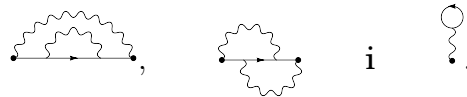
nazywali takie diagramy spójne, które można rozdzielić przez przecięcie jednej linii fotonowej lub elektronowej na dwie części, z których każda będzie zawierała przynajmniej jedną linię zewnętrzną wchodzącą lub wychodzącą do diagramu. Wszystkie inne diagramy spójne, których nie da się tak podzielić nazywać będziemy diagramami *mocno spójnymi*. Dodatkowo będziemy nazywali *częścią mocno spójną* diagramu taki diagram, który powstaje z wyjściowego po usunięciu wszystkich zewnętrznych linii fotonowych i fermionowych. Wśród diagramów spójnych występujących w rozwinięciu (2.62) słabo spójnymi są np.



a mocno spójnymi są m.in.



Zgodnie z definicją częściami mocno spójnymi powyższych diagramów są odpowiednio diagramy



Okazuje się, że szereg perturbacyjny każdej funkcji korelacji typu (2.29) daje się przedstawić jako szereg diagramów składających się wyłącznie z części mocno spójnych połączonych między sobą liniami fotonowymi lub fermionowymi. Łatwo pokazać jak wygląda ten szereg dla dwóch najważniejszych funkcji korelacji – propagatorów Feynmana dla pola elektronowego i fotonowego. Rozważmy w tym celu sumę wszystkich mocno spójnych części diagramów, które mają jedną wchodzącą i jedną wychodzącą linię elektronową

$$\square = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \dots \quad (2.68)$$

Z postaci szeregu (2.67a) widać, że daje się on wtedy przedstawić w bardzo prosty sposób

$$\Rightarrow = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots \quad (2.69)$$

Jeśli natomiast rozważymy sumę wszystkich mocno spójnych części diagramów, które mają dwie zewnętrzne linie fotonowe

$$\text{diagram 1} = \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \dots \quad (2.70)$$

to w analogiczny sposób możemy przedstawić szereg perturbacyjny dla propagatora pola fotonowego

$$\text{diagram 1} = \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \dots \quad (2.71)$$

Na zakończenie tego punktu zauważmy jeszcze, że wykorzystując rekurencyjność wzorów symbolicznych (2.69) i (2.71) można je zapisać w prostszej postaci

$$\Rightarrow\Rightarrow = \longrightarrow + \longrightarrow \square \Rightarrow, \quad (2.72a)$$

$$\approx\approx\approx = \approx\approx\approx + \approx\approx\approx \bigcirc \approx\approx\approx. \quad (2.72b)$$

Powyższe wzory wyrażają pewien fundamentalny związek jaki istnieje pomiędzy propagatorami w pełnej teorii, a propagatorami w teorii swobodnej. Przedstawiony powyżej rachunek, który prowadzi do tego związku opiera się na argumentach perturbacyjnych. Okazuje się jednak, że można go udowodnić bezpośrednio zupełnie nie odwołując się do rachunku zaburzeń. Dowód ich słuszności przedstawiony jest w następnym punkcie.

2.7. Związek podstawowy pomiędzy propagatorami

W poprzednim punkcie pokazaliśmy, że na mocy twierdzeń Gell-Manna i Lowa oraz Wicka, każdą wielopunktową funkcję korelacji dla pól w obrazie Heisenberga można perturbacyjnie wyznaczyć znając jedynie dwupunktowe funkcje Greena (propagatory) pól nieoddziałujących. To w prosty sposób prowadziło do rachunku diagramatycznego Feynmana i dało praktyczne narzędzie do znajdowania każdej z funkcji korelacji (2.29) z dowolną dokładnością. Głębsza analiza spójności diagramów w kolejnych rzędach rachunku zaburzeń doprowadziła nas do fundamentalnego związku pomiędzy propagatorami (2.72). Okazuje się jednak, że związek ten bezpośrednio wynika z równań dynamiki (2.22) oraz definicji propagatorów (2.30) i nie jest w związku z tym wynikiem rachunku zaburzeń. Co za tym idzie nie ma żadnych matematycznych wątpliwości co do jego słuszności. Udowodnimy teraz te związki.

2.7.1. Propagatory swobodne jako funkcje Greena

Na początku pokażmy, że propagatory pól swobodnych $iS_F(t, t')$ i $iD_F(k, k', t, t')$ są funkcjami Greena dla operatorów różniczkowych odpowiednio $i\partial_t - m_0\sigma_z$ oraz $\partial_t^2 + k^2$. W tym celu należy wykorzystać bezpośrednio definicję propagatorów (2.36) oraz równania dynamiki (2.24). Mamy wtedy dla propagatora swobodnego elektronu

$$\begin{aligned} (i\partial_t - m_0\sigma_z)_{\alpha\gamma} iS_{F\gamma\beta}(t, t') &= (i\partial_t - m_0\sigma_z)_{\alpha\gamma} \langle g | \mathbb{T} \Psi_\gamma(t) \Psi_\beta^\dagger(t') | g \rangle \\ &= \delta(t - t') \delta_{\alpha\gamma} \langle g | \left\{ \Psi_\gamma(t), \Psi_\beta^\dagger(t') \right\} | g \rangle \\ &\quad + \underbrace{\langle g | \mathbb{T} (i\partial_t - m_0\sigma_z)_{\alpha\gamma} \Psi_\gamma(t) \Psi_\beta^\dagger(t') | g \rangle}_0 \\ &= \delta(t - t') \delta_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (2.73)$$

Analogicznie możemy pokazać podobną zależność dla propagatora pola fotonowego

$$\begin{aligned}
(\partial_t^2 + k^2) iD_{Fij}(k, k', t, t') &= (\partial_t^2 + k^2) \langle g | \mathbb{T} \Phi_i(k, t) \Phi_j(k', t') | g \rangle \\
&= \delta(t - t') \langle g | \left[\dot{\Phi}_i(k, t), \Phi_j(k', t') \right] | g \rangle \\
&\quad + \langle g | \mathbb{T} \underbrace{(\partial_t^2 + k^2) \Phi_i(k, t) \Phi_j(k', t')}_0 | g \rangle \\
&= -\delta(t - t') \delta(k - k') \delta_{ij}. \tag{2.74}
\end{aligned}$$

Z przeprowadzonej analizy wynika zatem, że propagatory pól swobodnych są rzeczywiście funkcjami Greena dla operatorów różniczkowych, które zadają dynamikę tych pól. W tym miejscu warto podkreślić, że wynik ten nie jest tak trywialny jak mogłoby się wydawać. Pola są bowiem w naszym przypadku operatorami kwantowo-mechanicznymi działającymi w przestrzeni Hilberta stanów kwantowych, a propagatory jedynie zwykłymi funkcjami zespolonymi. Tylko dzięki temu, że równania dynamiki dla operatorów pól (2.24) są *beźródłowe* udało nam się uzyskać powyższe związki. Tym samym należy się spodziewać, że w przypadku pól w teorii z oddziaływaniami nowe związki nie będą tylko zwykłą modyfikacją tych uzyskanych dla pól swobodnych. W tym przypadku bowiem operatory pola spełniają równania z *źródłami*, które jak widać ze wzorów (2.22) mają charakter czysto operatorowy.

2.7.2. Związek między propagatorami elektronowymi

Jako pierwszy zbadajmy propagator elektronu (2.30a). Działając na niego operatorem różniczkowym $i\partial_t - m_0\sigma_z$ zadającym swobodną dynamikę pola elektronowego i wykorzystując reguły antykomutacyjne (2.21a) otrzymujemy

$$(i\partial_t - m_0\sigma_z)_{\alpha\gamma} i\mathcal{S}_{F\gamma\beta}(t, t') = \delta(t - t') \delta_{\alpha\beta} + \langle G | \mathbb{T} (i\partial_t - m_0\sigma_z)_{\alpha\gamma} \Psi_\gamma(t) \Psi_\beta^\dagger(t') | G \rangle. \tag{2.75}$$

Dodatkowo możemy wykorzystać równanie ewolucji (2.22a), aby usunąć działanie operatora różniczkowego pod iloczynem chronologicznym. Otrzymamy wtedy

$$\begin{aligned}
(i\partial_t - m_0\sigma_z)_{\alpha\gamma} i\mathcal{S}_{F\gamma\beta}(t, t') &= \\
&\delta(t - t') \delta_{\alpha\beta} + \int_0^\infty dk g(k) \langle G | \mathbb{T} \Phi(k, t) \cdot \sigma_{\alpha\gamma} \Psi_\gamma(t) \Psi_\beta^\dagger(t') | G \rangle. \tag{2.76}
\end{aligned}$$

Z powyższego wzoru wynika, że propagator Feynmana dla elektronu wyraża się w nietrywialny sposób przez trzypunktową funkcję Greena. Zauważmy jednak, że ten obiekt daje się wyrazić przez zdefiniowaną przez nas wcześniej funkcję wierzchołkową zgodnie ze wzorem (2.33)

$$(i\partial_t - m_0\sigma_z) i\mathcal{S}_F(t, t') = \delta(t - t') + \int_{-\infty}^\infty dt_1 \Sigma(t, t_1) \mathcal{S}_F(t_1, t'), \tag{2.77}$$

gdzie wprowadziliśmy oznaczenie Σ dla następującej wielkości

$$\Sigma(t, t_1) = \sum_j \int_0^\infty dk g(k) \int_0^\infty dk' g(k') \int_{-\infty}^\infty dt_2 \int_{-\infty}^\infty dt_3 \mathcal{D}_{Fij}(k, t, k', t_2) \mathcal{S}_F(t, t_3) \Gamma_j(t_2, t_3, t_1). \quad (2.78)$$

W powyższym wzorze indeksy fermionowe nie zostały napisane w sposób jawny, aby skrócić notację. Nie powinno to jednak prowadzić do żadnych nieporozumień. Symbolicznie powyższy związek można przedstawić w postaci¹⁴

$$-i\Sigma(t, t_1) = \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \square \\ | \\ \bullet \\ t_1 \end{array} = \begin{array}{c} t_2 \\ \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \\ t_3 \end{array} \quad (2.79)$$

Ostatnim krokiem w naszej analizie jest wykorzystanie faktu, że swobodny propagator iS_F jest funkcją Greena dla operatora różniczkowego $i\partial_t - m_0\sigma_z$. Możemy go zatem wykorzystać do odcałkowania wzoru (2.77). Otrzymamy wtedy

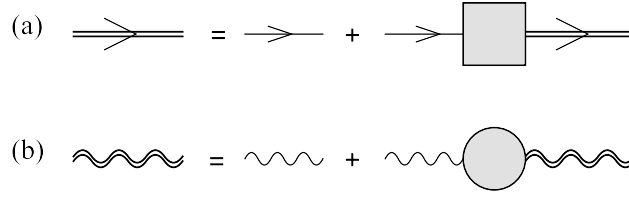
$$S_F(t, t') = S_F(t, t') + \int_{-\infty}^\infty dt'' \int_{-\infty}^\infty dt_1 S_F(t, t'') \Sigma(t'', t_1) S_F(t_1, t'). \quad (2.80)$$

Równanie to zadaje bezpośredni związek pomiędzy propagatorami elektronu w teorii z i bez oddziaływań. Przy jego otrzymywaniu wykorzystaliśmy jedynie równania ewolucji w obrazie Heisenberga oraz ogólne własności feynmanowskich funkcji korelacji. Nie jest on zatem wynikiem rachunku perturbacyjnego, a bezpośrednim wnioskiem płynącym ze sformułowanej przez nas teorii. Jak widzimy wielkość Σ pełni kluczową rolę w opisie propagatora pola elektronowego. Historycznie nazywa się ją *funkcją energii własnej elektronu* i tak będziemy ją nazywali w dalszej części pracy.

Na zakończenie tej analizy sprawdzimy jeszcze jaka jest postać tego wzoru w dziedzinie częstości. Jak już wcześniej wspominaliśmy propagator wierzchołkowy (2.32), tak jak każda inna feynmanowska funkcja korelacji, zależy jedynie od różnic jej argumentów czasowych. Z tego wynika natychmiast, że również funkcja energii własnej Σ ma tę własność i tym samym ma on bardzo proste przedstawienie fourierowskie

$$\Sigma(t_1, t_2) = \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} e^{-ip_0(t_1-t_2)} \Sigma(p_0). \quad (2.81)$$

¹⁴Ze względu na fakt, że funkcja wierzchołkowa Γ jest funkcją zależną od trzech chwil czasu naturalną reprezentacją dla niej w diagramach Feynmana jest trójkąt. Dla uniknięcia nieporozumień będziemy w sposób jawny oznaczali go symbolem $i\Gamma$.



Rysunek 2.3: Związki podstawowe między propagatorami. Powyższe związki są bezpośrednimi konsekwencjami definicji propagatorów w obrazie Heisenberga i oddziaływania oraz równań dynamiki. Nie są więc wynikiem rachunku zaburzeń.

To sprawia, że w dziedzinie częstości wzór (2.80) ma wyjątkowo prostą postać i zawiera jedynie iloczyny macierzy 2×2 we wskaźnikach spinowych

$$\mathcal{S}_F(p_0) = S_F(p_0) + S_F(p_0)\Sigma(p_0)\mathcal{S}_F(p_0). \quad (2.82)$$

Graficzna reprezentacja tego wzoru przedstawiona jest na rysunku 2.3a.

2.7.3. Związek między propagatorami fotonowymi

W bardzo podobny sposób możemy uzyskać związek podstawowy pomiędzy propagatorami pola fotonowego. W tym celu wykorzystajmy definicję (2.30b) propagatora \mathcal{D}_F i podziałajmy na niego operatorem różniczkowym $\partial_t^2 + k^2$, który zadaje dynamikę swobodnego pola $\Phi_i(k, t)$. Wykorzystując w odpowiedni sposób reguły komutacyjne (2.21b) otrzymamy zależność

$$\begin{aligned} (\partial_t^2 + k^2) i\mathcal{D}_{Fij}(k, k', t, t') \\ = -\delta(t - t')\delta(k - k')\delta_{ij} + \langle G | \mathbb{T} (\partial_t^2 + k^2) \Phi_i(k, t) \Phi_j(k', t') | G \rangle. \end{aligned} \quad (2.83)$$

Podobnie jak było to zrobione w przypadku elektronowym możemy pozbyć się operatora różniczkowego działającego pod iloczynem chronologicznym wykorzystując równania dynamiki (2.22b)

$$\begin{aligned} (\partial_t^2 + k^2) i\mathcal{D}_{Fij}(k, k', t, t') \\ = -\delta(t - t')\delta(k - k')\delta_{ij} - g(k)\langle G | \mathbb{T} \Psi_\alpha^\dagger(t)\sigma_{i\alpha\beta}\Psi_\beta(t)\Phi_j(k', t') | G \rangle \\ = -\delta(t - t')\delta(k - k')\delta_{ij} + g(k)\sigma_{i\alpha\beta}\langle G | \mathbb{T} \Phi_j(k', t')\Psi_\beta(t)\Psi_\alpha^\dagger(t) | G \rangle. \end{aligned} \quad (2.84)$$

Ostatnią równość uzyskaliśmy dzięki wykorzystaniu reguł antykomutacyjnych (2.21a) dla pól fermionowych oraz bezśladowości każdej z macierzy Pauliego σ_i . Takie przedstawienie pozwala nam wykorzystać definicję funkcji wierzchołkowej (2.33) i rozpisać trójpunktową funkcję korelacji występującą

we wzorze (2.84) na iloczyn odpowiednich propagatorów Feynmana¹⁵

$$\begin{aligned} & (\partial_t^2 + k^2) i\mathcal{D}_{Fij}(k, k', t, t') \\ &= -\delta(t - t')\delta(k - k')\delta_{ij} - \sum_m \int_0^\infty dk_1 \int_{-\infty}^\infty dt_1 \Pi_{im}(k, k_1, t, t_1) \mathcal{D}_{mj}(k_1, t_1, k', t'), \end{aligned} \quad (2.85)$$

gdzie funkcja energii własnej fotonu Π dana jest wzorem

$$\Pi_{im}(k, k_1, t, t_1) = -g(k)g(k_1) \int_{-\infty}^\infty dt_2 \int_{-\infty}^\infty dt_3 \text{Tr} \{ \sigma_i \mathcal{S}_F(t, t_2) \Gamma_m(t_1, t_2, t_3) \mathcal{S}_F(t_3, t) \}. \quad (2.86)$$

W powyższym wzorze Tr oznacza wzięcie śladu po spinowy wskaźnikach z iloczynu występujących tu macierzy 2×2 . Analogicznie jak w przypadku elektronowym możemy powyższy związek pomiędzy funkcją energii własnej, a funkcją wierzchołkową zapisać w postaci diagramatycznej

$$-i\Pi(t, t_1) = \text{diagram} = \text{diagram} \quad (2.87)$$

Warto w tym miejscu zauważyć, że wielkość $\Pi(k, k', t, t')$ dość trywialnie zależy od pędów wchodzących fotonów k i k' . Zależność ta jest zawarta jedynie w funkcjach $g(k)$, które całkowicie odprzegają się od reszty. W dalszej części pracy okaże się, że bardzo użyteczne jest oddzielenie tych funkcji od funkcji energii własnej i wprowadzenie nowej wielkości $P(t, t')$, która zależy jedynie od chwil czasu wchodzących fotonów¹⁶

$$\text{diagram} = -i\Pi(k, k', t, t') = -ig(k)P(t, t')g(k') = g(k) \text{diagram} g(k'). \quad (2.88)$$

Ostatnim krokiem do otrzymania związku podstawowego pomiędzy propagatorami fotonowymi jest wykorzystanie propagatora swobodnego iD_F do odcałkowania równania (2.85). Otrzymamy wtedy związek

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{Fij}(k, k', t, t') &= D_{Fij}(k, k', t, t') + \sum_m \sum_n \int_{-\infty}^\infty dt_1 \int_{-\infty}^\infty dt_2 \int_0^\infty dk_1 \int_0^\infty dk_2 \\ &\quad \times D_{Fin}(k, k_2, t, t_2) \Pi_{nm}(k_2, k_1, t_2, t_1) \mathcal{D}_{Fmj}(k_1, k', t_1, t'). \end{aligned} \quad (2.89)$$

¹⁵Aby dostać ten wzór należy również wykorzystać własność symetrii propagatora elektronowego (2.31).

¹⁶W celu uniknięcia nieporozumień w oznaczeniu diagramatycznym reprezentującym funkcję $P(t, t')$ używamy niewypełnionych wierzchołków.

W dziedzinie częstości wzór ten przyjmuje oczywiście prostszą postać ze względu na omawianą już przez nas symetrię niezmienniczości naszej teorii względem przesunięć w czasie. Wielkość Π będzie w związku z tym miała prostą transformację Fouriera

$$\Pi_{ij}(k, k', t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} e^{-ik_0(t_1-t_2)} \Pi_{ij}(k, k', k_0) \quad (2.90)$$

i wzór (2.89) w dziedzinie częstości będzie miał postać

$$\mathcal{D}_F(k, k', k_0) = D_F(k, k', k_0) + \int_0^{\infty} dk_1 \int_0^{\infty} dk_2 D_F(k, k_1, k_0) \Pi(k_1, k_2, k_0) \mathcal{D}_F(k_2, k', k_0). \quad (2.91)$$

W powyższym wzorze pominęliśmy wskaźniki wektorowe pamiętając, że występujące tu wielkości są macierzami 3×3 i ich iloczyn należy rozumieć jako iloczyn macierzy. Graficzna reprezentacja tego podstawowego związku między propagatorami fotonowymi przedstawiona jest na rysunku 2.3b.

Propagatory pól oddziałujących

„Wielką satysfakcją jest tworzenie narzędzi,
które są użyteczne dla innych.”

Freeman Dyson

W poprzednim rozdziale, opierając się na znanych metodach kwantowej teorii pola, sformułowaliśmy teorię qubitów oddziałujących z kwantowym polem elektromagnetycznym i podaliśmy reguły Feynmana jakimi należy się kierować przy prowadzeniu rachunku perturbacyjnego. Teoretycznie jesteśmy zatem gotowi do wyliczania wszystkich interesujących nas feynmanowskich funkcji korelacji, a co za tym idzie wszystkich interesujących nas procesów fizycznych. W tym rozdziale skupimy się na dwóch podstawowych procesach fizycznych – ewolucji w czasie qubitów i propagacji oddziałujących z nimi fotonów. Procesy te opisane są przez odpowiednie propagatory $\mathcal{S}_F(p_0)$ i $\mathcal{D}_{ij}(p_0)$, w których są zakodowane najważniejsze własności rozważanego przez nas układu złożonego.

3.1. Rozwinięcie perturbacyjne propagatorów

3.1.1. Propagator elektronu

Na początku przeanalizujemy propagator elektronowy (2.30a). Zgodnie z wcześniejszą analizą związek (2.82) propagatora elektronowego w obrazie Heisenberga \mathcal{S}_F z propagatorem w obrazie oddziaływania S_F ma postać

$$\mathcal{S}_F(p_0) = S_F(p_0) + S_F(p_0)\Sigma(p_0)\mathcal{S}_F(p_0). \quad (3.1)$$

Wszystkie trzy obiekty \mathcal{S}_F , S_F i Σ występujące w tym wzorze są macierzami 2×2 we wskaźnikach spinowych i w związku z tym ich mnożenie należy rozumieć jako mnożenie macierzy wg kolejności ich zapisania. Z poprzedniej analizy wynika jasno, że funkcja energii własnej $\Sigma(p_0)$ jest sumą (2.68) wszystkich mocno spójnych części diagramów Feynmana z jedną linią elektronową wchodzącą i jedną wychodzącą.

Wzór (3.1) prowadzi do następującego wyrażenia na propagator \mathcal{S}_F w postaci szeregu geometrycznego

$$\mathcal{S}_F(p_0) = S_F(p_0) + S_F(p_0)\Sigma(p_0)\mathcal{S}_F(p_0) + S_F(p_0)\Sigma(p_0)\mathcal{S}_F(p_0)\Sigma(p_0)\mathcal{S}_F(p_0) + \dots \quad (3.2)$$

Formalne sumowanie takiego szeregu jest bardzo proste. Najłatwiej jest wykorzystać do tego bezpośrednio wzór (3.1) przepisując go do postaci

$$[1 - S_F(p_0)\Sigma(p_0)] S_F(p_0) = S_F(p_0). \quad (3.3)$$

Stąd jasno widać, że propagator fermionowy S_F wyraża się wzorem

$$S_F(p_0) = \frac{1}{S_F(p_0)^{-1} - \Sigma(p_0)}. \quad (3.4)$$

Symbolicznie można powyższy związek przedstawić następująco

$$\begin{aligned} \Rightarrow &= \longrightarrow + \longrightarrow \square \longrightarrow + \longrightarrow \square \square \longrightarrow + \dots \\ &= \frac{1}{(\longrightarrow)^{-1} - \square}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Warto w tym miejscu podkreślić, że w rzeczywistości szeregowi (3.2) bardzo trudno jest nadać ścisły sens matematyczny, gdyż jest on rozbieżny gdy $p_0 \approx m_0$. Gdybyśmy zatem nie dysponowali ścisłym wzorem (3.1), a jedynie pochodzącym z perturbacyjnego rozwinięcia wzorem (2.72a), to prowadzenie rachunku zaburzeń mogłoby nie być matematycznie poprawne. Wykorzystanie bezpośrednio wzoru (3.2) pozwala nam znajdować kolejne przybliżenia do propagatora S_F wyliczając perturbacyjnie funkcję energii własnej $\Sigma(p_0)$, która składa się jedynie z diagramów mocno spójnych. Wkłady od diagramów słabo spójnych są automatycznie uwzględnione przez wykonanie sumowania nieskończonego szeregu.

Cała przedstawiona powyżej analiza propagatora elektronowego jest oczywiście słuszna również w przypadku atomu dwupoziomowego (TLA) opisanego hamiltonianem (2.12b). W tym przypadku funkcję energii własnej będziemy oznaczali symbolem $\hat{\Sigma}$ i wzór (3.4) będzie miał postać

$$S_F(p_0) = \frac{1}{S_F(p_0)^{-1} - \hat{\Sigma}(p_0)}. \quad (3.6)$$

Fizyczne konsekwencje wzorów (3.4) i (3.6) związane z rozsunieniem poziomów energetycznych układu dwupoziomowego w stosunku do poziomów w teorii bez oddziaływań omówione są w punkcie 3.2.

3.1.2. Propagator fotonu i macierz przejścia

Podobny rachunek jak w przypadku elektronu można przeprowadzić dla propagatora fotonowego. W tym przypadku jednak sytuacja jest bardziej skomplikowana, bo oprócz zwykłego mnożenia macierzy będziemy musieli również wykonywać całkowanie po pędach k . Dodatkowym utrudnieniem jest fakt, że propagator swobodnego fotonu jest dystrybucją proporcjonalną do delty Diraca $\delta(k - k')$, a nie zwykłą funkcją.

Punktem wyjścia naszej analizy jest, podobnie jak w przypadku elektronu, związek podstawowy (2.91) pomiędzy propagatorami w teorii swobodnej i oddziaływanej, który ma postać

$$\mathcal{D}_F(k, k', k_0) = D_F(k, k', k_0) + \int_0^\infty dk_1 \int_0^\infty dk_2 D_F(k, k_1, k_0) \Pi(k_1, k_2, k_0) \mathcal{D}_F(k_2, k', k_0). \quad (3.7)$$

Przypomnijmy, że funkcja energii własnej fotonu Π jest sumą (2.70) wszystkich mocno spójnych części diagramów z dwiema wchodzącymi liniami fotonowymi. Należy przy tym pamiętać, że w przypadku spinu wielkość ta wraz z propagatorami \mathcal{D}_F i D_F jest macierzą 3×3 we wskaźnikach wektorowych. Tym samym ich iloczyn należy rozumieć jako iloczyn macierzy wg kolejności ich zapisania.

Wykorzystując jawną postać propagatora swobodnego (2.42) można wykonać jedno całkowanie we wzorze (3.7) otrzymując wzór¹

$$\mathcal{D}_F(k, k', k_0) = \frac{\delta(k - k')}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon} + \frac{g(k)}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon} P(k_0) \int_0^\infty dk_2 g(k_2) \mathcal{D}_F(k_2, k', k_0). \quad (3.8)$$

Powyższe równanie można formalnie rozwiązać w sposób iteracyjny. Łatwo sprawdzić, że po pierwszej iteracji ma ono postać

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_F(k, k', k_0) &= \frac{\delta(k - k')}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon} + \frac{g(k)}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon} P(k_0) \frac{g(k')}{k_0^2 - k'^2 + i\epsilon} \\ &+ \frac{g(k)}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon} P(k_0) \int_0^\infty dk_2 \frac{g^2(k_2)}{k_0^2 - k_2^2 + i\epsilon} P(k_0) \int_0^\infty dk_3 g(k_3) \mathcal{D}_F(k_3, k', k_0). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Powtarzając tą iterację wielokrotnie otrzymujemy

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_F(k, k', k_0) &= \frac{\delta(k - k')}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon} \\ &+ \frac{g(k)}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon} [P(k_0) + P(k_0)h(k_0)P(k_0) + \dots] \frac{g(k')}{k_0^2 - k'^2 + i\epsilon}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

gdzie funkcja $h(k_0)$ dana jest wzorem

$$h(k_0) = \int_0^\infty dk \frac{g^2(k)}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon}. \quad (3.11)$$

Występujący w nawiasie szereg geometryczny jest dobrze określoną wielkością i można wykonać jego sumowanie analogicznie jak zrobiliśmy to w przypadku propagatorów elektronowych dla macierzy 2×2 otrzymując wzór (3.4). W ten sposób otrzymujemy

$$\mathcal{D}_F(k, k', k_0) = \frac{\delta(k - k')}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon} + \frac{g(k)}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon} \left[\frac{1}{P(k_0)^{-1} - h(k_0)} \right] \frac{g(k')}{k_0^2 - k'^2 + i\epsilon}$$

¹Aby otrzymać ten wzór wykorzystaliśmy również rozkład (2.88).

lub jawnie wypisując wskaźniki wektorowe²

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{Fij}(k, k', k_0) &= D_{Fij}(k, k', k_0) \\ &+ \frac{g(k)}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon} \left[\frac{1}{P(k_0)^{-1} - h(k_0)} \right]_{ij} \frac{g(k')}{k_0^2 - k'^2 + i\epsilon}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Należy pamiętać, że wielkość $P(k_0)$ jest macierzą 3×3 i potęgę -1 należy w tym przypadku rozumieć jako odwrotność macierzy. Zauważmy, że ze wzoru tego wynika, że propagator fotonowy jest symetryczny ze względu na zamianę składowych pędowych $k \leftrightarrow k'$. Składowe te wchodzi bowiem do wyrażenia na pełny propagator jedynie poprzez symetryczną deltę Diraca $\delta(k - k')$ w propagatorze swobodnym, albo poprzez iloczyn funkcji $g(k)g(k')$. Własność tą wykorzystamy w punkcie 4.4.

Aby zapisać powyższy rachunek symbolicznie wprowadźmy nowe oznaczenia na następujące wyrażenia

$$\text{~~~~~} \bullet = i \frac{g(k)}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon}, \quad (3.13a)$$

$$\bullet \text{~~~~~} \bullet = i \int_0^\infty dk \frac{g^2(k)}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon}, \quad (3.13b)$$

$$\text{◯} = -iP(k_0). \quad (3.13c)$$

Takie oznaczenie wyrażeń (3.13a) i (3.13b) jest naturalne gdyż łatwo sprawdzić, że są one wyrażeniami na swobodny propagator fotonu wycalkowanymi jedno- lub dwukrotnie po zmiennych pędowych. Oznaczenie (3.13c) wynika wprost ze wzoru (2.88).

Przedstawiony wcześniej rachunek możemy teraz symbolicznie zapisać w następujący sposób

$$\begin{aligned} \text{~~~~~} &= \text{~~~~~} + \text{~~~~~} \text{◯} \text{~~~~~} + \text{~~~~~} \text{◯} \text{◯} \text{~~~~~} + \dots \\ &= \text{~~~~~} + \text{~~~~~} \left(\text{◯} + \text{◯} \text{◯} \text{◯} + \dots \right) \text{~~~~~} \\ &= \text{~~~~~} + \text{~~~~~} \frac{1}{\text{◯}^{-1} - \text{~~~~~}} \text{~~~~~} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Ze wzoru (3.12) lub jego symbolicznego przedstawienia (3.14) widać, że propagator pola elektromagnetycznego dzieli się na dwie całkowicie niezależne części. Pierwsza z nich jest propagatorem swobodnego fotonu i jest proporcjonalna do delty $\delta(k - k')$. Druga jest regularną funkcją w k i k' , którą możemy traktować jako modyfikację propagatora na skutek oddziaływania z układem

²Warto w tym miejscu dodać, że otrzymany przez nas wzór diametralnie różni się od sytuacji w pełnej elektrodynamice kwantowej. Jest to związane z istnieniem dodatkowych symetrii teorii, które prowadzą do innego związku pomiędzy propagatorami w teorii z i bez oddziaływania [Dir34, Hei34, Gel54, Bia75].

dwupoziomowym. Jest to sytuacja analogiczna do tej z jaką mamy do czynienia w standardowej kwantowej teorii rozpraszania, gdzie centralnym obiektem zainteresowania jest macierz przejścia T . Macierz ta w naszym przypadku ma postać

$$-iT(k_0) = \frac{1}{\text{---}^{-1} \text{---}} = -i \frac{1}{P^{-1}(k_0) - h(k_0)}. \quad (3.15)$$

Przypadek atomu dwupoziomowego

Przedstawiony powyżej rachunek jest oczywiście również prawidłowy w przypadku atomu dwupoziomowego (TLA). Sytuacja jest jednak teraz jeszcze prostsza, bo odpowiadające macierzom $\Pi(k, k', k_0)$, $T(k_0)$ i $P(k_0)$ wielkości $\hat{\Pi}(k, k', k_0)$, $\hat{T}(k_0)$ i $\hat{P}(k_0)$ nie mają wskaźników wektorowych i są zwykłymi funkcjami. Analogicznie do funkcji $h(k_0)$ w tym przypadku definiujemy funkcję $\hat{h}(k_0)$, która dana jest wzorem

$$\hat{h}(k_0) = \int_0^\infty dk \frac{\hat{g}^2(k)}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon}. \quad (3.16)$$

3.2. Renormalizacja przerwy energetycznej

Wzór (3.4) reprezentuje formalny związek pomiędzy propagatorami fermionowymi oraz funkcją energii własnej elektronu. Na początku zauważmy, że propagator fermionowy $S_F(p_0)$ w teorii bez oddziaływań ma biegun w punkcie $p_0 = m_0\sigma_z$, tzn. w zależności od składowej znajduje się on w punkcie m_0 lub $-m_0$. Widzimy zatem, że bieguny propagatora swobodnego elektronu odpowiadają energiom stanów swobodnego qubitu. Ta prosta obserwacja jest szczególnym przypadkiem bardzo ogólnego faktu mówiącego, że bieguny każdego propagatora odpowiadają wzbudzeniom pola, którego propagację opisują [Bia75, Bjo65, Itz80]. Tym samym bieguny propagatorów (w przeciwieństwie do samych propagatorów) mają bezpośrednią interpretację fizyczną.

Biegun propagatora $S_F(p_0)$ w pełnej teorii qubitu możemy znaleźć szukając miejsc zerowych jego mianownika $M(p_0) = p_0 - m_0\sigma_z - \Sigma(p_0)$. Widzimy, że jeśli tylko $\Sigma(m_0\sigma_z) \neq 0$, to punkt $m_0\sigma_z$ nie będzie jego miejscem zerowym. Tym samym dochodzimy do wniosku, że poziomy energetyczne qubitu w teorii z oddziaływaniem różnią się od tych w teorii swobodnej. Jest to dobrze znany fakt w każdej teorii pola z oddziaływaniem.

W tym miejscu dochodzimy do potrzeby *zrenormalizowania* przerwy energetycznej układu dwupoziomowego. Warto podkreślić, że słowo renormalizacja bardzo często kojarzy się z niejasną, aczkolwiek konieczną procedurą usuwania niewygodnych nieskończoności. Tymczasem renormalizacja jest jedynie prostym zabiegiem mającym na celu nadanie sensu fizycznego wielkościom pojawiającym się w wyniku prowadzenia rachunków. Nasz bardzo prosty model kwantowej teorii pola jest doskonałym przykładem, który pozwala dogłębnie zrozumieć sens renormalizacji. Jak się okaże w dalszej części tego

rozdziału w naszej teorii nie pojawiają się żadne nieskończone wielkości, a nadal istnieje potrzeba przeprowadzenia renormalizacji teorii.

3.2.1. Istota renormalizacji

Gdy spojrzymy na pełny hamiltonian naszej teorii (2.12), to przy głębszym zastanowieniu można dojść do wniosku, że parametr teorii m_0 nie może mieć żadnego fizycznego sensu w teorii z oddziaływaniem. Choć wydaje się, że parametr ten opisuje przerwę energetyczną pomiędzy poziomami swobodnego qubitu, to ze względu na nieodłączne istnienie oddziaływania, łatwo pokazać, że można go uczynić dowolnym. Parametr m_0 zależy bowiem od arbitralnie przez nas dokonanego podziału hamiltonianu na część swobodną i oddziałującą. Podział ten nie jest przecież żadną własnością przyrody, a wynika jedynie z naszej nieumiejętności ścisłego rozwiązania równań dynamiki (2.22).

Zauważmy, że możemy dokonać podziału hamiltonianu na część swobodną i oddziałującą w inny sposób, dodając do hamiltonianu swobodnego wielkość $\delta m \Psi^\dagger \sigma_z \Psi$ i tą samą wielkość odejmując po stronie oddziaływania. Tzn. hamiltonian pełnej teorii przepisujemy w następującej formie

$$\mathcal{H} = \underbrace{m \Psi^\dagger \sigma_z \Psi + \sum_i \int_0^\infty dk \omega_k a_i^\dagger(k) a_i(k)}_{\mathcal{H}_0} + \underbrace{\Psi^\dagger \sigma \Psi \cdot \int_0^\infty dk g(k) \Phi(k)}_{\mathcal{H}_I} - \delta m \Psi^\dagger \sigma_z \Psi. \quad (3.17)$$

Pełny hamiltonian naszej teorii \mathcal{H} nie zmienił się, a przerwa energetyczna po stronie swobodnej wynosi teraz $m = m_0 + \delta m$. Tym samym, ze względu na fakt, że nowy parametr δm wprowadzony do naszego opisu jest całkowicie dowolny, pokazaliśmy, że parametr m_0 nie może mieć fizycznego znaczenia.

Opisana powyżej procedura przeniesienia pewnej części hamiltonianu oddziaływania \mathcal{H}_I do hamiltonianu swobodnego \mathcal{H}_0 wpływa na sposób prowadzenia rachunku zaburzeń. Na skutek tego zabiegu w regułach Feynmana pojawiają się dwie modyfikacje. Pierwsza jest oczywista – musimy dokonać zmiany $m_0 \rightarrow m$ w propagatorze swobodnym $S_F(p_0)$, gdyż teraz człon $m \Psi^\dagger \sigma_z \Psi$ pełni funkcję hamiltonianu swobodnego elektronu. Druga wynika z pojawienia się w hamiltonianie oddziaływania dodatkowego członu $-\delta m \Psi^\dagger \sigma_z \Psi$. Prowadzi on do nowej reguły Feynmana, która jak łatwo sprawdzić wymaga uwzględnienia nowego diagramu

$$\rightarrow \times \leftarrow = i \sigma_z \delta m. \quad (3.18)$$

Diagram ten należy rozumieć jako drugi wierzchołek oddziaływania – tym razem pomiędzy dwoma liniami elektronowymi.

Renormalizację poprzez przesunięcie części hamiltonianu oddziaływania do hamiltonianu swobodnego bardzo często nazywa się w literaturze *metodą przeciwcłonów*. Wynika to z faktu, że w teoriach gdzie pojawiają się nieskończone wielkości można dobrać parametr δm w taki sposób, aby się one nie

pojawiały. Parametr ten jest zatem odpowiedzialny za takie człony rozwinięcia perturbacyjnego, które „kasują” niewygodne wyrażenia w innych członach.

Wybór parametru δm

W wyniku opisanej procedury renormalizacji w naszej teorii pojawił się jeden dodatkowy parametr δm . Nie ma oczywiście żadnej matematycznej przesłanki, która pozwalałaby nam go dobrze wybrać. Istnieje jednak bardzo ważna i użyteczna przesłanka fizyczna. Jak pamiętamy biegunom propagatora elektronu w teorii z oddziaływaniami odpowiadają poziomy energetyczne qubitu mierzonym w doświadczeniu. Po przeprowadzeniu renormalizacji mianownik tego propagatora ma postać³

$$M(p_0) = p_0 - m\sigma_z - \Sigma(p_0).$$

Użytecznym warunkiem jaki powinniśmy postawić jest, aby parametr naszej teorii m odpowiadał fizycznej (mierzonej w doświadczeniu) przerwie energetycznej układu dwupoziomowego. Będzie to natychmiast skutkowało odpowiednim warunkiem na parametr δm . Nasz warunek oznacza bowiem, że jeśli wielkość $m\sigma_z$ jest miejscem zerowym mianownika $M(p_0)$ to zachodzi wzór [Bia75, Gre03]

$$\Sigma(m\sigma_z) = 0. \quad (3.19)$$

Powyższe równanie pozwala wyznaczyć poprawkę masową δm w każdym rzędzie rachunku zaburzeń.

Powiązanie parametru m z rzeczywistą przerwą energetyczną qubitu mierzoną w doświadczeniu i tym samym ustalenie swobodnego parametru δm ma bardzo duże znaczenie dla przeprowadzania różnych rachunków perturbacyjnych. Oznacza to bowiem, że obie te wielkości mają jasną interpretację fizyczną – są jednoznacznie określone przez wynik pomiaru przerwy energetycznej. Tym samym znajomość doświadczalnej wartości przerwy energetycznej pozwala nam nadać również doświadczalny sens innym wielkościom fizycznym, które będziemy wyznaczali teoretycznie.

Na zakończenie warto dodać, że całą przedstawioną tu procedurę renormalizacji przerwy energetycznej qubitu oczywiście można całkowicie analogicznie przeprowadzić również dla atomu dwupoziomowego (TLA). Zgodnie z przyjętą przez nas regułą poprawkę masową w tym przypadku będziemy oznaczali przez $\delta\hat{m}$.

3.2.2. Wyznaczenie poprawki masowej

Przeprowadźmy teraz szczegółowy rachunek renormalizacyjny propagatora elektronowego w najniższym rzędzie rachunku zaburzeń. Z reguł Feynmana

³Należy zwrócić uwagę, że teraz funkcja energii własnej $\Sigma(p_0)$ składa się również z diagramów poprawki masowej (3.18).

wynika jasno, że w tym przybliżeniu funkcja energii własnej elektronu jest sumą następujących diagramów


$$-i\Sigma^{(2)}(p_0) = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} \quad (3.20)$$

Kolejne wkłady od poszczególnych diagramów mają postać⁴

$$-i\Sigma^{(2a)}(p_0) = \text{diagram 1} = -i \int_0^\infty dk \frac{g^2(k)}{2k} \frac{3p_0 - (k+m)\sigma_z}{p_0^2 - (k+m)^2 + i\epsilon}, \quad (3.21a)$$

$$-i\Sigma^{(2b)}(p_0) = \text{diagram 2} = -i \int_0^\infty dk \frac{g^2(k)}{k^2} \sigma_z = -i M_t \sigma_z, \quad (3.21b)$$

$$-i\Sigma^{(2c)}(p_0) = \text{diagram 3} = i \delta m \sigma_z. \quad (3.21c)$$

Ze względu na fakt, że diagram  bardzo często będzie występował jako fragment innych diagramów wprowadziliśmy dla wielkości, którą on reprezentuje specjalne oznaczenie⁵

$$M_t = \int_0^\infty dk \frac{g^2(k)}{k^2}. \quad (3.22)$$

Z powyższych rachunków wynika, że w drugim rzędzie rachunku zaburzeń funkcja energii własnej elektronu wyraża się następująco

$$\Sigma^{(2)}(p_0) = \int_0^\infty dk g^2(k) \left(\frac{3p_0 - (k+m)\sigma_z}{p_0^2 - (k+m)^2 + i\epsilon} + \frac{\sigma_z}{k^2} \right) - \delta m \sigma_z. \quad (3.23)$$

Wykorzystując natomiast warunek (3.19), który w tym przypadku ma postać

$$0 = \Sigma^{(2)}(m\sigma_z) = \sigma_z \left(\int_0^\infty dk \frac{g^2(k)}{2k^2} \frac{2m+3k}{2m+k} - \delta m \right) \quad (3.24)$$

dochodzimy do wniosku, że poprawka masowa δm w tym rzędzie jest równa⁶

$$\delta m = \int_0^\infty dk \frac{g^2(k)}{2k^2} \frac{2m+3k}{2m+k}. \quad (3.25)$$

Atom dwupoziomowy (TLA)

Bardzo podobnie rachunek przeprowadzamy w przypadku atomu dwupoziomowego (TLA). W tej sytuacji odpowiednie wkłady do funkcji energii własnej

⁴Szczegółowy rachunek przedstawiony jest w Załączniku.

⁵Taki diagram w literaturze bardzo często nazywa się *diagramem kijankowym*. Nie występuje on np. w pełnej elektrodynamice kwantowej ze względu na twierdzenie Furry'ego. W naszej teorii twierdzenie to nie obowiązuje.

⁶Ze względu na fakt, że nigdzie nie będzie nam potrzebna poprawka masowa z większą dokładnością opuszczamy w tym przypadku indeks oznaczający rząd rachunku zaburzeń.

dane są wzorami

$$-i\widehat{\Sigma}^{(2a)}(p_0) = \text{diagram} = -i \int_0^\infty dk \widehat{g}^2(k) \frac{p_0 - (k+m)\sigma_z}{p_0^2 - (k+m)^2 + i\epsilon}, \quad (3.26a)$$

$$-i\widehat{\Sigma}^{(2b)}(p_0) = \text{diagram} = 0, \quad (3.26b)$$

$$-i\widehat{\Sigma}^{(2c)}(p_0) = \text{diagram} = i\delta\widehat{m}\sigma_z. \quad (3.26c)$$

Po zebraniu wszystkich wkładów funkcja energii własnej w drugim rzędzie rachunku zaburzeń ma postać

$$\widehat{\Sigma}^{(2)}(p_0) = \int_0^\infty dk \widehat{g}^2(k) \frac{p_0 - (k+m)\sigma_z}{p_0^2 - (k+m)^2 + i\epsilon} - \delta\widehat{m}\sigma_z, \quad (3.27)$$

a poprawka masowa wynosi

$$\delta\widehat{m} = \int_0^\infty dk \frac{\widehat{g}^2(k)}{2k} \frac{1}{2m+k}. \quad (3.28)$$

3.3. Rozpraszanie fotonu na qubicie

Zajmijmy się teraz przeanalizowaniem propagatora fotonu w teorii z oddziaływaniami. Jak już wspominaliśmy w punkcie 3.1.2. najbardziej interesującą częścią tego propagatora jest macierz przejścia (3.15), która opisuje rozpraszanie fotonu na układzie dwupoziomowym. Podstawowym elementem macierzy przejścia jest funkcja $P(k_0)$, która jest związana z funkcją energii własnej $\Pi(k, k', k_0)$ wzorem (2.88). Zaczniemy zatem całą analizę od znalezienia funkcji $P(k_0)$ w dwóch najniższych rzędach rachunku zaburzeń. Wszystkie szczegóły obliczeń znajdują się w Załączniku. Jedynie obliczenia w najniższym rzędzie rachunku zaburzeń prezentowane są w tym rozdziale w celu wyjaśnienia pewnych ważnych subtelności i stosowanych oznaczeń.

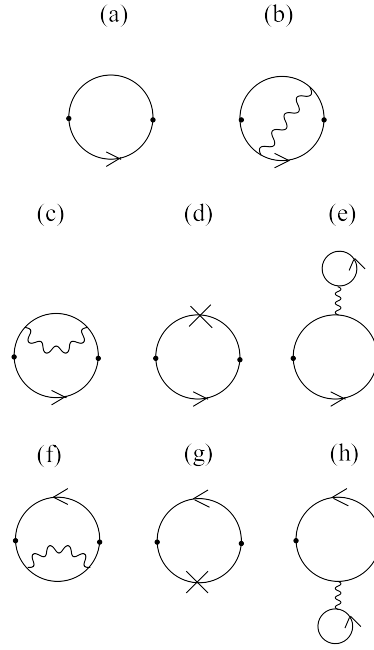
3.3.1. Drugi rząd rachunku zaburzeń

W drugim rzędzie rachunku zaburzeń poprawka radiacyjna do propagatora fotonowego jest reprezentowana przez diagram (a) na rysunku 3.1. Wkład do funkcji $P(k_0)$ od tego diagramu wyznaczony zgodnie z regułami Feynmana ma postać

$$-iP_{ab}^{(2)}(k_0) = \text{diagram} = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \text{Tr}\{\sigma_a S_F(p_0 + k_0) \sigma_b S_F(p_0)\}. \quad (3.29)$$

Indeksy a oraz b mogą przyjmować wartości x , y lub z jeśli chcemy wykonywać obliczenia w bazie kartezyjskiej albo $+$, $-$ lub 0 w bazie momentu pędu⁷.

⁷Analogiczny rachunek w przypadku pełnej elektrodynamiki kwantowej został wykonany w 1935 roku niezależnie przez R. Serbera [Ser35] i A. E. Vehlinga [Veh35].



Rysunek 3.1: Poprawki radiacyjne do propagatora fotonu. Prezentowane diagramy Feynmana reprezentują wszystkie wkłady do funkcji energii własnej $\Pi(k, k', k_0)$ w drugim i czwartym rzędzie rachunku zaburzeń. Odpowiadające im wkłady do funkcji $P(k_0)$ uzyskuje się dzieląc te wyrażenia przez funkcje wagowe $g(k)$ pochodzące od oznaczonych wierzchołków oddziaływania (patrz wzór (2.88)).

Aby obliczyć energię własną propagatora fotonowego dla układu spinowego wygodnie jest użyć bazy momentu pędu. Ze względu bowiem na własności hamiltonianu oddziaływania (patrz punkt 2.2.1.) energia własna jest w tej bazie diagonalna. Elementami energii własnej w tej bazie są wyrażenia $P_+(k_0)$, $P_-(k_0)$ i $P_0(k_0)$, które odpowiadają następującemu wyborowi macierzy σ w wyrażeniu (3.29)

$$P_+(k_0) : \sigma_a = \sigma_-, \quad \sigma_b = \sigma_+, \quad (3.30a)$$

$$P_-(k_0) : \sigma_a = \sigma_+, \quad \sigma_b = \sigma_-, \quad (3.30b)$$

$$P_0(k_0) : \sigma_a = \sigma_z, \quad \sigma_b = \sigma_z. \quad (3.30c)$$

Wykorzystując własności (Z.4) macierzy σ łatwo się przekonać, że wzór (3.29) sprowadza się do postaci

$$\begin{aligned} P_{\pm}^{(2)}(k_0) &= 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi i} \frac{1}{p_0 + k_0 \mp m \pm i\epsilon} \frac{1}{p \pm m \mp i\epsilon} \\ &= -\frac{2}{2m \mp k_0}, \end{aligned} \quad (3.31a)$$

$$P_0^{(2)}(k_0) = 0. \quad (3.31b)$$

Element $P_0^{(2)}(k_0)$ jest równy zero, gdyż w wyrażającej go całce oba bieguny leżą w tej samej półpłaszczyźnie zespolonej. Tym samym całka musi być równa

zero. Zauważmy, że zachodzi związek $P_-^{(2)}(k_0) = P_+^{(2)}(-k_0)$, który jest przejawem wspomnianej już przez nas niezmienniczości ze względu na odwrócenie czasu. Jest to bardzo duża zaleta prowadzenia rachunku zaburzeń metodą diagramów Feynmana, gdyż zachowanie tej niezwykle istotnej symetrii jest automatycznie uwzględnione. Nie musimy zatem przeprowadzać żadnego dodatkowego rozumowania, aby ją zapewnić.

Atom dwupoziomowy (TLA)

W sposób całkowicie analogiczny jak dla układu spinowego można wyliczyć najniższy wkład do energii własnej propagatora fotonowego dla atomu dwupoziomowego. Obliczenia w tym przypadku są jeszcze prostsze, gdyż wielkość $\hat{P}^{(2)}(k_0)$ w tej sytuacji nie posiada indeksów. Zgodnie z regułami Feynmana wyraża się ona następująco

$$-i\hat{P}^{(2)}(k_0) = \text{diagram} = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \text{Tr}\{\sigma_x S_F(p_0 + k_0) \sigma_x S_F(p_0)\}. \quad (3.32)$$

Po wykorzystaniu tożsamości (Z.4f) oraz wykonaniu śladu wyrażenie to sprowadza się do sumy dwóch prostych do wykonania całek

$$\begin{aligned} \hat{P}^{(2)}(k_0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi i} \frac{1}{p_0 + k_0 + m - i\epsilon} \frac{1}{p_0 - m + i\epsilon} \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi i} \frac{1}{p_0 + k_0 - m + i\epsilon} \frac{1}{p_0 + m - i\epsilon} \\ &= -\frac{4m}{4m^2 - k_0^2}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

3.3.2. Czwarty rząd rachunku zaburzeń

Wkłady do energii własnej propagatora fotonowego w czwartym rzędzie rachunku zaburzeń są reprezentowane przez diagramy (b)-(h) przedstawione na rysunku 3.1. Korzystając z wyników obliczeń zamieszczonych w Załączniku otrzymujemy następujące wyrażenie na poprawkę do energii własnej fotonu w czwartym rzędzie rachunku zaburzeń⁸

$$\begin{aligned} P_{\pm}^{(2+4)}(k_0) &= P_{\pm}^{(2)}(k_0) + P_{\pm}^{(4)}(k_0) \\ &= -2(1-b) \left[\frac{1}{2m \mp k_0} + \frac{\delta}{(2m \mp k_0)^2} \right], \end{aligned} \quad (3.34a)$$

$$\begin{aligned} P_0^{(2+4)}(k_0) &= P_0^{(2)}(k_0) + P_0^{(4)}(k_0) \\ &= -4 \int_0^{\infty} \frac{dk}{k} \frac{g^2(k)}{k+2m} \frac{1}{(k+2m)^2 - k_0^2 - i\epsilon}, \end{aligned} \quad (3.34b)$$

⁸Poprawka z dokładnością do czwartego rzędu rachunku perturbacyjnego jest oczywiście sumą poprawki w drugim rzędzie oraz wszystkich poprawek w czwartym rzędzie rachunku.

gdzie

$$b = 2 \int_0^\infty \frac{dk}{k} \frac{g^2(k)}{(k+2m)^2}, \quad \delta = \frac{1}{2(1-b)} \int_0^\infty \frac{dk}{k^2} g^2(k). \quad (3.34c)$$

Otrzymany przez nas wynik z dokładnością do czwartego rzędu rachunku zaburzeń w pierwszym odczuciu jest bardzo niepokojący. Jak wynika bowiem ze wzoru (3.34a) poprawka czwartego rzędu zaczyna dominować nad poprawką drugiego rzędu jeśli tylko k_0 jest dostatecznie bliskie $2m$. To oznaczałoby, że prowadzony przez nas rachunek zaburzeń traci sens, gdyż poprawki wyższego rzędu są ważniejsze niż te niższego. Z taką sytuacją mamy bardzo często do czynienia w kwantowych teoriach pola i często nazywa się je problemem „podwójnego bieguna”. W takiej sytuacji wyjściem jest znów przeprowadzenie renormalizacji, tzn. nadania sensu fizycznego otrzymanemu wynikowi.

Dodatkowe przesunięcie rezonansu

Aby zrozumieć dlaczego powstaje opisany powyżej problem wróćmy na chwilę do renormalizacji propagatora elektronu, którą wykonaliśmy w punkcie 3.2. Choć nie jest to dobrze widoczne, w tamtej sytuacji również mielibyśmy do czynienia z „podwójnym biegunem” jeśli nie przeprowadzilibyśmy renormalizacji. Dość prostym rachunkiem można pokazać, że jeśli propagator elektronu posiadający biegun w punkcie $m\sigma_z$, wyrazimy przez parametr m_0 i rozwiniemy w małym parametrze δm to otrzymamy szereg składający się z wyrazów posiadających bieguny w punkcie m_0 o rosnącej wielokrotności. Uniknięcie takiej sytuacji jest możliwe właśnie dzięki wykonaniu renormalizacji bieguna czyli znalezieniu fizycznie ważnej przerwy energetycznej.

W przypadku obliczonej przez nas energii własnej fotonu sytuacja jest całkowicie analogiczna. Pojawienie się podwójnego bieguna jest oznaką, że punkt $\pm 2m$ nie jest fizycznie dobrym punktem rezonansu i należy dokonać jego renormalizacji. I choć nie możemy teraz wykonać sumowania nieskończonego szeregu, bo znamy tylko jego dwa pierwsze wyrazy, to z dokładnością z jaką pracujemy w tym rzędzie rachunku zaburzeń możemy użyć przybliżenia

$$\frac{1}{2m \mp k_0} + \frac{\delta}{(2m \mp k_0)^2} \approx \frac{1}{2m \mp k_0 - \delta}. \quad (3.35)$$




Łatwo sprawdzić, rozwijając prawą stronę, że z dokładnością do wyrazów co najwyżej rzędu δ obie strony są sobie równe. W związku z tym w czwartym rzędzie rachunku zaburzeń funkcja energii własnej ma następującą postać

$$P_{\pm}^{(2+4)}(k_0) = -\frac{2(1-b)}{2m \mp k_0 - \delta}, \quad (3.36a)$$

$$P_0^{(2+4)}(k_0) = -4 \int_0^\infty \frac{dk}{k} \frac{g^2(k)}{k+2m} \frac{1}{(k+2m)^2 - k_0^2 - i\epsilon}, \quad (3.36b)$$

gdzie b i δ dane są wzorom (3.34c).

Na zakończenie warto zasygnalizować, że z analogicznym problemem podwójnego bieguna spotykamy się w pełnej elektrodynamice kwantowej np. przy procesie kreacji i anihilacji wirtualnej pary elektron-pozytron z jednego fotonu (polaryzacja próżni). Proces ten jest opisany dokładnie takimi samymi diagramami Feynmana jak przedstawione powyżej.

To dodatkowe przesunięcie bieguna w QED oznacza, że foton powinien mieć większą energię niż suma spoczynkowych mas elektronu i pozytonu. Ta dodatkowa część energii jest niczym innym jak energią oddziaływania powstającej pary. Poprawka pojawia się dopiero w czwartym rzędzie rachunku perturbacyjnego, bo dopiero diagram  uwzględnia to oddziaływanie. Wszystkie inne diagramy w tym rzędzie jak również diagram  z drugiego rzędu rachunku tego oddziaływania nie uwzględniają. Łatwo się przekonać, że w naszej teorii qubitu właśnie diagram  jest odpowiedzialny za powstawanie podwójnego bieguna.

Atom dwupoziomowy (TLA)

Rachunki przeprowadzone dla atomu dwupoziomowego (TLA) w tym rzędzie rachunku zaburzeń prowadzą do następującego wyrażenia na funkcję energii własnej

$$\widehat{P}^{(2+4)}(k_0) = -\frac{4m(1-\widehat{b})}{4m^2 - k_0^2}, \quad (3.37a)$$

gdzie

$$\widehat{b} = \frac{1}{2m} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \widehat{g}^2(k) \frac{k+4m}{(k+2m)^2}. \quad (3.37b)$$

Jak widać w tym przypadku nie pojawia się problem podwójnego bieguna. Jest to kolejny argument za tym, że układy dwupoziomowe, w zależności od tego jak oddziałują z otoczeniem, mogą bardzo różnić się swoimi własnościami. Oczywiście nie należy się spodziewać, że w wyższych rzędach rachunku problem wielokrotnego bieguna się nie pojawi i w tym modelu.

3.3.3. Macierz przejścia

Z wyliczonych wyrażeń na funkcję energii własnej fotonu możemy bardzo prosto skonstruować macierz przejścia $T(k_0)$. W tym celu należy wykorzystać związek (3.15). Elementy macierzy przejścia $T(k_0)$ w bazie momentu pędu w drugim rzędzie rachunku zaburzeń mają postać

$$T_{\pm}^{(2)}(k_0) = -\frac{2}{2m \mp k_0 - 2h(k_0)} \quad (3.38a)$$

$$T_0^{(2)}(k_0) = 0. \quad (3.38b)$$

Analogicznie otrzymujemy przybliżenie dla macierzy przejścia w czwartym rzędzie rachunku zaburzeń

$$T_{\pm}^{(2+4)}(k_0) = -\frac{2(1-b)}{2m \mp k_0 - \delta - 2(1-b)h(k_0)}, \quad (3.39a)$$

$$T_0^{(2+4)}(k_0) = P_0^{(2+4)}(k_0). \quad (3.39b)$$

Związek (3.39b) wynika z faktu, że w drugim rzędzie rachunku zaburzeń nie występowała poprawka radiacyjna do wielkości $P_0(k_0)$.

Atom dwupoziomowy (TLA)

Jak łatwo się przekonać w przypadku atomu dwupoziomowego wyrażenie na macierz przejścia $\widehat{T}(k_0)$ w najniższym rzędzie rachunku zaburzeń jest następujące

$$\widehat{T}^{(2)}(k_0) = -\frac{4m}{4m^2 - k_0^2 - 4m\widehat{h}(k_0)}. \quad (3.40)$$

W czwartym rzędzie rachunku zaburzeń ma ono nieco zmienioną postać

$$\widehat{T}^{(2+4)}(k_0) = -\frac{4m(1-\widehat{b})}{4m^2 - k_0^2 - 4m(1-\widehat{b})\widehat{h}(k_0)}. \quad (3.41)$$

3.3.4. Amplituda rozpraszania fotonu

Amplituda rozpraszania $f_{ij}(\omega)$ fotonu o częstotliwości ω na układzie dwupoziomym może zostać odtworzona z pełnego propagatora fotonu [Bjo65, Itz80]. W tym celu należy z propagatora fotonowego odrzucić swobodne propagatory na końcach, a uzyskane wyrażenie sprowadzić na powłokę masy, tzn. uzależnić energię fotonu od jego wektora falowego tak, aby opisywały one rzeczywisty foton. Trzeba zatem wykonać w ostatecznym wzorze następujące podstawienie $k_0 = \omega$, $k = \omega$ i $k' = \omega$. Ten heurystyczny przepis prowadzi do następującego związku pomiędzy amplitudą rozpraszania, a macierzą przejścia

$$f_{ij}(\omega) = g^2(\omega)T_{ij}(\omega). \quad (3.42)$$

W powyższym wzorze argument ω może przyjmować tylko dodatnie wartości, gdyż energia fotonu zawsze jest dodatnia.

W drugim rzędzie rachunku zaburzeń macierz przejścia dla układu spinowego dana jest wzorem (3.38). W związku z tym poszczególne elementy amplitudy rozpraszania fotonu wyrażają się następująco

$$f_{\pm}^{(2)}(\omega) = -\frac{2g^2(\omega)}{2m - \Delta(\omega) \mp \omega - i\Gamma(\omega)}, \quad (3.43a)$$

$$f_0^{(2)}(\omega) = 0, \quad (3.43b)$$

gdzie wprowadziliśmy nowe oznaczenie na zależne od energii fotonu przesunięcie Δ i szerokość Γ rezonansu. W tym rzędzie rachunku zaburzeń są one po prostu odpowiednio częścią rzeczywistą i urojoną funkcji $h(\omega)$

$$\Delta(\omega) = \mathbf{P} \int_0^\infty dk \frac{2g^2(k)}{k^2 - \omega^2}, \quad (3.44a)$$

$$\Gamma(\omega) = \frac{\pi g^2(\omega)}{|\omega|}. \quad (3.44b)$$

Rozpraszanie fotonu z zerowym rzutem momentu pędu na oś z ($M_z = 0$) jest opisywane przez składową f_0 amplitudy rozpraszania. Jak widzimy w najniższym rzędzie rachunku zaburzeń takie fotony w ogóle nie biorą udziału w rozpraszaniu. Jest to konsekwencja zasady zachowania momentu pędu, o której już wielokrotnie mówiliśmy (patrz punkt 2.2.1.). Foton o zerowym rzucie momentu pędu nie może bowiem bezpośrednio indukować przejścia ze stanu podstawowego do stanu wzbudzonego. Takie przejścia mogą być indukowane jedynie przy równoczesnej emisji lub pochłonięciu innych fotonów. Takie procesy są jednak procesami wyższego rzędu w rachunku perturbacyjnym. Jest to zgodne z wnioskami jakie płyną ze wzoru (3.39) na macierz przejścia w czwartym rzędzie rachunku zaburzeń. Nieznikająca część $T_0^{(4)}(k_0)$ będzie skutkowałą niezerową amplitudą rozpraszania fotonu o zerowym rzucie całkowitego momentu pędu w tym rzędzie rachunku.

Przypadek atomu dwupoziomowego

Amplitudę rozpraszania fotonu na atomie dwupoziomowym w drugim rzędzie rachunku zaburzeń można analogicznie otrzymać ze wzoru (3.40) na macierz przejścia. Wyraża się ona wzorem

$$\hat{f}^{(2)}(\omega) = -\frac{4m\hat{g}^2(\omega)}{4m^2 - \omega^2 - 4m\hat{\Delta}(\omega) - 4mi\hat{\Gamma}(\omega)}. \quad (3.45)$$

Podobnie jak w przypadku układu spinowego wprowadziliśmy specjalne oznaczenia na przesunięcie i szerokość rezonansu

$$\hat{\Delta}(\omega) = \mathbf{P} \int_0^\infty dk \frac{\hat{g}^2(\omega)}{k^2 - \omega^2}, \quad (3.46a)$$

$$\hat{\Gamma}(\omega) = \frac{\pi\hat{g}^2(\omega)}{2|\omega|}. \quad (3.46b)$$

Przeanalizujmy teraz dokładniej zachowanie amplitudy rozpraszania w pobliżu rezonansu. W tym celu przepiszmy ją w przybliżeniu do następującej postaci

$$\hat{f}^{(2)}(\omega) \approx -\frac{\hat{g}^2(\omega)}{2m - \hat{\Delta}(\omega) - \omega - i\hat{\Gamma}(\omega)} - \frac{\hat{g}^2(\omega)}{2m - \hat{\Delta}(\omega) + \omega - i\hat{\Gamma}(\omega)}. \quad (3.47)$$

Powyższy wzór otrzymaliśmy zaniedbując wyrazy czwartego rzędu, tzn. kwadrat wyrażenia $\hat{\Delta}(\omega) + i\hat{\Gamma}(\omega)$ oraz jego iloczyn z $\hat{g}^2(\omega)$. W ten sposób otrzymaliśmy wyrażenie na amplitudę rozpraszania, które jest poprawne w pobliżu rezonansu, tzn. gdy $\omega \approx 2m + \hat{\Delta}(\omega)$. Wyrażenie to składa się z dwóch członów, z których pierwszy jest w oczywisty sposób rezonansowy, a drugi nie. Wyrażenie to zgadza się z fenomenologicznym przepisem *tych samych znaków*, który został podany w [And03]. Przepis ten mówi, że szerokość rezonansu $\hat{\Gamma}(\omega)$ występuje w obu członach z tym samym znakiem.

Dużą zaletą sformułowanej przez nas teorii jest fakt, że otrzymaliśmy przepis tych samych znaków bez żadnych fenomenologicznych argumentów. Jest on po prostu bezpośrednią konsekwencją wykonanych przez nas obliczeń i płynie wprost z własności hamiltonianu opisującego atom dwupoziomowy. Wcześniejsze podejścia uniemożliwiały otrzymanie tego prawa na drodze bezpośrednich rachunków.

W tym miejscu należy wyraźnie podkreślić, że udowodniony przez nas przepis tych samych znaków stosuje się jedynie w przypadku zagadnienia rozpraszania fotonu na układzie dwupoziomowym. Jak zostanie pokazane w następnym rozdziale (również bezpośrednim rachunkiem) przepis ten jest nieprawidłowy, gdy zamiast problemu rozpraszania będziemy rozważali problem liniowej odpowiedzi układu. Brak jednoznacznego rozróżnienia tych dwóch istotnie różnych sytuacji fizycznych był w przeszłości źródłem wielu nieporozumień, które w naszym sformułowaniu są wprost rozstrzygnięte.

Na zakończenie tego rozdziału podajmy jeszcze ilościowe wyniki dla bardzo konkretnej doświadczalnej realizacji układu dwupoziomowego jakie płyną z przeprowadzonych przed chwilą obliczeń. W tym celu posłużmy się przykładem, który omówiliśmy w punkcie 1.2.1. na stronie 7. W przykładzie tym rozważaliśmy elektron znajdujący się w przestrzennym stanie podstawowym atomu wodoru umieszczony w zewnętrznym stałym polu magnetycznym o indukcji 10 T. Jak pamiętamy to właśnie na skutek tego zewnętrznego pola magnetycznego dochodzi do zniesienia degeneracji stanu podstawowego ze względu na spin i otrzymujemy dość dobrą doświadczalną realizację układu dwupoziomowego o przerwie energetycznej ok. $1.1 \cdot 10^{-3}$ eV. Ze względu na fakt, że dobrze znamy przestrzenną część funkcji falowej elektronu w takiej sytuacji (wzór (1.19)) możemy, wykorzystując wzór (1.50), znaleźć parametr sprzężenia $g(k)$. Wyraża się on następująco [Bia07]

$$g(k) = \frac{\mu k^2}{\pi\sqrt{3}} \frac{1}{(1 + k^2 a_0^2/4)^2} \approx \frac{\mu k^2}{\pi\sqrt{3}}. \quad (3.48)$$

Poczynione przybliżenie jest słuszne, gdy długość fali odpowiadająca rozważanemu fotonowi jest duża w porównaniu z promieniem Bohra a_0 . Jak łatwo się przekonać z takim przypadkiem mamy do czynienia w tej sytuacji. Długość fali elektromagnetycznej odpowiadająca fotonowi o energii 10^{-3} eV jest rzędu milimetra czyli o siedem rzędów wielkości większa niż promień Bohra⁹. Ta informacja z kolei wraz ze wzorem (3.44b) pozwala nam wyznaczyć szerokość

⁹Warto w tym miejscu dodać, że choć długość fali dla rozważanych przez nas fotonów jest

przejścia pomiędzy stanami takiego qubitu. Jak łatwo sprawdzić dla fotonu o energii równej przerwie energetycznej pomiędzy poziomami szerokość ta wynosi¹⁰

$$\Gamma_{\text{res}} = \Gamma(2\mu B_0) = \frac{8\mu^5}{3\pi\epsilon_0\hbar^4c^5} B_0^3 \approx 2.20 \cdot 10^{-8} \text{ s}^{-1}. \quad (3.49)$$

Ten wynik jest dość zaskakujący. Przyjmując bowiem, że czas życia elektronu w stanie górnym jest rzędu odwrotności szerokości rezonansu dochodzimy do wniosku, że stan wzbudzony takiego qubitu jest bardzo trwały. Średni czas, po którym elektron na skutek spontanicznego wyemitowania fotonu przejdzie ze stanu górnego do stanu podstawowego jest rzędu 10^7 s czyli kilkuset dni! To w praktyce oznacza, że w takim przypadku można zaniedbać wpływ kwantowych fluktuacji pola elektromagnetycznego na utratę informacji zapisanej w qubicie.

Przedstawiona powyżej analiza mogłaby sugerować, że uwzględnienie fluktuacji kwantowych pola elektromagnetycznego ma charakter jedynie akademicki. Należy jednak pamiętać, że decydujący wpływ na szerokość rezonansu ma parametr sprzężenia $g(k)$, który do wielkości Γ wchodzi w drugiej potęgę. Parametr ten jest określony przez kształt przestrzennej części funkcji falowej elektronu i tym samym w różnych sytuacjach fizycznych może różny. Dodatkowo należy mieć na uwadze fakt, że sama możliwość teoretycznego wyliczenia wprost z pierwszych zasad czasu życia elektronu w stanie wzbudzonym ma również dużą wartość teoretyczną, a bez prawidłowego uwzględnienia fluktuacji pola elektromagnetycznego nie można było rozstrzygnąć problemu znaku w członach nierezonansowych.

znacznie większa od promienia Bohra, to nadal jest ona dwa rzędy wielkości mniejsza od długości fali fotonów odpowiedzialnych za strukturę nadsubtelną w atomie. Nie jest zatem błędem pomijanie tej struktury w naszym przykładzie.

¹⁰W otrzymanym wzorze wypisaliśmy jawnie wszystkie niezbędne stałe fizyczne.

Reakcja qubitu na małe zaburzenie

„Musimy pamiętać, że to co obserwujemy nie jest Przyrodą samą w sobie, ale Przyrodą odśloniętą sposobem zadanego pytania.”

Werner Heisenberg

Poprzedni rozdział był poświęcony fizycznym konsekwencjom wynikającym z istnienia oddziaływania układów dwupoziomowych z zewnętrznym kwantowym polem elektromagnetycznym. Przystudiowaliśmy m.in. zjawisko przesunięcia poziomów energetycznych w stosunku do układu nieoddziałującego, a przede wszystkim sprawdziliśmy jaki wpływ ma istnienie układu dwupoziomowego na propagację fotonów. Wyznaczyliśmy amplitudę rozpraszania fotonu na układzie dwupoziomowym z dokładnością do czwartego rzędu rachunku zaburzeń i odtworzyliśmy fenomenologiczny przepis „przeciwnych znaków” dla tej amplitudy.

W tym rozdziale postawimy pytanie odwrotne. Będzie nas interesowało to jak zmieniają się własności układu dwupoziomowego pod wpływem zewnętrznego zaburzenia elektromagnetycznego. Obrazem fizycznym, który powinniśmy mieć w myśli analizując ten problem jest układ dwupoziomowy opisany hamiltonianem (2.12a) lub (2.12b), do którego przykładamy bardzo słabe zewnętrzne pole elektromagnetyczne. Naszym celem jest znalezienie zmian własności układu dwupoziomowego pod wpływem tego zewnętrznego pola.

Odpowiedzi na tak postawione pytanie będziemy poszukiwali w ramach tzw. kwantowej teorii liniowej odpowiedzi, która opisuje pierwszą (liniową) poprawkę wywołaną zewnętrznym zaburzeniem do wartości oczekiwanych operatorów reprezentujących interesujące nas obserwable.

4.1. Kwantowa teoria liniowej odpowiedzi

Rozważmy układ fizyczny opisany niezależnym od czasu hamiltonianem \mathcal{H} oraz pewien hermitowski, niezależny jawnie od czasu w obrazie Schrödingera operator \mathcal{O} , który odpowiada interesującej nas wielkości fizycznej. Jeśli w chwili początkowej układ znajdował się w stanie kwantowym $|\Psi_0\rangle$ to po czasie t wartość oczekiwana rozważanego operatora będzie wyrażała się wzorem

$$\langle \mathcal{O} \rangle(t) = \langle \Psi_0 | e^{i\mathcal{H}t} \mathcal{O} e^{-i\mathcal{H}t} | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \mathcal{O}(t) | \Psi_0 \rangle, \quad (4.1)$$

gdzie $\mathcal{O}(t)$ jest interesującym nas operatorem zapisanym w obrazie Heisenberga względem hamiltonianu \mathcal{H}

$$\mathcal{O}(t) = e^{i\mathcal{H}t} \mathcal{O} e^{-i\mathcal{H}t}. \quad (4.2)$$

Warto w tym miejscu podkreślić, że zupełnie nie precyzujemy jaki konkretnie układ fizyczny opisuje hamiltonian \mathcal{H} . Może to być zarówno układ złożony z jednej cząstki, wielu nieoddziałujących cząstek, jak i nawet układ wielu różnego typu cząstek i pól kwantowych w różny sposób oddziałujących między sobą. Ważne jest jedynie, że hamiltonian \mathcal{H} opisuje cały układ i nie zależy jawnie od czasu.

Założmy teraz, że w pewnej chwili czasu nasz układ fizyczny zostaje delikatnie zaburzony. W języku mechaniki kwantowej taką sytuację opisujemy innym hamiltonianem, który jawnie zależy od czasu i w obrazie Schrödingera wyraża się następująco

$$\mathcal{H}'(t) = \mathcal{H} + \mathcal{H}^{\text{ext}}(t), \quad \mathcal{H}^{\text{ext}}(t) \equiv 0 \quad \text{dla } t < 0. \quad (4.3)$$

Hamiltonian $\mathcal{H}^{\text{ext}}(t)$ opisuje zewnętrzne zaburzenie. Założyliśmy przy tym, dla uproszczenia dalszych rachunków, że zaburzenie jest włączane w chwili $t = 0$. Założenie takie oczywiście nie zmniejsza ogólności rozważań ze względu na fakt, że \mathcal{H} nie zależy od czasu.

Należy się oczywiście spodziewać, że w wyniku takiego zaburzenia zmieniają się różne własności naszego układu i tym samym mogą ulec również zmianie wartości oczekiwane różnych operatorów. Jest to związane z faktem, że ewolucja w czasie zadana jest teraz przez pełen hamiltonian $\mathcal{H}'(t)$, a nie tylko hamiltonian niezaburzony \mathcal{H} . Najłatwiej tą zmianę jest znaleźć rozpoczynając analizę w obrazie Schrödingera, w którym stan układu podlega ewolucji w czasie zgodnie ze wzorem

$$i\partial_t |\tilde{\Psi}(t)\rangle = [\mathcal{H} + \mathcal{H}^{\text{ext}}(t)] |\tilde{\Psi}(t)\rangle. \quad (4.4)$$

Rozwiązania tego równania należy poszukiwać w postaci

$$|\tilde{\Psi}(t)\rangle = e^{-i\mathcal{H}t} U(t) |\Psi_0\rangle. \quad (4.5)$$

Korzystając wprost z równania Schrödingera (4.4) łatwo jest sprawdzić, że operator $U(t)$ spełnia następujące równanie

$$i\partial_t U(t) = \underbrace{e^{i\mathcal{H}t} \mathcal{H}^{\text{ext}}(t) e^{-i\mathcal{H}t}}_{\mathcal{H}_H^{\text{ext}}(t)} U(t) = \mathcal{H}_H^{\text{ext}}(t) U(t) \quad (4.6)$$

z warunkiem początkowym $U(0) = 1$. Wprowadziliśmy przy tym nowe oznaczenie

$$\mathcal{H}_H^{\text{ext}}(t) = e^{i\mathcal{H}t} \mathcal{H}^{\text{ext}}(t) e^{-i\mathcal{H}t} \quad (4.7)$$

na hamiltonian zaburzający w obrazie Heisenberga względem hamiltonianu niezaburzonego \mathcal{H} . Formalne rozwiązanie równania (4.6) możemy zapisać w postaci szeregu chronologicznego

$$U(t) = \mathbb{T} \exp \left[-i \int_0^t dt' \mathcal{H}_H^{\text{ext}}(t') \right] = \mathbb{T} \exp \left[-i \int_{-\infty}^t dt' \mathcal{H}_H^{\text{ext}}(t') \right]. \quad (4.8)$$

Wartość oczekiwana rozważanego przez nas operatora \mathcal{O} w chwili czasu t w takiej sytuacji dana jest wzorem

$$\langle \mathcal{O} \rangle'(t) = \langle \tilde{\Psi}(t) | \mathcal{O} | \tilde{\Psi}(t) \rangle \quad (4.9)$$

$$= \langle \Psi_0 | U^\dagger(t) \mathcal{O}(t) U(t) | \Psi_0 \rangle, \quad (4.10)$$

gdzie użyliśmy wcześniej wprowadzonego oznaczenia (4.2) dla operatora \mathcal{O} w obrazie Heisenberga.

Rozwijając operator $U(t)$ w formalny szereg wyrażeń zawierających kolejne potęgi hamiltonianu zaburzającego $\mathcal{H}_H^{\text{ext}}$ otrzymujemy

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}(t) \rangle' &= \langle \Psi_0 | \left(1 + i \int_{-\infty}^t dt' \mathcal{H}_H^{\text{ext}}(t') + \dots \right) \mathcal{O}(t) \left(1 - i \int_{-\infty}^t dt' \mathcal{H}_H^{\text{ext}}(t') + \dots \right) | \Psi_0 \rangle \\ &= \langle \Psi_0 | \mathcal{O}(t) | \Psi_0 \rangle + i \int_{-\infty}^t dt' \langle \Psi_0 | [\mathcal{H}_H^{\text{ext}}(t'), \mathcal{O}(t)] | \Psi_0 \rangle + \dots \end{aligned} \quad (4.11)$$

Jak widać z powyższego wzoru pierwszy wyraz rozwinięcia to nic innego jak wartość oczekiwana obserwabli \mathcal{O} w sytuacji układu niezaburzonego dana wzorem (4.1). Pierwszą poprawkę do wartości oczekiwanej (4.1) wynikającą z rozwinięcia (4.11) nazywamy *liniową odpowiedzią układu* i ma ona postać

$$\begin{aligned} \delta \langle \mathcal{O}(t) \rangle &= \langle \mathcal{O}(t) \rangle' - \langle \mathcal{O}(t) \rangle \simeq i \int_{-\infty}^t dt' \langle \Psi_0 | [\mathcal{H}_H^{\text{ext}}(t'), \mathcal{O}(t)] | \Psi_0 \rangle \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt' \theta(t' - t) \langle \Psi_0 | [\mathcal{O}(t), \mathcal{H}_H^{\text{ext}}(t')] | \Psi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Jak widać liniową odpowiedź można przedstawić jako pewną całkę z nielokalnego w czasie komutatora zaburzającego hamiltonianu $\mathcal{H}_H^{\text{ext}}(t')$ i operatora $\mathcal{O}(t)$. Jest ona zatem pewnego rodzaju dwupunktową w czasie funkcją korelacji. W celu uniknięcia nieporozumień przypomnijmy w tym miejscu jeszcze raz, że otrzymane przez nas wyrażenie (4.12) na liniową odpowiedź układu obowiązuje dla operatorów zapisanych w obrazie Heisenberga względem hamiltonianu niezaburzonego \mathcal{H} .

Zaburzenie przez sprzężenie do obserwabli

Rozpatrzmy teraz szczególny przypadek zewnętrznego zaburzenia układu, polegający na tym, że zewnętrzne klasyczne pole zaburzające $\delta\Phi$ sprzęga się liniowo do obserwabli, którą jesteśmy zainteresowani. Oznacza to, że hamiltonian zaburzający $\mathcal{H}_H^{\text{ext}}$ ma postać

$$\mathcal{H}_H^{\text{ext}}(t) = \mathcal{O}(t) \delta\Phi(t). \quad (4.13)$$

Warto w tym miejscu zaznaczyć, że z taką sytuacją bardzo często mamy do czynienia w różnych sytuacjach fizycznych. Np. w elektrodynamice można zadać pytanie o zmianę gęstości prądu δj_μ pod wpływem przyłożonego zewnętrznego pola elektromagnetycznego δA^μ . Jak wiadomo hamiltonian takiego sprzężenia jest proporcjonalny do iloczynu $j_\mu \delta A^\mu$. Z takim też przypadkiem będziemy mieli do czynienia w punkcie 4.2., gdy skupimy się na liniowej odpowiedzi układów dwupoziomowych.

W rozpatrywanej sytuacji, tzn. gdy hamiltonian zaburzający jest postaci (4.13), równanie (4.12) przyjmuje postać

$$\delta\langle\mathcal{O}(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathcal{D}_R^\mathcal{O}(t, t') \delta\Phi(t'), \quad (4.14)$$

gdzie wprowadziliśmy nowe oznaczenie na wielkość

$$\mathcal{D}_R^\mathcal{O}(t, t') = -i\theta(t - t') \langle\Psi_0| [\mathcal{O}(t), \mathcal{O}(t')] |\Psi_0\rangle. \quad (4.15)$$

Wielkość ta stanowi centralny punkt naszych zainteresowań, gdyż pozwala ona określać nam jaka będzie liniowa poprawka do wartości oczekiwanej danego operatora wywołana zadaniem zewnętrznym polem, które się do niego sprzęga. W zależności od kontekstu funkcję tę nazywa się wymiennie *funkcją liniowej odpowiedzi*, gdy mamy na myśli jej znaczenie fizyczne lub *propagatorem retardowanym* operatora \mathcal{O} , gdy rozpatrujemy jej własności matematyczne.

Odpowiedź w stanie własnym hamiltonianu

Jeśli stan $|\Psi_0\rangle$ jest stanem własnym hamiltonianu niezaburzonego \mathcal{H} , tzn.

$$\mathcal{H}|\Psi_0\rangle = E_\Psi|\Psi_0\rangle, \quad (4.16)$$

to propagator retardowany $\mathcal{D}_R^\mathcal{O}(t, t')$ jest funkcją jedynie różnicy $t - t'$. Istotnie, wykorzystując równanie ewolucji (4.2) łatwo pokazać, że ma on postać

$$\mathcal{D}_R^\mathcal{O}(t, t') = -i\theta(t - t') e^{iE_\Psi(t-t')} \langle\Psi_0| \mathcal{O} e^{-i\mathcal{H}(t-t')} \mathcal{O} |\Psi_0\rangle + c.c. \quad (4.17)$$

W takiej sytuacji będziemy używali tego samego oznaczenia na propagator zmieniając jedynie liczbę zmiennych, od których on zależy, tzn.

$$\mathcal{D}_R^\mathcal{O}(t) \equiv \mathcal{D}_R^\mathcal{O}(t, 0) = \mathcal{D}_R^\mathcal{O}(t - t', t'). \quad (4.18)$$

Jeśli zatem wartość oczekiwana obserwabli obliczana jest w stanie własnym hamiltonianu \mathcal{H} to wtedy liniowa odpowiedź układu (4.14) jest splotem retardowanego propagatora i zaburzającego pola zewnętrznego

$$\delta\langle\mathcal{O}(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathcal{D}_R^\mathcal{O}(t - t') \delta\Phi(t'). \quad (4.19)$$

Oznacza to, że w dziedzinie częstości (tzn. po wykonaniu transformaty Fouriera obu stron równania (4.19)) związek ten będzie miał wyjątkowo prostą

postać prawa Hooke'a – „wchylenie” (odpowiedź układu) jest proporcjonalne do „siły” (zewnętrznego pola), która je wymusza

$$\delta\langle\mathcal{O}(\omega)\rangle = \mathcal{D}_R^{\mathcal{O}}(\omega)\delta\Phi(\omega). \quad (4.20)$$

Funkcje $\mathcal{D}_R^{\mathcal{O}}(\omega)$, $\langle\mathcal{O}(\omega)\rangle$ i $\delta\Phi(\omega)$ są odpowiednimi transformatami Fouriera

$$\mathcal{D}_R^{\mathcal{O}}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \mathcal{D}_R^{\mathcal{O}}(t), \quad (4.21a)$$

$$\delta\langle\mathcal{O}(\omega)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \delta\langle\mathcal{O}(t)\rangle, \quad (4.21b)$$

$$\delta\Phi(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \delta\Phi(t). \quad (4.21c)$$

4.2. Funkcje liniowej odpowiedzi układów dwupoziomowych

W przypadku układów dwupoziomowych wielkościami fizycznymi, których zmiany pod wpływem zewnętrznego pola nas interesują są *trzy składowe spinu* (dla układu spinowego) i *indukowany moment dipolowy* (dla atomu dwupoziomowego). W języku drugiej kwantyzacji w obrazie Heisenberga są one reprezentowane przez następujące operatory

$$\text{Operator spinu:} \quad s(t) = \Psi^\dagger(t)\boldsymbol{\sigma}\Psi(t), \quad (4.22a)$$

$$\text{Operator momentu dipolowego:} \quad D(t) = \Psi^\dagger(t)\sigma_x\Psi(t). \quad (4.22b)$$

Jak wynika z hamiltonianów oddziaływania (2.12a) i (2.12b) operatory te sprzęgają się liniowo do zewnętrznego pola elektromagnetycznego Φ . W związku z tym hamiltonian zewnętrznego zaburzenia spełnia warunek (4.13). Mamy zatem do czynienia ze sprzężeniem zewnętrznego pola zaburzającego do obserwabli, która nas interesuje

$$\mathcal{H}_H^{\text{ext}} = \Psi^\dagger(t)\boldsymbol{\sigma}\Psi(t) \cdot \delta\Phi(t), \quad (4.23a)$$

$$\widehat{\mathcal{H}}_H^{\text{ext}} = \Psi^\dagger(t)\sigma_x\Psi(t) \delta\Phi(t). \quad (4.23b)$$

Liniowa odpowiedź układu dwupoziomowego na zewnętrzne zaburzenie jest tym samym zawarta w odpowiednich propagatorach retardowanych obserwabli, które mają postać (4.15). W przypadku układu spinowego propagator ten nazywa się *podatnością magnetyczną*

$$\chi_{ij}(t, t') = -i\theta(t - t')\langle G | [s_i(t), s_j(t')] | G \rangle. \quad (4.24)$$

Zgodnie ze wzorem (4.14) liniowa poprawka do wartości oczekiwanej poszczególnych składowych spinu wywołanych zewnętrznym zaburzeniem $\delta\Phi(t)$ dana

jest wzorem

$$\begin{aligned}\delta\langle G|s_i(t)|G\rangle &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt' \theta(t-t') \langle G|[s_i(t), s_j(t')]|G\rangle \delta\Phi_j(t') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{ij}(t, t') \delta\Phi_j(t').\end{aligned}\quad (4.25a)$$

Ponieważ stan podstawowy $|G\rangle$ jest stanem własnym pełnego hamiltonianu, to w dziedzinie częstości związek ten sprowadza się do prostego wyrażenia algebraicznego

$$\delta\langle G|S_i(\omega)|G\rangle = \chi_{ij}(\omega) \delta\Phi_j(\omega).\quad (4.25b)$$

Podatność magnetyczna $\chi_{ij}(\omega)$ opisuje zatem odpowiedź układu spinowego na zewnętrzne zaburzające pole elektromagnetyczne, które jest monochromatyczne.

W przypadku układu dwupoziomowego realizowanego jako atom dwupoziomowy (TLA) propagator retardowany reprezentujący liniową odpowiedź układu nazywa się (z dokładnością do stałego czynnika) *polaryzowalnością atomu*

$$\alpha(t, t') = iA\theta(t-t') \langle G|[D(t), D(t')]|G\rangle.\quad (4.26)$$

Wstawiony dodatkowo współczynnik A dla pojedynczego atomu dwupoziomowego jest równy (patrz np. [Mil04, Berm06]) $A = d^2/3\hbar$, gdzie d charakteryzuje siłę przejścia dipolowego pomiędzy poziomami. W powyższej definicji polaryzowalności atomu zmieniony jest również znak wyrażenia na przeciwny w stosunku do definicji podatności magnetycznej (4.24). Jest to spowodowane względami historycznymi, tak aby zachować zgodność ze standardowym wyrażeniem Kramersa-Heisenberga na polaryzowalność atomu [Kra25].

Wykorzystując definicję polaryzowalności (4.26) otrzymujemy następujący wzór na liniową odpowiedź atomu dwupoziomowego na zewnętrzne zaburzenie $\delta\Phi$

$$\begin{aligned}\delta\langle G|D(t)|G\rangle &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt' \theta(t-t') \langle G|[D(t), D(t')]|G\rangle \delta\Phi(t') \\ &= -\frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \alpha(t, t') \delta\Phi(t').\end{aligned}\quad (4.27a)$$

W dziedzinie częstości związek ten ma postać

$$\delta\langle G|D(\omega)|G\rangle = -\frac{1}{A} \alpha(\omega) \delta\Phi(\omega).\quad (4.27b)$$

4.3. Związek z propagatorami pola elektromagnetycznego

Jak pokazaliśmy w poprzednim punkcie funkcje liniowej odpowiedzi dla układów dwupoziomowych opisane są przez propagatory retardowane operatora

spinu lub momentu dipolowego. Wynikało to z faktu, że zewnętrzne pole zaburzące $\delta\Phi$ sprzęgało się bezpośrednio do obserwabli, która nas interesowała. Ta szczególna własność hamiltonianu oddziaływania \mathcal{H}_I , tzn. fakt że interesująca nas obserwabla sprzęga się do kwantowego pola elektromagnetycznego, pozwoli nam teraz pokazać, że funkcje liniowej odpowiedzi dają się wyrazić przez retardowane propagatory pola fotonowego.

Dla ustalenia uwagi skupmy się na układzie dwupoziomowym realizowanym jako unieruchomiona cząstka obdarzona spinem, który jest opisany hamiltonianem (2.12a). Przypomnijmy, że podatność magnetyczna dana jest poprzez propagator retardowany operatora spinu

$$\chi_{ij}(t, t') = -i\theta(t - t') \langle G | [\Psi^\dagger(t) \sigma_i \Psi(t), \Psi^\dagger(t') \sigma_j \Psi(t')] | G \rangle. \quad (4.28)$$

Pokażmy teraz, że jest on związany z retardowanym propagatorem pola elektromagnetycznego, który w odróżnieniu od propagatora feynmanowskiego zdefiniowany jest następująco¹

$$\mathcal{D}_{Rij}(k, k', t, t') = -i\theta(t - t') \langle G | [\Phi_i(k, t), \Phi_j(k', t')] | G \rangle. \quad (4.29)$$

Aby znaleźć wspomniany związek pomiędzy tymi dwoma propagatorami podziałajmy na propagator (4.29) operatorem różniczkowym $\partial_t^2 + k^2$ analogicznie jak zrobiliśmy to dla propagatora feynmanowskiego (2.83)

$$\begin{aligned} & (\partial_t^2 + k^2) i\mathcal{D}_{Rij}(k, k', t, t') \\ &= -\delta(t - t') \delta(k - k') \delta_{ij} + \langle G | [\{ (\partial_t^2 + k^2) \Phi_i(k, t) \}, \Phi_j(k', t')] | G \rangle. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Powyższy wzór otrzymaliśmy wykorzystując odpowiednio reguły komutacyjne (2.21b) dla operatorów pola elektromagnetycznego w obrazie Heisenberga. Stosując teraz równania dynamiki (2.22b) można sprowadzić powyższy wzór do postaci

$$\begin{aligned} & (\partial_t^2 + k^2) i\mathcal{D}_{Rij}(k, k', t, t') \\ &= -\delta(t - t') \delta(k - k') \delta_{ij} - g(k) \theta(t - t') \langle G | [\underbrace{\Psi^\dagger(t) \sigma_i \Psi(t)}_{S_i(t)}, \Phi_j(k', t')] | G \rangle. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Aby uzyskać po prawej stronie komutator dwóch operatorów spinu i tym samym otrzymać podatność magnetyczną podziałajmy dodatkowo na równanie (4.31) operatorem różniczkowym $\partial_{t'}^2 + k'^2$. Otrzymamy wtedy

$$\begin{aligned} & (\partial_{t'}^2 + k'^2) (\partial_t^2 + k^2) i\mathcal{D}_{Rij}(k, k', t, t') \\ &= -(\partial_{t'}^2 + k'^2) \delta(t - t') \delta(k - k') \delta_{ij} + g(k) g(k') \theta(t - t') \langle G | [S_i(t), S_j(t')] | G \rangle. \end{aligned} \quad (4.32)$$

¹Wykorzystując niezmienniczość teorii względem przesunięcia w czasie łatwo pokazać, że ten propagator również jest funkcją jedynie różnicy swoich argumentów czasowych.

Wykorzystując definicję podatności magnetycznej χ_{ij} możemy przepisać powyższy wzór do postaci

$$\begin{aligned} (\partial_t^2 + k'^2) (\partial_t^2 + k^2) \mathcal{D}_{Rij}(k, k', t, t') \\ = i (\partial_t^2 + k'^2) \delta(t - t') \delta(k - k') \delta_{ij} + g(k) g(k') \chi_{ij}(t, t'). \end{aligned} \quad (4.33)$$

Ostatnim krokiem w tej analizie jest skorzystanie z definicji i własności retardowanego propagatora dla swobodnego pola elektromagnetycznego. Jest on zdefiniowany podobnie jak propagator (4.29). Różnicą jest to, że zamiast pól w obrazie Heisenberga występują pola w obrazie oddziaływania (2.26c)

$$D_{Rij}(k, k', t, t') = -i\theta(t - t') \langle G | [\Phi_i(k, t), \Phi_j(k', t')] | G \rangle. \quad (4.34)$$

Podobnie jak było to zrobione w punkcie 2.7.1. dla swobodnych propagatorów Feynmana można łatwo pokazać, że swobodny propagator retardowany jest funkcją Greena dla operatora różniczkowego $\partial_t^2 + k^2$, tzn. że zachodzi związek

$$(\partial_t^2 + k^2) D_{Rij}(t, t') = -\delta(t - t') \delta(k - k') \delta_{ij}. \quad (4.35)$$

Wykorzystując powyższą własność swobodnego retardowanego propagatora fotonu możemy wzór (4.33) przepisać do postaci

$$\begin{aligned} i\mathcal{D}_{Rij}(k, k', t, t') = iD_{Rij}(k, k', t, t') \\ + \sum_{mn} \int_0^\infty dk_1 g(k) \int_0^\infty dk_2 g(k') \int_{-\infty}^\infty dt_1 \int_{-\infty}^\infty dt_2 \\ D_{Rim}(k, k_1, t, t_1) \chi_{mn}(t_1, t_2) D_{Rnj}(k_2, k', t_2, t'). \end{aligned} \quad (4.36)$$

Otrzymany powyżej związek ma strukturę bardzo podobną do wzoru (3.12), który wyraża związek feynmanowskiego propagatora fotonu z macierzą rozpraszania T . Dla porządku wypiszmy oba te związki w postaci symbolicznej

$$\overset{\sim}{\sim} = \overset{\sim}{\sim} + \overset{\sim}{\sim} \bullet T(k_0) \bullet \overset{\sim}{\sim} \quad (4.37a)$$

$$\overset{\text{R}}{\sim} = \overset{\text{R}}{\sim} + \overset{\text{R}}{\sim} \bullet \chi(k_0) \bullet \overset{\text{R}}{\sim} \quad (4.37b)$$

W drugim wzorze wprowadziliśmy nowe, analogiczne do (3.13), symboliczne oznaczenie na retardowany propagator fotonu oraz funkcję powstającą przez jego jednokrotne odcałkowanie

$$\overset{\text{R}}{\sim} = \mathcal{D}_{Rij}(k, k', k_0), \quad (4.38a)$$

$$\overset{\sim}{\sim} = D_{Rij}(k, k', k_0), \quad (4.38b)$$

$$\overset{\sim}{\sim} \bullet = \int_0^\infty dk' g(k') D_{Rij}(k, k', k_0). \quad (4.38c)$$

Oczywiście analogiczny rachunek można przeprowadzić dla modelu atomu dwupoziomowego. W tym przypadku propagator fotonu nie ma wskaźników wektorowych, a wzór (4.36) przybiera postać

$$i\mathcal{D}_R(k, k', t, t') = iD_R(k, k', t, t') - \frac{1}{A} \int_0^\infty dk_1 g(k) \int_0^\infty dk_2 g(k') \int_{-\infty}^\infty dt_1 \int_{-\infty}^\infty dt_2 D_R(k, k_1, t, t_1) \alpha(t_1, t_2) D_R(k_2, k', t_2, t'). \quad (4.39)$$

Symbolicznie można go zatem zapisać następująco

$$\overset{\text{R}}{\text{~~~~~}} = \overset{\text{R}}{\text{~~~~~}} - \frac{1}{A} \overset{\text{R}}{\text{~~~~~}} \cdot \alpha(k_0) \cdot \overset{\text{R}}{\text{~~~~~}} \quad (4.40)$$

Przedstawiony powyżej rachunek pokazuje, że gdybyśmy umieli znaleźć retardowany propagator prawdziwego fotonu \mathcal{D}_R , to moglibyśmy z niego wyłuskać informację o funkcji liniowej odpowiedzi układu. Podobnie zatem jak było to w przypadku macierzy przejścia T , cały problem znajdowania funkcji liniowej odpowiedzi sprowadza się do znalezienia propagatora fotonowego. Różnica jest tylko taka, że tym razem potrzebny jest nam propagator retardowany, a nie feynmanowski.

4.4. Reprezentacja spektralna propagatorów

Jak już wielokrotnie mieliśmy okazję się przekonać metody kwantowej teorii pola były doskonałymi narzędziami do znajdowania propagatorów feynmanowskich. Dzięki uporządkowanemu diagramatycznie rachunkowi zaburzeń mogliśmy je wyliczać perturbacyjnie właściwie z dowolną dokładnością. Jedynym ograniczeniem była konieczność żmudnego wykonywania wielu prostych całek. W przypadku propagatorów retardowanych nie mamy żadnych dostępnych narzędzi, które pozwalałyby sprawnie prowadzić rachunki perturbacyjne. Jak już o tym wspominaliśmy w rozdziale 2. znane twierdzenia kwantowej teorii pola pozwalają nam prowadzić rachunek zaburzeń tylko dla feynmanowskich funkcji korelacji.

Głębsza analiza struktury propagatorów pozwala jednak przekonać się, że istnieje pewien, dość prosty sposób konstruowania propagatorów retardowanych z propagatorów feynmanowskich. Zachodzi bowiem bezpośredni i jednoznaczny związek pomiędzy wszystkimi rodzajami funkcji korelacji tych samych pól. W relatywistycznie niezmienniczych kwantowych teoriach pola związek ten wynika bezpośrednio z czasoprzestrzennych symetrii teorii i prowadzi do tzw. reprezentacji spektralnej Källena-Lehmana propagatorów [Fet71, Bia75, Bjo65, Itz80]. W naszej teorii, ze względu na poczynione uproszczenia i brak pewnych symetrii (np. brak niezmienniczości ze względu na przesunięcia w przestrzeni), związek ten jest troszkę inny. Wynika on jedynie z niezmienniczości teorii ze względu na przesunięcia i odwrócenie w czasie.

Niemniej jednak, podobnie jak w przypadku reprezentacji Källena-Lehmana, pozwala on konstruować propagatory retardowane z perturbacyjnie obliczalnych propagatorów Feynmana.

4.4.1. Macierz spektralna

Aby znaleźć związek pomiędzy propagatorami retardowanymi, a feynmanowskimi przeanalizujemy dokładniej następujące wyrażenie

$$\langle G | \Phi_i(k, t) \Phi_j(k', t') | G \rangle. \quad (4.41)$$

Analiza tego wyrażenia jest bardzo ważna, bo stanowi ono centralny składnik definicji obu typów propagatorów. Wykorzystując równania dynamiki w obrazie Heisenberga (2.20) oraz fakt, że stan podstawowy $|G\rangle$ jest stanem własnym pełnego hamiltonianu teorii z pewną wartością własną E_G możemy powyższe wyrażenie zapisać w postaci

$$\begin{aligned} & \langle G | \Phi_i(k, t) \Phi_j(k', t') | G \rangle & (4.42) \\ &= e^{iE_G(t-t')} \langle G | \Phi_i(k) e^{-i\mathcal{H}t} e^{i\mathcal{H}t'} \Phi_j(k') | G \rangle \\ &= e^{iE_G(t-t')} \sum_n \langle G | \Phi_i(k) e^{-i\mathcal{H}t} | n \rangle \langle n | e^{i\mathcal{H}t'} \Phi_j(k') | G \rangle \\ &= e^{iE_G(t-t')} \sum_n e^{-iE_n(t-t')} \langle G | \Phi_i(k) | n \rangle \langle n | \Phi_j(k') | G \rangle \\ &= \int_0^\infty dM e^{-iM(t-t')} \sum_n \delta(M - E_n + E_G) \langle G | \Phi_i(k) | n \rangle \langle n | \Phi_j(k') | G \rangle. \end{aligned}$$

W drugiej i trzeciej równości wykorzystaliśmy dodatkowo fakt, że istnieje zupełny zbiór $\{|n\rangle\}$ stanów stacjonarnych, które są stanami własnymi pełnego hamiltonianu z wartościami własnymi E_n . Granice całkowania w ostatniej linijce wynikają bezpośrednio z faktu, że stan podstawowy $|G\rangle$ jest stanem o najniższej energii i w związku z tym dla każdego n zachodzi nierówność $E_n \geq E_G$.

Występującą w wyrażeniu (4.42) funkcję

$$\mathfrak{M}_{ij}(M, k, k') = \sum_n \delta(M - E_n + E_G) \langle G | \Phi_i(k) | n \rangle \langle n | \Phi_j(k') | G \rangle \quad (4.43)$$

będziemy ze względów historycznych nazywali *macierzą spektralną* wyrażenia (4.41). Łatwo się przekonać, że ma ona następującą własność

$$\mathfrak{M}_{ij}(M, k, k') = \mathfrak{M}_{ji}^*(M, k', k). \quad (4.44)$$

Można zatem powiedzieć, że jest ona hermitowska jeśli jako wskaźniki potraktuje się również pędy k i k' .

4.4.2. Rozkład spektralny propagatorów

Wykorzystując definicję macierzy spektralnej (4.43) feynmanaowski propagator fotonu można przedstawić w następującej postaci

$$\begin{aligned}
 i\mathcal{D}_{Fij}(k, k', t, t') &= \langle G | \mathbb{T} \Phi_i(k, t) \Phi_j(k', t') | G \rangle \\
 &= \theta(t - t') \langle G | \Phi_i(k, t) \Phi_j(k', t') | G \rangle + \theta(t' - t) \langle G | \Phi_j(k', t') \Phi_i(k, t) | G \rangle \\
 &= \int_0^\infty dM \left[\theta(t - t') e^{-iM(t-t')} \mathfrak{M}_{ij}(M, k, k') + \theta(t' - t) e^{-iM(t'-t)} \mathfrak{M}_{ji}(M, k', k) \right].
 \end{aligned} \tag{4.45}$$

Całkowicie analogicznie można przedstawić retardowany propagator fotonu

$$\begin{aligned}
 i\mathcal{D}_{Rij}(k, k', t, t') &= \theta(t - t') \langle G | [\Phi_i(k, t) \Phi_j(k', t')] | G \rangle \\
 &= \theta(t - t') \langle G | \Phi_i(k, t) \Phi_j(k', t') | G \rangle - \theta(t - t') \langle G | \Phi_j(k', t') \Phi_i(k, t) | G \rangle \\
 &= \int_0^\infty dM \theta(t - t') \left[e^{-iM(t-t')} \mathfrak{M}_{ij}(M, k, k') - e^{-iM(t'-t)} \mathfrak{M}_{ji}(M, k', k) \right].
 \end{aligned} \tag{4.46}$$

Z powyższych wzorów jasno wynika, że oba typy propagatorów wyrażają się przez te same macierze spektralne. Można powiedzieć zatem, że cała wiedza o wszystkich rodzajach dwupunktowych funkcji korelacji pola elektromagnetycznego jest zawarta w tych macierzach. Jedyne co różni poszczególne funkcje korelacji to sposób w jaki macierze spektralne wchodzą w ich definicje. Ta dość kluczowa, a zarazem bardzo prosto otrzymana, obserwacja jest źródłem bardzo wielu cennych informacji o funkcjach korelacji w różnych kwantowych teoriach pola (patrz np. [Fet71, Itz80]). Nam pozwoli za chwilę otrzymać bardzo potrzebny związek pomiędzy propagatorem retardowanym, a feynmanaowskim.

4.4.3. Zależność między propagatorami

Jak widzimy propagatory (4.45) i (4.46) są funkcjami jedynie różnicy czasów. Wykorzystując wzór (2.39) na transformacie Fouriera funkcji Heviside'a łatwo się przekonać, że propagatory te w dziedzinie częstości mają postać

$$\mathcal{D}_{Fij}(k, k', k_0) = \int_0^\infty dM \left(\frac{\mathfrak{M}_{ij}(M, k, k')}{k_0 - M + i\epsilon} - \frac{\mathfrak{M}_{ij}^*(M, k, k')}{k_0 + M - i\epsilon} \right), \tag{4.47a}$$

$$\mathcal{D}_{Rij}(k, k', k_0) = \int_0^\infty dM \left(\frac{\mathfrak{M}_{ij}(M, k, k')}{k_0 - M + i\epsilon} - \frac{\mathfrak{M}_{ij}^*(M, k, k')}{k_0 + M + i\epsilon} \right). \tag{4.47b}$$

Powyższe wzory na propagatory fotonowe w dziedzinie częstości pokazują, że jedyna różnica pomiędzy propagatorem retardowanym, a feynmanaowskim polega na odwróceniu znaku w drugim ułamku rozwinięcia spektralnego. Różnica polega więc jedynie na zmianie przepisu obchodzenia biegunów na płaszczyźnie zespolonej przy całkowaniu. Ze względu na fakt, że $M \geq 0$ równoważnie można powiedzieć, że przetłumaczenie propagatora Feynmana na retardowany polega na zamianie wyrażenia $i\epsilon$ na $i \operatorname{sgn}(k_0)\epsilon$.

Zanim przejdziemy do dalszego analizowania związku pomiędzy propagatorami zwróćmy uwagę na jedną bardzo ważną własność macierzy spektralnej. W tym celu musimy na chwilę wrócić do wzoru (3.12), który wyraża ogólną postać feynmanowskiego propagatora fotonowego. Jak pamiętamy ze wzoru tego wynika, że propagator fotonowy nie zmienia się przy zamianie składowych pędowych $k \leftrightarrow k'$, tzn. że ma własność $\mathcal{D}_{Fij}(k, k', k_0) = \mathcal{D}_{Fij}(k', k, k_0)$. Jak wynika ze wzoru (3.12) zmienne pędowe wchodzą do propagatora poprzez symetryczne ze względu na zamianę argumentów i rzeczywiste funkcje zmiennych k i k' , a w związku z tym macierz spektralna \mathfrak{M}_{ij} musi mieć podobną własność

$$\mathfrak{M}_{ij}(M, k, k') = \mathfrak{M}_{ij}(M, k', k). \quad (4.48)$$

Zauważmy, że gdyby macierz spektralna \mathfrak{M}_{ij} była macierzą diagonalną, to dzięki własności (4.48) związek pomiędzy propagatorem retardowanym, a feynmanowskim dałoby się zapisać w następującej postaci

$$\operatorname{Re} \mathcal{D}_R(k, k', k_0) = \operatorname{Re} \mathcal{D}_F(k, k', k_0), \quad (4.49a)$$

$$\operatorname{Im} \mathcal{D}_R(k, k', k_0) = \operatorname{sgn}(k_0) \operatorname{Im} \mathcal{D}_F(k, k', k_0). \quad (4.49b)$$

Powyższy związek jest bardzo dobrze znany w kwantowych teoriach pola układów jednorodnych i izotropowych [Fet71]. W takich bowiem sytuacjach zawsze mamy do czynienia z diagonalną macierzą spektralną, która ma własność (4.48)².

Choć rozpatrywane przez nas układy dwupoziomowe nie są ani izotropowe, ani jednorodne, to w szczególnych okolicznościach związek (4.49) również zachodzi. Najlepiej widać to w przypadku atomu dwupoziomowego (TLA). Wtedy mamy do czynienia jedynie ze składową $i = j = x$ macierzy spektralnej i w naturalny sposób spełnione są oba warunki – diagonalność i symetrię w zmiennych pędowych $k \leftrightarrow k'$. Dla atomu dwupoziomowego zachodzi zatem związek (4.49).

W przypadku układu dwupoziomowego realizowanego jako cząstka ze spinem sytuacja jest bardziej skomplikowana. W ogólności bowiem macierz przejścia $P_{ij}(k_0)$, propagator $\mathcal{D}_{Fij}(k, k', k_0)$, a zatem również macierz spektralna $\mathfrak{M}_{ij}(M, k, k')$ nie są diagonalne we wskaźnikach i oraz j . Jak jednak dobrze pamiętamy z rozdziału 3. wielkości te są diagonalne (w każdym rzędzie rachunku zaburzeń) jeśli będziemy prowadzili obliczenia w bazie momentu pędu. Tym samym związek (4.49), choć nieprawdziwy w ogólności, będzie słuszny w tej bazie.

²W takich sytuacjach diagonalność macierzy wynika bezpośrednio z jednorodności układu, a własność (4.48) z jego izotropowości.

4.5. Macierz przejścia i funkcje liniowej odpowiedzi

W poprzednim punkcie pokazaliśmy, że istnieje bezpośredni związek pomiędzy propagatorem Feynmana, a propagatorem retardowanym pola elektromagnetycznego³. To oznacza, że każde otrzymane perturbacyjne kolejne przybliżenie czasowo uporządkowanego propagatora pozwala nam natychmiast odtworzyć przybliżenie propagatora retardowanego w tym samym rzędzie rachunku zaburzeń. Tym samym udało nam się ominąć zasygnalizowany wcześniej problem braku opracowanych metod dla funkcji korelacji innych niż feynmanowskie. Po otrzymaniu propagatora retardowanego tą metodą możemy skorzystać ze wzoru (4.36) i wyłuskać z niego funkcję liniowej odpowiedzi, którą jesteśmy zainteresowani. Można też bezpośrednio skorzystać z podobieństwa wzorów (4.37a) i (4.37b). Ze wzorów tych widać jasno, że jeśli tylko zachodzi wzór (4.49), to analogiczny związek musi zachodzić pomiędzy macierzą przejścia $T(k_0)$ a odpowiednią funkcją liniowej odpowiedzi. W przypadku atomu dwupoziomowego jest to związek z polaryzowalnością atomu, który ma postać

$$\operatorname{Re} \alpha(\omega) = -A \operatorname{Re} \hat{T}(\omega), \quad (4.50a)$$

$$\operatorname{Im} \alpha(\omega) = -A \operatorname{sgn}(\omega) \operatorname{Im} \hat{T}(\omega). \quad (4.50b)$$

W przypadku układu spinowego jest to związek z podatnością magnetyczną i zgodnie z wcześniejszymi uwagami zachodzi on jedynie w bazie momentu pędu

$$\operatorname{Re} \chi_a(\omega) = \operatorname{Re} T_a(\omega), \quad (4.51a)$$

$$\operatorname{Im} \chi_a(\omega) = \operatorname{sgn}(\omega) \operatorname{Im} T_a(\omega). \quad (4.51b)$$

Indeks a w powyższym wzorze przyjmuje jedną z trzech wartości $+$, $-$ lub 0 numerujące odpowiednie składowe w bazie momentu pędu.

Na zakończenie tego punktu podajmy jeszcze jeden bardzo ważny wniosek jaki płynie z przedstawionej powyżej analizy. Zauważmy, że ze wzoru (4.47b) wyrażającego spektralny rozkład propagatora retardowanego wynika, że propagator retardowany spełnia warunek

$$\mathcal{D}_{Rij}(k, k', -k_0) = \mathcal{D}_{Rji}^*(k, k', k_0). \quad (4.52)$$

W literaturze warunek ten znany jest pod nazwą *warunku krzyżowania*. Istnieje twierdzenie (patrz np. [Fet71]) mówiące, że jest on spełniony dla każdego propagatora retardowanego w teorii, która jest niezmiennicza ze względu na odwrócenie czasu. W przypadku atomu dwupoziomowego warunek ten pociąga za sobą automatycznie warunek na polaryzowalność atomu

$$\alpha^*(\omega) = \alpha(-\omega). \quad (4.53)$$

³Oczywiście w sposób analogiczny można pokazać istnienie związków pomiędzy funkcjami korelacji innych typów. W przypadku funkcji liniowej odpowiedzi, którymi się zajmujemy związki te nie mają jednak większego znaczenia.

Fizyczne znaczenie i obligatoryjna konieczność spełnienia warunku (4.53) były w literaturze mocno podkreślane (patrz np. [Lou06]). W stosowanych dotychczas metodach perturbacyjnych wyliczenia polaryzowalności atomu dwupoziomowego warunek ten był dodatkowym, heurystycznym argumentem, który pozwalał uzyskiwać poprawne wyniki w kolejnych rzędach rachunku zaburzeń. W stosowanych przez nas metodach perturbacyjnych warunek ten jest jak widać automatycznie spełniony. Tym samym nie potrzebujemy żadnych dodatkowych heurystycznych argumentów, aby poprawnie wyliczyć polaryzowalność atomu dwupoziomowego w dowolnym rzędzie rachunku zaburzeń.

4.5.1. Podatność magnetyczna układu spinowego

W rozdziale 3. znaleźliśmy macierze przejścia T i \hat{T} z dokładnością do czwartego rzędu rachunku zaburzeń. Wykorzystując wnioski jakie płyną z zależności między propagatorami retardowanymi i feynmanowskimi możemy zatem teraz w bardzo prosty sposób podać z tą dokładnością podatność magnetyczną układu spinowego oraz polaryzowalność atomu dwupoziomowego.

Ze wzoru (3.38) i związku (4.51) wynika, że w drugim rzędzie rachunku zaburzeń podatność magnetyczna pojedynczego spinu ma następujące składowe w bazie momentu pędu

$$\chi_{\pm}^{(2)}(\omega) = -\frac{2}{2m \mp \omega - 2[\Delta(\omega) \pm i\text{sgn}(\omega)\Gamma(\omega)]}, \quad (4.54a)$$

$$\chi_0^{(2)}(\omega) = 0. \quad (4.54b)$$

Jak widać unieruchomiony pojedynczy spin w najniższym rzędzie rachunku zaburzeń nie reaguje na mod pola elektromagnetycznego, który ma znikający rzut momentu pędu. Jest to bezpośrednia konsekwencja niemożności indukowania przejść jednofotonowych bez zmiany rzutu momentu pędu. Sytuacja ta zmienia się w czwartym rzędzie rachunku perturbacyjnego, gdzie dopuszczone są procesy dwufotonowe. Jak wynika ze wzoru (3.39) w tym rzędzie podatność magnetyczna wyraża się wzorami

$$\chi_{\pm}^{(2+4)}(\omega) = -\frac{2(1-b)}{2m \mp \omega - \delta - 2(1-b)[\Delta(\omega) \pm i\text{sgn}(\omega)\Gamma(\omega)]}, \quad (4.55a)$$

$$\chi_0^{(2+4)}(\omega) = P^{(2+4)}(\omega). \quad (4.55b)$$

4.5.2. Polaryzowalność atomu dwupoziomowego

W analogiczny sposób jak w poprzednim podpunkcie możemy wykorzystując wzór (3.40) wyznaczyć polaryzowalność atomu dwupoziomowego w drugim rzędzie rachunku zaburzeń

$$\alpha^{(2)}(\omega) = \frac{4mA}{4m^2 - \omega^2 - 4m[\hat{\Delta}(\omega) + i\text{sgn}(\omega)\hat{\Gamma}(\omega)]}. \quad (4.56)$$

Ponieważ polaryzowalność atomu dwupoziomowego dość często studiowana jest w literaturze [And03, All75, Berm06, Lou06, Mil04] przyjrzyjmy się bliżej jej własnościom. W tym celu dokonajmy analogicznego przybliżenia jakiego dokonaliśmy dla amplitudy rozpraszania w tym samym rzędzie (wzór (3.47)). Zanedbując wyrazy rzędu wyższego niż drugi możemy wzór (4.56) zapisać w formie przybliżonej

$$\alpha^{(2)}(\omega) \approx \frac{A}{2m - \widehat{\Delta}(\omega) - \omega - i\text{sgn}(\omega)\widehat{\Gamma}(\omega)} + \frac{A}{2m - \widehat{\Delta}(\omega) + \omega - i\text{sgn}(\omega)\widehat{\Gamma}(\omega)}. \quad (4.57)$$

Jak widzimy, inaczej niż to było w przypadku amplitudy rozpraszania fotonu, w zależności od znaku częstości ω członem rezonansowym jest albo pierwszy albo drugi człon. Jeśli dokonalibyśmy kolejnego przybliżenia i wzięli pod uwagę tylko człony rezonansowe powyższy wzór moglibyśmy zapisać w postaci

$$\alpha^{(2)}(\omega) \approx \frac{A}{2m - \widehat{\Delta}(\omega) - \omega - i\widehat{\Gamma}(\omega)} + \frac{A}{2m - \widehat{\Delta}(\omega) + \omega + \widehat{\Gamma}(\omega)}. \quad (4.58)$$

Inaczej mówiąc wzór ten jest dobrym przybliżeniem wzoru (4.56) jedynie w pobliżu obydwu częstości rezonansowych $\omega \approx \pm 2m$. Jak widać polaryzowalność atomu dwupoziomowego w tym przybliżeniu jest zgodna z fenomenologicznym przepisem *przeciwnych znaków*, który można spotkać w literaturze [Buc00, Mil04, Berm06]. Przepis ten mówi, że szerokość rezonansu $\widehat{\Gamma}(\omega)$ występuje w obu członach z przeciwnym znakiem. Przepis ten jest zatem inny niż przepis tych samych znaków, który ma zastosowanie przy wyznaczaniu amplitudy rozpraszania (patrz punkt 3.3.4.). Tym samym udało nam się, stosując metody kwantowej teorii pola i wykonując ściśle rachunki bez żadnych dodatkowych heurystycznych argumentów, rozstrzygnąć pewien spór, który od pewnego czasu się toczył i dotyczył wyboru odpowiedniego przepisu znakowego. Z naszej analizy wynika jasno, że oba przepisy są poprawne, ale mają zastosowanie w dwóch różnych sytuacjach fizycznych. Przepis tych samych znaków należy stosować przy dyskusowaniu amplitudy rozpraszania fotonu na układzie dwupoziomowym. Przepis przeciwnych znaków ma natomiast zastosowanie przy opisie polaryzowalności atomu czyli wielkości, która charakteryzuje zmianę własności układu dwupoziomowego pod wpływem zewnętrznego zaburzenia.

Polaryzowalność atomu w czwartym rzędzie rachunku zaburzeń łatwo jest otrzymać wykorzystując wzór (3.41). Wykonując podstawienie zgodnie z wprowadzonym przepisem (4.50) otrzymujemy

$$\alpha^{(2+4)}(\omega) = \frac{4m(1 - \widehat{b})A}{4m^2 - \omega^2 - 4m(1 - \widehat{b}) \left[\widehat{\Delta}(\omega) + i\text{sgn}(\omega)\widehat{\Gamma}(\omega) \right]}. \quad (4.59)$$

Otrzymany przez nas wzór w czwartym rzędzie rachunku perturbacyjnego ma inną postać niż wzór wyprowadzony wcześniej w pracy [Lou06]. Różnica wynika z faktu, że autorzy tamtej pracy pominęli pewne istotne poprawki, które mają wkład w czwartym rzędzie rachunku zaburzeń. Zostały

pominięte m.in. poprawki związane z przesunięciem poziomu podstawowego układu dwupoziomowego, które są w naszym przypadku reprezentowane diagramami (d) i (g) przedstawionymi na rysunku 3.1. Tym samym otrzymany przez autorów wspomnianej pracy wzór nie jest poprawny. Stosowane przez nas metody oparte na diagramatycznym rachunku zaburzeń Feynmana pozwalają uwzględnić wszystkie istotne poprawki w każdym rzędzie rachunku zaburzeń. Wszystkie obliczenia sprowadzają się do wykonywania odpowiednich całek z dobrze określonych wyrażeń i w każdym rzędzie rachunku wiadomo jakich obliczeń należy dokonać. Jest to duża zaleta stosowania metody diagramów Feynmana, która przyniosła w historii wiele cennych wyników. Jak widzimy nam pozwoliła m.in. rozstrzygnąć spór prawidłowego wyboru znaku i uzyskać prawidłowy wzór na polaryzowalność atomu dwupoziomowego w czwartym rzędzie rachunku zaburzeń.

Atom dwupoziomowy z degeneracją

*„Wszystko co w fizyce nie jest zakazane,
jest obowiązkowe.”*

Murray Gell-Mann

Przedstawiona w poprzednich rozdziałach teoria qubitów daje się dość prosto uogólnić na układy o większej liczbie poziomów (tzw. qudity). Zwiększenie stopni swobody powoduje oczywiście zwiększenie liczby modów pola elektromagnetycznego, które mogą oddziaływać z rozważanym układem. W tym rozdziale chciałbym przedyskutować najprostsze uogólnienie teorii qubitów na sytuację układu o dwóch poziomach energetycznych, z których jeden jest zdegenerowany. Z sytuacją taką mielibyśmy na przykład do czynienia, gdybyśmy rozważali przejście dipolowe $1S \leftrightarrow 2P$ w atomie wodoru. Jak wiemy pierwszy stan wzbudzony jest w takiej sytuacji trzykrotnie zdegenerowany i nawet w sytuacji, gdy wszystkie inne przejścia moglibyśmy zaniedbać, nie ma żadnej możliwości sprowadzenia tego problemu do sytuacji atomu dwupoziomowego (TLA). Jeśli bowiem możliwe jest spontaniczne przejście pomiędzy stanem podstawowym, a jednym ze stanów wzbudzonych, to ze względu na symetrię sferyczną problemu nie ma żadnego fizycznego powodu wykluczającego przejście na inny stan. W związku z tym musimy uwzględnić w naszym opisie wszystkie trzy stany wzbudzone. W odróżnieniu od modelu spinowego i modelu atomu dwupoziomowego dyskutowanych do tej pory, ten model będzie w dalszej części rozprawy nazywał modelem atomu dipolowego.

Opisane powyżej zagadnienie pozwoli nam również zrozumieć skąd bierze się wzór (1.56) na parametr sprzężenia w przypadku atomu dwupoziomowego. Wyprowadzony heurystycznie w punkcie 1.3.3. wzór zostanie teraz potwierdzony bezpośrednim rachunkiem.

5.1. Hamiltonian atomu dipolowego

Zgodnie z naszym założeniem stany kwantowe w rozpatrywanej przez nas sytuacji reprezentowane są przez promienie w czterowymiarowej przestrzeni Hilberta. Bazą w tej przestrzeni jest zbiór czterech funkcji własnych hamiltonianu atomowego \mathcal{H}_{dip} , które będziemy oznaczali przez $\chi_3(\mathbf{r})$, $\chi_2(\mathbf{r})$, $\chi_1(\mathbf{r})$ oraz $\chi_0(\mathbf{r})$. Wartości własne odpowiadają oczywiście energiom elektronu na poszczególnych poziomach energetycznych i w związku z tym są równe $m_{0\downarrow}$

i $m_{0\uparrow}$ odpowiednio dla stanu podstawowego i stanów wzbudzonych. Dla ustalenia uwagi przyjmijmy, że funkcje $\chi_i(\mathbf{r})$ są funkcjami własnymi atomu wodoru stanów 1S i 2P.

Hamiltonian \mathcal{H}_{Dip} opisuje całkowicie swobodny atom dipolowy i można go oczywiście reprezentować przez macierz postaci

$$\mathcal{H}_{\text{Dip}} = \check{m}_0 = \begin{pmatrix} m_{0\uparrow} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m_{0\uparrow} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_{0\uparrow} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m_{0\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

Dla wygody prowadzenia dalszych rachunków, w przeciwieństwie do poprzednich modeli, w tym przypadku nie wydzieliliśmy z hamiltonianu swobodnego żadnej stałej i tym samym przerwę energetyczną traktujemy teraz jako macierz.

Oddziaływanie z zewnętrznym polem elektromagnetycznym ma standardową postać sprzężenia do pola elektrycznego¹

$$\mathcal{H}_{\text{I}} = -e \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}). \quad (5.2)$$

Zgodnie z założeniami naszego modelu funkcje $\chi_i(\mathbf{r})$ są jednocześnie funkcjami własnymi operatora momentu pędu. Przy czym funkcja stanu podstawowego jest sferycznie symetryczna, a funkcje stanów wzbudzonych mają całkowity moment pędu $J = 1$ i rzuty na oś z odpowiednio $+1$, -1 i 0 . W związku z tym funkcje te mają postać

$$\chi_0(\mathbf{r}) = \varphi_g(r), \quad (5.3a)$$

$$\chi_1(\mathbf{r}) = -Y_{1,1}(\mathbf{n})\varphi_e(r), \quad (5.3b)$$

$$\chi_2(\mathbf{r}) = -Y_{1,-1}(\mathbf{n})\varphi_e(r), \quad (5.3c)$$

$$\chi_3(\mathbf{r}) = Y_{1,0}(\mathbf{n})\varphi_e(r). \quad (5.3d)$$

Funkcje $\varphi_g(r)$ i $\varphi_e(r)$ są radialnymi częściami funkcji falowych w stanie podstawowym i wzbudzonym, a $Y_{JM}(\mathbf{n})$ harmonikami sferycznymi.

Wykorzystując te definicje znajdziemy teraz postać hamiltonianu oddziaływania (5.2) w bazie funkcji własnych hamiltonianu (5.1). W tym celu wykorzystajmy rozwinięcie (1.33a) pola elektrycznego na mody multipolowe. Ze względu na występujący iloczyn $\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r})$ hamiltonian oddziaływania będzie miał dość prostą postać

$$\mathcal{H}_{\text{I}} = er \sum_{JM} \int_0^\infty dk J(J+1) T_{JMk}(\mathbf{r}) c_{JM}^{(e)}(k) + h.c. \quad (5.4)$$

Jak widać w hamiltonianie tym biorą udział jedynie multipole elektryczne. Wynika to bezpośrednio z definicji (1.37a) i (1.37c). Rzeczywiście, wykorzy-

¹W punkcie 1.2.2. uzasadnialiśmy już pochodzenie takiej postaci hamiltonianu oddziaływania.

stując te definicje bardzo łatwo można wykazać następujące związki

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}_{JMk}^{(m)}(\mathbf{r}) = k \underbrace{\mathbf{r} \cdot \mathbf{L}}_0 T_{JMk}(\mathbf{r}) = 0, \quad (5.5a)$$

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}_{JMk}^{(e)}(\mathbf{r}) = \underbrace{i\mathbf{r} \cdot (\nabla \times \mathbf{L})}_{-L^2} T_{JMk}(\mathbf{r}) = -J(J+1) T_{JMk}(\mathbf{r}). \quad (5.5b)$$

Elementy macierzowe hamiltonianu oddziaływania w bazie funkcji własnych $\chi_i(\mathbf{r})$ mają zatem postać

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{Iij} &= \int d^3r \chi_i^*(\mathbf{r}) \mathcal{H}_I \chi_j(\mathbf{r}) = \\ &= \frac{e}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dk \sum_{JM} \sqrt{kJ(J+1)} \int_0^\infty dr r^2 j_J(kr) \left[\alpha_{ij}^{JM}(r) c_{JM}^{(e)}(k) + \alpha_{ji}^{*JM}(r) c_{JM}^{\dagger(e)}(k) \right], \end{aligned} \quad (5.6)$$

gdzie wprowadziliśmy oznaczenie $\alpha_{ij}^{JM}(r)$ na następującą wielkość

$$\alpha_{ij}^{JM}(r) = \int d\Omega \chi_i^*(\mathbf{r}) Y_{JM}(\mathbf{n}) \chi_j(\mathbf{r}). \quad (5.7)$$

Zauważmy, że $\alpha_{ij}^{JM}(r)$, ze względu na własności harmonik sferycznych, jest równe 0 prawie dla każdego J i M . Aby się o tym przekonać należy bezpośrednio skorzystać z definicji (5.3) funkcji własnych $\chi_i(\mathbf{r})$.

Zauważmy po pierwsze, że dla $i = j = 0$ funkcje własne są sferycznie symetryczne i w związku z tym $\alpha_{0,0}^{JM} = 0$. Po drugie, gdy bierzemy pod uwagę elementy z $i, j > 0$ okazuje się, że współczynniki $\alpha_{ij}^{JM}(r)$, dla których $i = j$ także są równe zero. Jest tak dlatego, że całka kąтова z iloczynu trzech harmonik sferycznych jest niezerowa tylko wtedy, gdy jedna z tych harmonik jest sferycznie symetryczna, a dwie pozostałe wzajemnie sprzężone. Tego warunku nie możemy jednak spełnić, bo harmoniki pochodzące z funkcji falowych mają $J = 1$, a w rozkładzie pola na multipole nie występują składniki z $J = 0$.

Pozostają zatem do wyliczenia amplitudy przejścia pomiędzy stanem podstawowym, a kolejnymi stanami wzbudzonymi. W tym przypadku będą one różne od zera tylko wtedy, gdy harmonika sferyczna $Y_{JM}(\mathbf{n})$ pochodząca od pola elektromagnetycznego będzie sprzężona do harmoniki zawartej w stanie wzbudzonym $\chi_j(\mathbf{r})$. W rezultacie aktywne będą tylko te składowe pola elektromagnetycznego, które mają $J = 1$. Bezpośrednim i prostym rachunkiem można się przekonać, że

$$\alpha_{1,0}^{1,1}(r) = \alpha_{0,1}^{1,-1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \varphi_g(r) \varphi_e(r), \quad (5.8a)$$

$$\alpha_{2,0}^{1,-1}(r) = \alpha_{0,2}^{1,1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \varphi_g(r) \varphi_e(r), \quad (5.8b)$$

$$\alpha_{3,0}^{1,0}(r) = \alpha_{0,3}^{1,0}(r) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \varphi_g(r) \varphi_e(r). \quad (5.8c)$$

Pozostałe amplitudy $\alpha_{ij}^{JM}(r)$ są równe zero.

Wykorzystując te rachunki możemy znacznie uprościć wyrażenie (5.6) na elementy macierzowe hamiltonianu oddziaływania. Wyrażają się one następująco

$$\mathcal{H}_{10i} = \frac{e}{\pi\sqrt{2}} \int_0^\infty dk \sqrt{k} \int_0^\infty dr r^2 j_1(kr) \varphi_g(r) \varphi_e(r) [d_i(k) + d_i^\dagger(k)]. \quad (5.9)$$

W powyższym wzorze wprowadziliśmy nowe oznaczenie na operatory kreacji i anihilacji aktywnych multipoli pola elektromagnetycznego

$$d_1(k) = c_{1,-1}^{(e)}(k), \quad d_2(k) = c_{1,1}^{(e)}(k), \quad d_3(k) = c_{1,0}^{(e)}(k). \quad (5.10)$$

Jak widać w tym przypadku, podobnie jak to miało miejsce w modelu spinowym, w oddziaływaniu bierze udział pole wektorowe

$$\Phi(k) = \frac{\mathbf{d}^\dagger(k) + \mathbf{d}(k)}{\sqrt{2k}}. \quad (5.11)$$

Przypomnijmy, że jest to pole wektorowe zbudowane z multipoli *elektrycznych* pola elektromagnetycznego.

Jeśli zdefiniujemy następujące macierze τ_i

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.12)$$

to hamiltonian oddziaływania można zapisać w następującej postaci

$$\mathcal{H}_I = \boldsymbol{\tau} \cdot \int_0^\infty dk \check{g}(k) \Phi(k). \quad (5.13)$$

Wzór na parametr sprzężenia $\check{g}(k)$ wynika bezpośrednio ze wzoru (5.9) i wyraża się następującym wzorem

$$\check{g}(k) = \frac{ek}{\pi} \int_0^\infty dr r^2 j_1(kr) \varphi_g(r) \varphi_e(r). \quad (5.14)$$

Pełny hamiltonian atomu dipolowego ma zatem postać

$$\check{\mathcal{H}} = \check{m}_0 + \sum_i \int_0^\infty dk \omega_k d_i^\dagger(k) d_i(k) + \boldsymbol{\tau} \cdot \int_0^\infty dk \check{g}(k) \Phi(k). \quad (5.15)$$

Elektryczny moment dipolowy

Momentem dipolowym d przejścia pomiędzy stanem podstawowym, a jednym ze stanów wzbudzonych² nazywamy wielkość zdefiniowaną następującym wzorem

$$d = e \int d^3r \chi_0^*(\mathbf{r}) z \chi_3(\mathbf{r}). \quad (5.16)$$

²Ze względu na pełną symetrię pomiędzy stanami wzbudzonymi w rozważanym przez nas atomie dipolowym wystarczy rozważyć tylko jeden z nich. W prezentowanych rachunkach wybrany został stan $\chi_3(\mathbf{r})$.

Użyteczne okazuje się zdefiniowanie dodatkowo odpowiedniej przestrzennej gęstości momentu dipolowego wg wzoru

$$\kappa(\mathbf{r}) = \frac{e}{d} \chi_0(\mathbf{r}) z \chi_3(\mathbf{r}). \quad (5.17)$$

Unormowanie w tej definicji zostało dobrane tak, aby był spełniony warunek jaki powinna spełniać gęstość przestrzenna każdej wielkości

$$\int d^3r \kappa(\mathbf{r}) = 1. \quad (5.18)$$

Wykorzystując definicję funkcji falowych stanów atomowych (5.3) oraz definicję harmonik sferycznych (1.43) łatwo pokazać, że gęstość $\kappa(\mathbf{r})$ można przedstawić w postaci

$$\kappa(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \frac{e}{d} \varphi_g(r) r \varphi_e(r) Y_{0,0}(\mathbf{n}) Y_{1,0}(\mathbf{n}) Y_{1,0}(\mathbf{n}). \quad (5.19)$$

Wykonując transformatę Fouriera tak otrzymanej wielkości do przestrzeni pędów otrzymujemy wyrażenie

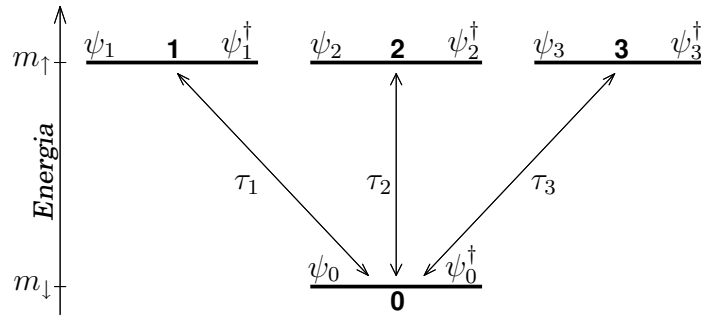
$$\begin{aligned} \kappa(\mathbf{k}) &= \int d^3r e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \kappa(\mathbf{r}) \\ &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \frac{e}{d} \int_0^\infty dr r^2 \varphi_g(r) r \varphi_e(r) \int d\Omega e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} Y_{0,0}(\mathbf{n}) Y_{1,0}(\mathbf{n}) Y_{1,0}(\mathbf{n}). \end{aligned} \quad (5.20)$$

Aby znaleźć bezpośredni związek pomiędzy gęstością momentu dipolowego, a parametrem sprzężenia $\check{g}(k)$ zdefiniujemy wielkość, która powstaje przez uśrednienie transformaty Fouriera $\kappa(\mathbf{k})$ po zmiennych kątowych w przestrzeni pędów

$$\kappa(k) = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_k \kappa(\mathbf{k}). \quad (5.21)$$

Tak zdefiniowana wielkość jest dokładnym odpowiednikiem funkcji $\rho(k)$, którą wprowadziliśmy w przypadku układu spinowego. Jest to średnia radialna gęstość momentu dipolowego w przestrzeni pędów. Wstawiając do tej definicji wyrażenie (5.20) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \kappa(k) &= \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_k \kappa(\mathbf{k}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{12\pi}} \frac{e}{d} \int_0^\infty dr r^2 \varphi_g(r) r \varphi_e(r) \underbrace{\int d\Omega \int d\Omega_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} Y_{00}(\mathbf{n}) Y_{10}(\mathbf{n}) Y_{10}(\mathbf{n})}_{\frac{6\sqrt{\pi}}{kr} \left(\frac{\sin(kr)}{k^2 r^2} - \frac{\cos(kr)}{kr} \right)} \\ &= \sqrt{3} \frac{e}{kd} \int_0^\infty dr r^2 j_1(kr) \varphi_g(r) \varphi_e(r). \end{aligned} \quad (5.22)$$



Rysunek 5.1: Atom dipolowy. Rysunek schematycznie przedstawia strukturę stanów kwantowych w atomie o dwóch poziomach energetycznych z trzykrotną degeneracją poziomu wzbudzonego. Ze względu na przyjęte założenia możliwe są tylko przejścia ze stanu podstawowego na jeden ze stanów wzbudzonych. W formalizmie drugiej kwantyzacji operatory ψ_i oraz ψ_i^\dagger zmieniają liczbę elektronów w odpowiednich stanach.

Porównując tak otrzymany wzór ze wzorem (5.14) na parametr sprzężenia $\check{g}(k)$ widzimy, że wielkości te są do siebie proporcjonalne. Możemy zatem ostatecznie wyrazić parametr sprzężenia przez średnią radialną gęstość momentu dipolowego w przestrzeni pędów

$$\check{g}(k) = \frac{dk^2}{\pi\sqrt{3}}\kappa(k). \quad (5.23)$$

Otrzymany przez nas wzór jest dokładnie taki sam jak wyprowadzony przez nas heurystycznie wzór (1.56) dla atomu dwupoziomowego.

5.2. Teoria pola dla atomu dipolowego

Zgodnie z przyjętą przez nas w poprzednich rozdziałach metodologią będziemy studiowali własności atomu dipolowego w języku kwantowej teorii pola. Podstawowe związki wyprowadzone w poprzednich rozdziałach będą miały zastosowanie również w tym przypadku. Różnicą będzie forma propagatora elektronowego, który w tym przypadku będzie zespoloną macierzą 4×4 ze względu na fakt, że elektron może obsadzać jeden z czterech stanów kwantowych. Zmieni się również reguła Feynmana dla wierzchołka oddziaływania, co jest bezpośrednią konsekwencją innej postaci hamiltonianu oddziaływania z kwantowym polem elektromagnetycznym.

5.2.1. Druga kwantyzacja

Punktem wyjścia sformułowania naszej teorii quditu jest „drugie kwantowanie” stanów elektronu. W tym celu rozszerzamy naszą, tym razem czterowymiarową, przestrzeń Hilberta stanów swobodnego atomu do szesnastowymia-

rowej przestrzeni. Dopuszczamy tym samym wszystkie możliwe kombinacje obsadzeń stanów kwantowych atomu. Następnie wprowadzamy cztery operatory anihilacji $\{\psi_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3\}$, które usuwają jeden elektron z danego stanu energetycznego, oraz sprzężone do nich operatory kreacji $\{\psi_0^\dagger, \psi_1^\dagger, \psi_2^\dagger, \psi_3^\dagger\}$, które dodają jeden elektron (patrz rysunek 5.1.). Ze względu na fermionową naturę elektronów operatory te spełniają odpowiednie reguły antykomutacyjne

$$\{\psi_\alpha, \psi_\beta^\dagger\} = \delta_{\alpha\beta} \quad (5.24a)$$

$$\{\psi_\alpha, \psi_\beta\} = \{\psi_\alpha^\dagger, \psi_\beta^\dagger\} = 0. \quad (5.24b)$$

W odróżnieniu od sytuacji przedstawionej w poprzednich rozdziałach wskaźniki fermionowe α i β mogą przyjmować teraz cztery wartości 0, 1, 2 lub 3.

Wprowadzone przez nas operatory anihilacji i kreacji formujemy w czteroelementowe operatory pola fermionowego, przez które będziemy wyrażali wszystkie interesujące nas wielkości fizyczne. Analogicznie do wzoru (2.6) są one zdefiniowane następująco

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_2 \\ \psi_1 \\ \psi_0 \end{pmatrix}, \quad \Psi^\dagger = (\psi_3^\dagger, \psi_2^\dagger, \psi_1^\dagger, \psi_0^\dagger). \quad (5.25)$$

Używając tak zdefiniowanych operatorów pola można zapisać (o czym łatwo się przekonać bezpośrednim rachunkiem) hamiltonian atomu dipolowego (5.15) w sposób naturalny dla procedury drugiej kwantyzacji

$$\check{\mathcal{H}}_0 = \Psi^\dagger \check{m} \Psi + \sum_i \int_0^\infty dk \omega_k d_i^\dagger(k) d_i(k), \quad (5.26a)$$

$$\check{\mathcal{H}}_I = \Psi^\dagger \tau \Psi \cdot \int_0^\infty dk \check{g}(k) \Phi(k) - \Psi^\dagger \delta \check{m} \Psi. \quad (5.26b)$$

W powyższych wzorach, spodziewając się, że niezbędna będzie renormalizacja przerwy energetycznej, dodaliśmy do hamiltonianu swobodnego wyrażenie $\Psi^\dagger \delta \check{m} \Psi$ i odjeliśmy je w hamiltonianie oddziaływania. Przy czym, w odróżnieniu od sytuacji z punktu 3.2., wielkość $\delta \check{m}$ jest macierzą 4×4 i użyliśmy oznaczenia $\check{m} = \check{m}_0 + \delta \check{m}$.

5.2.2. Ewolucja operatorów w czasie

Obraz Heisenberga

Operatory pola w obrazie Heisenberga spełniają równania dynamiki analogiczne do równań (2.22) dla układu spinowego. Jediną różnicą jest zmiana występujących tam macierzy Pauliego σ na używane w tym przypadku macie-

rze τ zdefiniowane wzorem (5.12)

$$(i\partial_t - \check{m}_0) \Psi(t) = \sum_i \int_0^\infty dk g(k) \Phi_i(k, t) \tau_i \Psi(t), \quad (5.27a)$$

$$(\partial_t^2 + k^2) \Phi_i(k, t) = -\check{g}(k) \Psi^\dagger(t) \tau_i \Psi(t). \quad (5.27b)$$

Operatory pola spełniają oczywiście następujące równoczesne reguły (w zależności od statystyki) komutacyjne i antykomutacyjne

$$\{\Psi_\alpha(t), \Psi_\beta^\dagger(t)\} = \delta_{\alpha\beta}, \quad (5.28a)$$

$$[\Phi_i(k, t), \Phi_j(k', t)] = \delta_{ij} \delta(k - k'). \quad (5.28b)$$

Obraz oddziaływania

Operatory w obrazie oddziaływania ewoluują zgodnie z równaniem (2.23). Wykorzystując jawną postać wzoru na hamiltonian swobodny (5.26a) z łatwością można znaleźć wyrażenie na ewolucję operatorów pola dla atomu dipolowego. Jest ono całkowicie analogiczna do wzorów (2.26)

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix} \psi_3 e^{-im_\uparrow t} \\ \psi_2 e^{-im_\uparrow t} \\ \psi_1 e^{-im_\uparrow t} \\ \psi_0 e^{-im_\downarrow t} \end{pmatrix}, \quad (5.29a)$$

$$\Psi^\dagger(t) = (\psi_3^\dagger e^{im_\uparrow t}, \psi_2^\dagger e^{im_\uparrow t}, \psi_1^\dagger e^{im_\uparrow t}, \psi_0^\dagger e^{im_\downarrow t}), \quad (5.29b)$$

$$\Phi_i(k, t) = \frac{d_i(k) e^{-i\omega_k t} + d_i^\dagger(k) e^{i\omega_k t}}{\sqrt{2k}}. \quad (5.29c)$$

Hamiltonian oddziaływania w tym obrazie wyraża się następująco

$$\check{\mathcal{H}}_I(t) = \Psi^\dagger(t) \tau \Psi(t) \cdot \int_0^\infty dk \check{g}(k) \Phi(k, t) - \Psi^\dagger(t) \delta \check{m} \Psi(t). \quad (5.30)$$

5.2.3. Propagator swobodnego pola fermionowego

Ze względu na inną strukturę operatorów pola fermionowego zmienia się również jego propagatory – zarówno w teorii z oddziaływaniami jak i teorii swobodnej. Propagator oddziałującego fermionu jest zdefiniowany oczywiście ogólnym wzorem (2.30a) i w dalszej części tego rozdziału będziemy go wyznaczać metodami perturbacyjnymi. Propagator swobodnego pola fermionowego jest zdefiniowany wzorem (2.36a)

$$S_{\alpha\beta}(t, t') = -i \langle g | \mathbb{T} \Psi_\alpha(t) \Psi_\beta^\dagger(t') | g \rangle \quad (5.31)$$

i możemy go wyznaczyć wykorzystując wzory ewolucji (5.29). Jak łatwo sprawdzić wprost z tej definicji wynika, że ma on postać

$$iS_F(t, t') = \theta(t - t') \mathbf{P}_\uparrow e^{-im_\uparrow(t-t')} - \theta(t' - t) \mathbf{P}_\downarrow e^{-im_\downarrow(t-t')}. \quad (5.32)$$

W powyższym wzorze użyliśmy operatorów rzutowych \mathbf{P}_\uparrow i \mathbf{P}_\downarrow , które są zdefiniowane następująco³

$$\mathbf{P}_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P}_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.33)$$

Całkowicie analogicznie jak było to zrobione w punkcie 2.4.1. możemy znaleźć propagator swobodnego elektronu w dziedzinie częstości wykonując transformatę Fouriera

$$S_F(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} e^{-ip_0(t-t')} S_F(p_0). \quad (5.34a)$$

Łatwo sprawdzić, że wtedy

$$S_F(p_0) = \frac{\mathbf{P}_\uparrow}{p_0 - m_\uparrow + i\epsilon} + \frac{\mathbf{P}_\downarrow}{p_0 - m_\downarrow - i\epsilon}. \quad (5.34b)$$

5.2.4. Reguły Feynmana

Podstawowym elementem prowadzenia rachunku zaburzeń w naszej teorii są diagramy Feynmana. Z samej konstrukcji wynika, że wszystkie reguły rysowania diagramów przedstawione w punkcie 2.6.1. stosują się również przypadku modelu atomu dipolowego. Jeśli natomiast chodzi o reguły przypisywania diagramom odpowiednich wyrażeń algebraicznych to jedyne istotne różnice są dwie:

- każdej linii fermionowej należy przypisać wyrażenie

$$iS_F(p_0) = i \left(\frac{\mathbf{P}_\uparrow}{p_0 - m_\uparrow + i\epsilon} + \frac{\mathbf{P}_\downarrow}{p_0 - m_\downarrow - i\epsilon} \right),$$

- każdemu wierzchołkowi oddziaływania należy przypisać wyrażenie

$$-iV_i(k) = -i\check{g}(k)\tau_i.$$

Wszystkie inne reguły są dokładnie takie same jak w przypadku układu spinowego i w związku z tym nie ma potrzeby ich powtórnie wymieniać.

Na zakończenie tego punktu dodajmy, że podczas wyliczania różnych fizycznych wielkości dla atomu dipolowego w kolejnych rzędach rachunku zaburzeń często będziemy korzystali z następujących algebraicznych własności macierzy τ

$$\tau_i \mathbf{P}_\uparrow = \mathbf{P}_\downarrow \tau_i, \quad \tau_i \mathbf{P}_\downarrow = \mathbf{P}_\uparrow \tau_i, \quad \sum_{i=1}^3 \tau_i \tau_i = \mathbf{P}_\uparrow + 3\mathbf{P}_\downarrow. \quad (5.35)$$

³W punkcie 2.4.1. użyliśmy tych samych oznaczeń dla innych operatorów rzutowych (wzór (2.46)). To powtórzenie oznaczeń użyte zostało jednak celowo, aby podkreślić całkowitą analogię pomiędzy układami dwupoziomowymi z i bez degeneracji.

5.3. Poprawki radiacyjne do propagatorów

Jak podkreśliliśmy w poprzednim punkcie jedyną różnicą w regułach Feynmana w stosunku do układu spinowego jest zmiana wyrażenia na propagator elektronowy i zmiana macierzy σ na τ w wierzchołku oddziaływania. Z tego wynika, że związki podstawowe pomiędzy propagatorami wyprowadzone w punkcie 2.7. i wynikające z nich wzory łączące propagatory pól w obrazie Heisenberga i Diraca z odpowiednimi funkcjami energii własnej są również prawdziwe w teorii atomu dipolowego. W tym przypadku mają one postać

$$\mathcal{S}_F(p_0) = \frac{1}{S_F(p_0)^{-1} - \check{\Sigma}(p_0)}, \quad (5.36a)$$

$$\mathcal{D}_{Fij}(k, k', k_0) = D_{Fij}(k, k', k_0) + \frac{\check{g}(k)}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon} \underbrace{\left[\frac{1}{\check{P}(k_0)^{-1} - \check{h}(k_0)} \right]}_{\check{T}_{ij}(k_0)} \frac{\check{g}(k')}{k_0^2 - k'^2 + i\epsilon}. \quad (5.36b)$$

Wprowadzona przez nas funkcja $\check{h}(k_0)$ we wzorze (5.36b) jest zdefiniowana analogicznie jak funkcja $h(k_0)$ z punktu 3.1.2.

$$\check{h}(k_0) = \int_0^\infty dk \frac{\check{g}^2(k)}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon}. \quad (5.37)$$

5.3.1. Renormalizacja przerwy energetycznej

Ze względu na związek (5.36a) przerwa energetyczna pomiędzy stanami w teorii z oddziaływaniem jest inna niż w teorii bez oddziaływań. W związku z tym zachodzi potrzeba jej zrenormalizowania. Procedurę tą wykonujemy całkowicie analogicznie jak było to przedstawione w punkcie 3.2. dla układu spinowego i atomu dwupoziomowego (TLA).

W najniższym rzędzie rachunku zaburzeń wkład do energii własnej elektronu reprezentowany jest przez trzy diagramy Feynmana⁴

$$-i\check{\Sigma}^{(2a)}(p_0) = \text{diagram} = -i \int_0^\infty dk \frac{\check{g}^2(k)}{2k} \left[\frac{\mathbf{P}_\uparrow}{p_0 + k - m_\downarrow - i\epsilon} + \frac{3\mathbf{P}_\downarrow}{p_0 - k - m_\uparrow + i\epsilon} \right], \quad (5.38a)$$

$$-i\check{\Sigma}^{(2b)}(p_0) = \text{diagram} = 0, \quad (5.38b)$$

$$-i\check{\Sigma}^{(2c)}(p_0) = \text{diagram} = i\delta\check{m}. \quad (5.38c)$$

⁴Szczegóły rachunków perturbacyjnych znajdują się w Załączniku.

Po zebraniu wszystkich wkładów funkcja energii własnej w drugim rzędzie rachunku zaburzeń ma postać

$$\check{\Sigma}^{(2)}(p_0) = \int_0^\infty dk \frac{\check{g}^2(k)}{2k} \left[\frac{\mathbf{P}_\uparrow}{p_0 + k - m_\downarrow - i\epsilon} + \frac{3\mathbf{P}_\downarrow}{p_0 - k - m_\uparrow + i\epsilon} \right] - \delta\check{m}. \quad (5.39)$$

Postępując dokładnie tak samo jak w punkcie 3.2. wyznaczamy poprawkę masową. Ze względu na fakt, że tym razem przerwa energetyczna \check{m} jest macierzą (patrz punkt 5.1.) poprawka masowa $\delta\check{m}$ również ma taką postać. Można ją wyznaczyć poszukując miejsc zerowych mianownika propagatora elektronowego. Prowadzi to do następującej zależności

$$\delta\check{m} = \mathbf{P}_\uparrow \Sigma(m_\uparrow) + \mathbf{P}_\downarrow \Sigma(m_\downarrow) = \int_0^\infty dk \frac{\check{g}^2(k)}{2k} \left[\frac{\mathbf{P}_\uparrow}{k + \Delta\check{m}} - 3 \frac{\mathbf{P}_\downarrow}{k + \Delta\check{m}} \right]. \quad (5.40)$$

W powyższym wzorze użyliśmy skróconego oznaczenia na przerwę energetyczną $\Delta\check{m} = m_\uparrow - m_\downarrow$.

Przesunięcie poszczególnych poziomów energetycznych pod wpływem oddziaływania możemy znaleźć rozkładając macierz $\delta\check{m}$ na odpowiednie podprzestrzenie

$$\delta\check{m} = \delta m_\uparrow \mathbf{P}_\uparrow + \delta m_\downarrow \mathbf{P}_\downarrow, \quad (5.41a)$$

gdzie δm_\uparrow i δm_\downarrow są poprawkami do energii odpowiednio górnego i dolnego poziomu energetycznego. Jak łatwo sprawdzić zachodzą wzory

$$\delta m_\uparrow = \int_0^\infty dk \frac{\check{g}^2(k)}{2k} \frac{1}{k + \Delta\check{m}}, \quad \delta m_\downarrow = -3 \int_0^\infty dk \frac{\check{g}^2(k)}{2k} \frac{1}{k + \Delta\check{m}}. \quad (5.41b)$$

W tym miejscu staje się jasne dlaczego w modelu atomu dipolowego od samego początku traktowaliśmy przerwę energetyczną \check{m} jako macierz. Wynika to z faktu, że ze względu na zróżnicowaną degenerację stanów energetycznych poprawki radiacyjne dla górnego i dolnego stanu mają różne wartości. Przypomnijmy, że zarówno dla układu spinowego jak i atomu dwupoziomowego (TLA) poziomy energetyczne pod wpływem oddziaływania przesuwają się o tą samą wartość.

5.3.2. Poprawki radiacyjne propagatora fotonu

W tym podpunkcie znajdziemy poprawki radiacyjne dla propagatora fotonu w dwóch najniższych rzędach rachunku zaburzeń. To pozwoli nam znaleźć macierz przejścia \check{T} w modelu atomu dipolowego.

Drugi rząd rachunku zaburzeń

Wkład do energii własnej fotonu w najniższym rzędzie rachunku zaburzeń jest reprezentowany przez wyrażenie

$$-i \check{P}_{ij}^{(2)}(k_0) = \text{diagram} = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \tau_i S_F(p_0 + k_0) \tau_j S_F(p_0) \}. \quad (5.42)$$

Wykorzystując własności (5.35) macierzy τ oraz jawną postać propagatora fermionowego (5.34b) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \check{P}_{ij}^{(2)}(k_0) = & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi i} \text{Tr} \left\{ \tau_i \tau_j \frac{\mathbf{P}_{\uparrow}}{(p_0 + k_0 - m_{\downarrow} - i\epsilon)(p_0 - m_{\uparrow} + i\epsilon)} \right\} \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi i} \text{Tr} \left\{ \tau_i \tau_j \frac{\mathbf{P}_{\downarrow}}{(p_0 + k_0 - m_{\downarrow} + i\epsilon)(p_0 - m_{\uparrow} - i\epsilon)} \right\}. \end{aligned} \quad (5.43)$$

Ze względu na własności macierzy τ po wykonaniu śladu powyższe wyrażenie jest diagonalne we wskaźnikach i oraz j i przechodzi w prostą sumę dwóch całek, które można wykonać metodą residuum

$$\begin{aligned} \check{P}_{ij}^{(2)}(k_0) = & \delta_{ij} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi i} \frac{1}{(p_0 + k_0 - m_{\downarrow} - i\epsilon)(p_0 - m_{\uparrow} + i\epsilon)} \\ & + \delta_{ij} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi i} \frac{1}{(p_0 + k_0 - m_{\downarrow} + i\epsilon)(p_0 - m_{\uparrow} - i\epsilon)} \\ = & \delta_{ij} \left[\frac{1}{m_{\downarrow} - m_{\uparrow} - k_0} + \frac{1}{m_{\downarrow} - m_{\uparrow} + k_0} \right] \\ = & -\delta_{ij} \frac{2\Delta\check{m}}{\Delta\check{m}^2 - k_0^2}. \end{aligned} \quad (5.44)$$

To pozwala nam znaleźć macierz przejścia \check{T} w drugim rzędzie rachunku zaburzeń

$$\check{T}_{ij}^{(2)}(k_0) = -\delta_{ij} \frac{2\Delta\check{m}}{\Delta\check{m}^2 - k_0^2 - 2\Delta\check{m}\check{h}(k_0)}. \quad (5.45)$$

Zauważmy, że otrzymane przez nas wyrażenia na funkcję energii własnej fotonu $\check{P}^{(2)}$ oraz macierz przejścia $\check{T}^{(2)}$ mają dokładnie tę samą formę co energia własna fotonu $\hat{P}^{(2)}$ i macierz przejścia $\hat{T}^{(2)}$ w przypadku atomu dwupoziomowego (wzory (3.33) i (3.40))⁵. Krótko mówiąc w tym przypadku są to macierze proporcjonalne do macierzy jednostkowej, a współczynnikami proporcjonalności są wielkości odpowiadające atomowi dwupoziomowemu (TLA).

Czwarty rząd rachunku zaburzeń

Obliczenia w czwartym rzędzie rachunku zaburzeń przebiegają analogicznie jak w przypadku układu spinowego i są przedstawione w Załączniku. Warto podkreślić, że jest jednak pewna fundamentalna różnica pomiędzy tymi dwoma przypadkami. Jak pamiętamy zarówno w przypadku układu spinowego jak i atomu dwupoziomowego wkłady reprezentowane przez diagramy (c) i (d) były dokładnie równe tym reprezentowanym przez diagramy (f) i (g) (patrz rysunek 3.1.). W przypadku atomu dipolowego taki związek nie zachodzi. Jest to bezpośrednia konsekwencja złamanej symetrii pomiędzy stanem podstawowym, a stanami wzbudzonymi wywołana degeneracją. I choć w teorii atomu dipolowego występuje symetria odwrócenia w czasie i niezmienniczość ze względu na obroty przestrzenne, to wspomniane diagramy dają różne

⁵Staje się to całkowicie jasne, gdy położymy $\Delta\check{m} = 2m$.

wkłady. Używając języka pełnej elektrodynamiki kwantowej można powiedzieć, że w tej teorii brakuje odpowiednika symetrii sprzężenia ładunkowego.

Wkłady do funkcji energii własnej fotonu w czwartym rzędzie rachunku zaburzeń wyrażają się następująco

$$\check{P}_{ij}^{(4b)}(k_0) = \delta_{ij} \frac{2}{\Delta\check{m}^2 - k_0^2} \int_0^\infty dk \frac{\check{g}^2(k)}{k(k + \Delta\check{m})}, \quad (5.46a)$$

$$\check{P}_{ij}^{(4c)}(k_0) + \check{P}_{ij}^{(4d)}(k_0) = \delta_{ij} \frac{2\Delta\check{m} + k_0}{\Delta\check{m}^2 - k_0^2} \int_0^\infty dk \frac{\check{g}^2(k)}{k(k + \Delta\check{m})^2}, \quad (5.46b)$$

$$\check{P}_{ij}^{(4f)}(k_0) + \check{P}_{ij}^{(4g)}(k_0) = \delta_{ij} \frac{2\Delta\check{m} - k_0}{\Delta\check{m}^2 - k_0^2} \int_0^\infty dk \frac{\check{g}^2(k)}{k(k + \Delta\check{m})^2}. \quad (5.46c)$$

Jak łatwo zatem sprawdzić pełna poprawka w czwartym rzędzie rachunku zaburzeń ma postać

$$\hat{P}_{ij}^{(2+4)}(k_0) = \hat{P}_{ij}^{(2)}(k_0) + \hat{P}_{ij}^{(4)}(k_0) = -\frac{2\Delta\check{m}(1 - \check{b})}{\Delta\check{m}^2 - k_0^2}, \quad (5.47a)$$

gdzie

$$\check{b} = \frac{1}{\Delta\check{m}} \int_0^\infty dk \check{g}^2(k) \frac{k + 3\Delta\check{m}}{k(k + \Delta\check{m})^2}. \quad (5.47b)$$

Tym samym macierz przejścia w tym rzędzie rachunku zaburzeń wyraża się wzorem

$$\check{T}_{ij}^{(2+4)}(k_0) = -\delta_{ij} \frac{2\Delta\check{m}(1 - \check{b})}{\Delta\check{m}^2 - k_0^2 - 2\Delta\check{m}(1 - \check{b})\check{h}(k_0)}. \quad (5.48)$$

Zauważmy, że również w czwartym rzędzie rachunku zaburzeń atom dipolowy ma dokładnie takie same własności jak atom dwupoziomowy. Świadczą o tym tożsame wyrażenia na energię własną i macierz przejścia w obu przypadkach. Jediną różnicą jest oczywiście to, że w przypadku atomu dipolowego są to macierze proporcjonalne do identyczności. To oznacza, że każdy z trzech modów pola elektromagnetycznego oddziałuje całkowicie niezależnie z atomem dipolowym na wzór oddziaływania z atomem dwupoziomowym. Nie ma zatem żadnej fundamentalnej różnicy pomiędzy tymi dwoma układami fizycznymi⁶.

Spostrzeżenie poczynione powyżej przekonuje nas, że zarówno amplituda rozpraszania fotonów na atomie dipolowym jak i odpowiedź tego atomu na zewnętrzne zaburzenie (polaryzowalność) będą wyrażały się całkowicie analogicznie do przypadku atomu dwupoziomowego. Dlatego nie będziemy przedstawiali jeszcze raz całego ich wyprowadzenia.

⁶Jest to prawda przynajmniej z dokładnością do czwartego rzędu rachunku zaburzeń.

Podsumowanie

W rozprawie szczegółowo został przedyskutowany problem oddziaływania układów dwupoziomowych z kwantowym polem elektromagnetycznym. Analiza ta została przeprowadzona w oparciu o metody kwantowej teorii pola, które okazały się bardzo dobrym narzędziem do wyznaczenia różnych własności qubitów.

Dzięki zastosowanemu rachunkowi perturbacyjnemu opartemu na diagramach Feynmana z łatwością udało się wykonać obliczenia nie tylko w drugim, najniższym rzędzie rachunku zaburzeń, ale również i w czwartym. Tym sposobem zostały wyznaczone w tym rzędzie amplitudy rozpraszania fotonu na układach dwupoziomowych i został potwierdzony fenomenologiczny przepis tych samych znaków dla tej wielkości w przypadku atomu dwupoziomowego.

Stosując metody kwantowej teorii liniowej odpowiedzi oraz wykorzystując własności analityczne propagatorów chronologicznych i retardowanych została wyznaczona podatność magnetyczna dla układu spinowego oraz polaryzowalność atomu dwupoziomowego w drugim i czwartym rzędzie rachunku zaburzeń. Wynik w drugim rzędzie zgadza się z wynikiem otrzymanym wcześniej innymi metodami [Lou06]. Wynik w czwartym rzędzie jest natomiast inny niż uzyskana przez innych autorów (jak się okazuje błędna) zależność [Lou06, Bia07]. Jednocześnie, w przypadku polaryzowalności atomu dwupoziomowego, został potwierdzony fenomenologiczny przepis przeciwnych znaków.

Dzięki zastosowanym metodom toczący się spór o prawidłowy wybór znaków dla członów nierezonansowych został jednoznacznie rozstrzygnięty. Z perspektywy otrzymanych w rozprawie wyników wydaje się, że spór ten wynikał z wcześniejszego niejednoznacznego rozróżnienia pomiędzy sytuacją rozproszeniową, a sytuacją reakcji układu na zewnętrzne zaburzenie. Ta niejednoznaczność miała swoje źródło w heurystycznych argumentach stojących za, jak się wydawało, obydwoma poprawnymi wyborami znaków. Oparta na zasadach podstawowych sformułowana przez nas teoria pozwoliła jednoznacznie odróżnić te dwie sytuacje i tym samym rozstrzygnąć spór.

Zaprezentowane metody są oparte na bardzo ogólnych zasadach stojących u podstaw każdej teorii pola i tym samym można je rozszerzać na inne sytuacje fizyczne. Przykład takiego rozszerzenia został zaprezentowany w ostatnim rozdziale rozprawy. Na przykładzie przejścia $1S \leftrightarrow 2P$ w atomie wodoru przedyskutowany został problem atomu o większej liczbie poziomów (qudit). Uogólnienie sformułowanych metod okazało się bardzo proste i efektywne.

Wydaje się bardzo możliwe uogólnienie przedstawionych metod na sytu-

acje jeszcze bardziej skomplikowane, które mogą mieć znaczenie w zagadnieniach inżynierii i informatyki kwantowej. Jednym z podstawowych problemów, do którego byłoby można zastosować sformułowanie teoriopole, a jest praktycznie poza zasięgiem dotychczas stosowanych metod, jest zagadnienie oddziaływania dwóch qubitów indukowanego przez kwantowe pole elektromagnetyczne. Takie wyniki mogłyby mieć w przyszłości nie tylko duże znaczenie praktyczne, ale również rzucić nowe światło na fundamentalne i do dziś nie rozwiązane problemy interpretacyjne samej kwantowej teorii pola (np. równanie Bethe-Salpetera [Sal51]). Inną ciekawą możliwością jest zastosowanie opracowanych metod do opisu układów dwupoziomowych znajdujących się w stałym kontakcie z termostatem czyli znajdujących się w skończonej temperaturze. Cała procedura uogólnienia metod kwantowej teorii pola na niezerowe temperatury została już opracowana w drugiej połowie poprzedniego wieku [Mat55] i jest dziś jednym z podstawowych fundamentów współczesnej kwantowej mechaniki statystycznej [Abr63, Fet71]. Ponieważ przedstawiony w rozprawie formalizm opisu qubitów opiera się na tych samych zasadach co pełna relatywistyczna kwantowa teoria pola cały formalizm dla temperatur skończonych powinien dać się zastosować bez większych trudności.

Z

Szczegóły rachunków perturbacyjnych

Z.1. Macierze Pauliego w bazie momentu pędu

Rachunek zaburzeń dla układu spinowego najwygodniej prowadzi się w bazie momentu pędu, w której podstawową rolę pełnią macierze $\{\sigma_+, \sigma_-, \sigma_z\}$. Macierze σ_+ i σ_- zdefiniowane są następująco

$$\sigma_+ = \frac{\sigma_x + i\sigma_y}{\sqrt{2}} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_- = \frac{\sigma_x - i\sigma_y}{\sqrt{2}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{Z.1})$$

Podstawowe własności

Z definicji (Z.1) natychmiast wnioskujemy, że pomiędzy macierzami σ spełnione są następujące relacje

$$\begin{aligned} \sigma_+^2 &= 0, & \sigma_+\sigma_- &= 2\mathbf{P}_\uparrow, \\ \sigma_-^2 &= 0, & \sigma_-\sigma_+ &= 2\mathbf{P}_\downarrow. \end{aligned} \quad (\text{Z.2})$$

Łatwo sprawdzić, że z tych związków wynikają również następujące tożsamości

$$\begin{aligned} \sigma_+\mathbf{P}_\uparrow &= 0, & \sigma_+\mathbf{P}_\downarrow &= \mathbf{P}_\uparrow\sigma_+, \\ \sigma_-\mathbf{P}_\downarrow &= 0, & \sigma_-\mathbf{P}_\uparrow &= \mathbf{P}_\downarrow\sigma_-. \end{aligned} \quad (\text{Z.3})$$

Iloczyny z propagatorem fermionowym S_F

Wykorzystując definicję propagatora fermionowego (2.49a) oraz własności (Z.3) macierzy σ w bazie momentu pędu łatwo sprawdzić, że zachodzą związki

$$\sigma_+ S_F(p_0) \sigma_+ = 0, \quad (\text{Z.4a})$$

$$\sigma_- S_F(p_0) \sigma_- = 0, \quad (\text{Z.4b})$$

$$\sigma_z S_F(p_0) \sigma_z = S_F(p_0), \quad (\text{Z.4c})$$

$$\sigma_+ S_F(p_0) \sigma_- = \frac{2\mathbf{P}_\uparrow}{p_0 + m - i\epsilon}, \quad (\text{Z.4d})$$

$$\sigma_- S_F(p_0) \sigma_+ = \frac{2\mathbf{P}_\downarrow}{p_0 - m + i\epsilon}. \quad (\text{Z.4e})$$

W przypadku atomu dwupoziomowego (TLA) użyteczna jest również tożsamość

$$\sigma_x S_F(p_0) \sigma_x = -S_F(-p_0). \quad (\text{Z.4f})$$

Wzory sumacyjne

Podczas obliczeń w kolejnych rzędach rachunku zaburzeń bardzo często pojawia się konieczność wykonania sumowania iloczynu macierzy $\sigma_n M \sigma_n$ po $n = 1, 2, 3$. Łatwo sprawdzić, że sumę taką daje się przepisać w bazie macierzy $\{\sigma_+, \sigma_-, \sigma_z\}$ następująco

$$\begin{aligned} \sum_n \sigma_n M \sigma_n &= \sigma_x M \sigma_x + \sigma_y M \sigma_y + \sigma_z M \sigma_z \\ &= \sigma_- M \sigma_+ + \sigma_+ M \sigma_- + \sigma_z M \sigma_z. \end{aligned} \quad (\text{Z.5})$$

W szczególności, gdy macierz M jest propagatorem $S_F(p_0)$ łatwo sprawdzić, że zachodzi tożsamość

$$\sum_n \sigma_n S_F(p_0) \sigma_n = \frac{2\mathbf{P}_\uparrow + \mathbf{P}_\downarrow}{p_0 + m - i\epsilon} + \frac{2\mathbf{P}_\downarrow + \mathbf{P}_\uparrow}{p_0 - m + i\epsilon}.$$

Wynika to z faktu, że zachodzą wzory

$$\sum_n \sigma_n \mathbf{P}_\uparrow \sigma_n = \mathbf{P}_\uparrow + 2\mathbf{P}_\downarrow, \quad \sum_n \sigma_n \mathbf{P}_\downarrow \sigma_n = \mathbf{P}_\downarrow + 2\mathbf{P}_\uparrow.$$

Z.2. Poprawki radiacyjne dla układu spinowego

Z.2.1. Poprawka masowa $\Sigma^{(2a)}(p_0)$

Poprawka masowa $\Sigma^{(2a)}(p_0)$ reprezentowana jest przez następujące wyrażenie

$$-i\Sigma^{(2a)}(p_0) = \text{diagram} = \sum_i \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \int_0^{\infty} dk \int_0^{\infty} dk' V_i(k) S_F(p_0 + k_0) V_j(k') D_{Fij}(k, k', k_0).$$

Wykorzystując własności macierzy σ można to wyrażenie sprowadzić do postaci

$$\begin{aligned} \Sigma^{(2a)}(p_0) &= i \int_0^{\infty} dk g^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \underbrace{\sum_i \sigma_i S_F(p_0 + k_0) \sigma_i}_{\frac{2\mathbf{P}_{\uparrow} + \mathbf{P}_{\downarrow}}{p_0 + k_0 + m - i\epsilon} + \frac{2\mathbf{P}_{\downarrow} + \mathbf{P}_{\uparrow}}{p_0 + k_0 - m + i\epsilon}} \frac{1}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon} \\ &= (2\mathbf{P}_{\uparrow} + \mathbf{P}_{\downarrow}) i \int_0^{\infty} dk g^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \frac{1}{(k_0 + p_0 + m - i\epsilon)(k_0^2 - k^2 + i\epsilon)} \\ &\quad + (2\mathbf{P}_{\downarrow} + \mathbf{P}_{\uparrow}) i \int_0^{\infty} dk g^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \frac{1}{(k_0 + p_0 - m + i\epsilon)(k_0^2 - k^2 + i\epsilon)}. \end{aligned}$$

Wykonując całkowanie względem k_0 metodą residuum otrzymujemy wyrażenie na poprawkę $\Sigma^{(2a)}$

$$\Sigma^{(2a)}(p_0) = \int_0^{\infty} \frac{dk}{2k} g^2(k) \left[\frac{2\mathbf{P}_{\uparrow} + \mathbf{P}_{\downarrow}}{p_0 + k + m - i\epsilon} + \frac{2\mathbf{P}_{\downarrow} + \mathbf{P}_{\uparrow}}{p_0 - k - m + i\epsilon} \right]. \quad (\text{Z.6a})$$

Wykorzystując jawne wzory (2.46) na operatory rzutowe można to wyrażenie zapisać w następującej formie

$$\Sigma^{(2a)}(p_0) = \int_0^{\infty} \frac{dk}{2k} g^2(k) \frac{3p_0 - (k + m)\sigma_z}{p_0^2 - (k + m)^2 + i\epsilon}. \quad (\text{Z.6b})$$

Z.2.2. Diagram kijankowy

Diagram kijankowy bardzo często stanowi składnik większego diagramu Feynmana. Ze względu na fakt, że jest on związany z innymi diagramami wyłącznie poprzez jeden wierzchołek oddziaływania można go obliczyć osobno i traktować w ten sam sposób jak diagram poprawki masowej¹.

Diagram kijankowy reprezentuje następujące wyrażenie

$$-i\sigma_z M_t = \text{diagram} = - \sum_{ij} \int_0^\infty dk \int_0^\infty dk' \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} V_i(k) D_{Fij}(k, k', 0) \text{Tr} \{ V_j(k') S_F(p_0) \}.$$

Wykorzystując własności macierzy σ , wykonując ślad oraz proste całkowanie względem p_0 można to wyrażenie sprowadzić do postaci

$$\begin{aligned} \sigma_z M_t &= -i \int_0^\infty dk \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \frac{g^2(k)}{-k^2} \underbrace{\sum_i \sigma_i \text{Tr} \{ \sigma_i S_F(p_0) \}}_{\sigma_z \frac{2m}{(p_0 - m + i\epsilon)(p_0 + m - i\epsilon)}} = 2im\sigma_z \int_0^\infty dk \frac{g^2(k)}{k^2} \underbrace{\int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 - m + i\epsilon)(p_0 + m - i\epsilon)}}_{-\frac{i}{2m}} \\ &= \sigma_z \int_0^\infty dk \frac{g^2(k)}{k^2}. \end{aligned}$$

Tym samym czynnik poprawki od diagramu kijankowego M_t wyraża się wzorem

$$M_t = \int_0^\infty dk \frac{g^2(k)}{k^2}. \quad (\text{Z.7})$$

¹Wstawiając wyrażenie na diagram kijankowy do innych wyrażeń należy zawsze pamiętać, że czynnik -1 pochodzący od pętli fermionowej został już uwzględniony.

Z.2.3. Poprawka radiacyjna $P^{(4b)}(k_0)$

Poprawka radiacyjna $P^{(4b)}(k_0)$ jest reprezentowana przez wyrażenie

$$\begin{aligned}
 -i P_{ij}^{(4b)}(k_0) &= \text{diagram} \\
 &= -i \sum_{mn} \int_0^\infty dl \int_0^\infty dl' \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \sigma_i S_F(p_0 + k_0) V_m(l) S_F(p_0 + k_0 + l_0) \sigma_j S_F(p_0 + l_0) V_n(l') S_F(p_0) \} D_{Fmn}(l, l', l_0).
 \end{aligned}$$

Wyliczenie poszczególnych składowych poprawki w bazie momentu pędu²

$$\begin{aligned}
 P_{\pm}^{(4b)}(k_0) &= \sum_m \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \sigma_{\mp} S_F(p_0 + k_0) \sigma_m S_F(p_0 + k_0 + l_0) \sigma_{\pm} S_F(p_0 + l_0) \sigma_m S_F(p_0) \} h(l_0) \\
 &= \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \left\{ \underbrace{\sigma_{\mp} S_F(p_0 + k_0) \sigma_z}_{\frac{\pm\sigma_{\mp}}{p_0+k_0 \mp m \pm i\epsilon}} S_F(p_0 + k_0 + l_0) \underbrace{\sigma_{\pm} S_F(p_0 + l_0) \sigma_z}_{\frac{\mp\sigma_{\pm}}{p_0+l_0 \pm m \mp i\epsilon}} S_F(p_0) \right\} h(l_0) \\
 &= - \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{p_0 + k_0 \mp m \pm i\epsilon} \frac{1}{p_0 + l_0 \pm m \mp i\epsilon} \text{Tr} \left\{ \underbrace{\sigma_{\mp} S_F(p_0 + k_0 + l_0) \sigma_{\pm}}_{\frac{2\mathbf{P}_{\downarrow/\uparrow}}{p_0+k_0+l_0 \mp m \pm i\epsilon}} S_F(p_0) \right\} h(l_0) \\
 &= -2 \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{p_0 + k_0 \mp m \pm i\epsilon} \frac{1}{p_0 + l_0 \pm m \mp i\epsilon} \frac{1}{p_0 + k_0 + l_0 \mp m \pm i\epsilon} \text{Tr} \left\{ \underbrace{\mathbf{P}_{\downarrow/\uparrow} S_F(p_0)}_{\frac{1}{p_0 \pm m \mp i\epsilon}} \right\} h(l_0) \\
 &= -2 \int_0^\infty dk g^2(k) \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{p_0 + k_0 \mp m \pm i\epsilon} \frac{1}{p_0 + l_0 \pm m \mp i\epsilon} \frac{1}{p_0 + k_0 + l_0 \mp m \pm i\epsilon} \frac{1}{p_0 \pm m \mp i\epsilon} \frac{1}{l_0^2 - k^2 + i\epsilon}.
 \end{aligned}$$

²Dla poprawki $P^{(4b)}$ przedstawione są obliczenia wszystkich trzech jej składowych. Dla następnych poprawek będę prezentował wyłącznie obliczenia dla składowej „+” oraz „0”. Składową „-” każdej poprawki można uzyskać wykorzystując związek $P_{-}(k_0) = P_{+}(-k_0)$ wynikający bezpośrednio z symetrii odwrócenia czasu, o której była mowa w punkcie 2.2.2.

Wykonując całkowanie względem zmiennej l_0 metodą residuum otrzymujemy następujące wyrażenia

$$P_+^{(4b)}(k_0) = -i \int_0^\infty \frac{dk}{k} g^2(k) \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \frac{k_0 - 2(k+m)}{(k_0 - 2m + i\epsilon)(k_0 + p_0 - m + i\epsilon)(k_0 + p_0 - k - m + i\epsilon)(p_0 + m - i\epsilon)(p_0 + k + m - i\epsilon)},$$

$$P_-^{(4b)}(k_0) = -i \int_0^\infty \frac{dk}{k} g^2(k) \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \frac{k_0 + 2(k+m)}{(k_0 + 2m - i\epsilon)(k_0 + p_0 + m - i\epsilon)(k_0 + p_0 + k + m - i\epsilon)(p_0 - m + i\epsilon)(p_0 - k - m + i\epsilon)}.$$

Kolejnym krokiem jest wykonanie analogicznego całkowania względem p_0 . W wyniku tych obliczeń otrzymujemy wyrażenia na odpowiednie składowe poprawki $P^{(4b)}$

$$P_+^{(4b)}(k_0) = \frac{2}{(2m - k_0)^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \frac{g^2(k)}{k + 2m - k_0 - i\epsilon}, \quad (\text{Z.8a})$$

$$P_-^{(4b)}(k_0) = \frac{2}{(2m + k_0)^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \frac{g^2(k)}{k + 2m + k_0 - i\epsilon}. \quad (\text{Z.8b})$$

Składową zerową tej poprawki wyliczamy bardzo podobnie. Najpierw musimy wykonać odpowiednie ślady po zmiennych spinowych, a następnie wykonać odpowiednie całki.

$$\begin{aligned} P_0^{(4b)}(k_0) &= \sum_m \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \sigma_z S_F(p_0 + k_0) \sigma_m S_F(p_0 + k_0 + l_0) \sigma_z S_F(p_0 + l_0) \sigma_m S_F(p_0) \} h(l_0) \\ &= \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \underbrace{\sigma_z S_F(p_0 + k_0) \sigma_z S_F(p_0 + k_0 + l_0)}_{S_F(p_0 + k_0)} \underbrace{\sigma_z S_F(p_0 + l_0) \sigma_z S_F(p_0)}_{S_F(p_0 + l_0)} \} h(l_0) \\ &+ \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \underbrace{\sigma_z S_F(p_0 + k_0) \sigma_+}_{\frac{\sigma_+}{p_0 + k_0 - m + i\epsilon}} S_F(p_0 + k_0 + l_0) \underbrace{\sigma_z S_F(p_0 + l_0) \sigma_-}_{\frac{-\sigma_-}{p_0 + l_0 + m - i\epsilon}} S_F(p_0) \} h(l_0) \\ &+ \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \underbrace{\sigma_z S_F(p_0 + k_0) \sigma_-}_{\frac{-\sigma_-}{p_0 + k_0 + m - i\epsilon}} S_F(p_0 + k_0 + l_0) \underbrace{\sigma_z S_F(p_0 + l_0) \sigma_+}_{\frac{\sigma_+}{p_0 + l_0 - m + i\epsilon}} S_F(p_0) \} h(l_0). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_0^{(4b)}(k_0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \left\{ \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} S_F(p_0 + k_0) S_F(p_0 + k_0 + l_0) S_F(p_0 + l_0) S_F(p_0)}_0 \right\} h(l_0) \\
&- \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{p_0 + k_0 - m + i\epsilon} \frac{1}{p_0 + l_0 + m - i\epsilon} \text{Tr} \left\{ \underbrace{\sigma_+ S_F(p_0 + k_0 + l_0) \sigma_- S_F(p_0)}_{\frac{2\mathbf{P}_\uparrow}{p_0 + k_0 + l_0 + m - i\epsilon}} \right\} h(l_0) \\
&- \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{p_0 + k_0 + m - i\epsilon} \frac{1}{p_0 + l_0 - m + i\epsilon} \text{Tr} \left\{ \underbrace{\sigma_- S_F(p_0 + k_0 + l_0) \sigma_+ S_F(p_0)}_{\frac{2\mathbf{P}_\downarrow}{p_0 + k_0 + l_0 - m + i\epsilon}} \right\} h(l_0) \\
&= -2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{p_0 + k_0 - m + i\epsilon} \frac{1}{p_0 + l_0 + m - i\epsilon} \frac{1}{p_0 + k_0 + l_0 + m - i\epsilon} \underbrace{\text{Tr} \{ \mathbf{P}_\uparrow S_F(p_0) \}}_{\frac{1}{p_0 - m + i\epsilon}} h(l_0) \\
&- 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{p_0 + k_0 + m - i\epsilon} \frac{1}{p_0 + l_0 - m + i\epsilon} \frac{1}{p_0 + k_0 + l_0 - m + i\epsilon} \underbrace{\text{Tr} \{ \mathbf{P}_\downarrow S_F(p_0) \}}_{\frac{1}{p_0 + m - i\epsilon}} h(l_0) \\
&= -2 \int_0^{\infty} dk g^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{p_0 + k_0 - m + i\epsilon} \frac{1}{p_0 + l_0 + m - i\epsilon} \frac{1}{p_0 + k_0 + l_0 + m - i\epsilon} \frac{1}{p_0 - m + i\epsilon} \frac{1}{l_0^2 - k^2 + i\epsilon} \\
&- 2 \int_0^{\infty} dk g^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{p_0 + k_0 + m - i\epsilon} \frac{1}{p_0 + l_0 - m + i\epsilon} \frac{1}{p_0 + k_0 + l_0 - m + i\epsilon} \frac{1}{p_0 + m - i\epsilon} \frac{1}{l_0^2 - k^2 + i\epsilon}.
\end{aligned}$$

Wykonując tak jak poprzednio całkę względem l_0 metodą residuum otrzymujemy wyrażenie

$$\begin{aligned}
P_0^{(4b)}(k_0) &= i \int_0^{\infty} \frac{dk}{k} g^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 - m + \epsilon)(p_0 + k_0 - m + i\epsilon)(p_0 + k + m - i\epsilon)(p_0 + k_0 + k + m - i\epsilon)} \\
&+ i \int_0^{\infty} \frac{dk}{k} g^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 + m - \epsilon)(p_0 + k_0 + m - i\epsilon)(p_0 - k - m + i\epsilon)(p_0 + k_0 - k - m + i\epsilon)}.
\end{aligned}$$

Ostatnie całkowanie względem p_0 daje w rezultacie wzór na zerową składową rozważanej poprawki

$$\begin{aligned} P_0^{(4b)}(k_0) &= -2 \int_0^\infty \frac{dk}{k} \frac{g^2(k)}{k+2m} \frac{1}{(k+2m)^2 - k_0^2 - i\epsilon} - 2 \int_0^\infty \frac{dk}{k} \frac{g^2(k)}{k+2m} \frac{1}{(k+2m)^2 - k_0^2 - i\epsilon} \\ &= -4 \int_0^\infty \frac{dk}{k} \frac{g^2(k)}{k+2m} \frac{1}{(k+2m)^2 - k_0^2 - i\epsilon}. \end{aligned} \quad (\text{Z.8c})$$

Z.2.4. Poprawka radiacyjna $P^{(4c)}(k_0)$

Poprawka radiacyjna $P^{(4c)}(k_0)$ jest reprezentowana przez wyrażenie

$$\begin{aligned} -i P_{ij}^{(4c)}(k_0) &= \text{Diagram} \\ &= -i \sum_{mn} \int_0^\infty dl \int_0^\infty dl' \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \sigma_i S_F(p_0 + k_0) \sigma_j S_F(p_0) V_m(l) S_F(p_0 + l_0) V_n(l') S_F(p_0) \} D_{Fmn}(l, l', l_0). \end{aligned}$$

Wyliczenie poszczególnych składowych poprawki w bazie momentu pędu

$$\begin{aligned} P_+^{(4c)}(k_0) &= \sum_m \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \sigma_- S_F(p_0 + k_0) \sigma_+ S_F(p_0) \sigma_m S_F(p_0 + l_0) \sigma_m S_F(p_0) \} h(l_0) \\ &= \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \left\{ \underbrace{\sigma_- S_F(p_0 + k_0) \sigma_+ S_F(p_0)}_{\frac{2P_\perp}{p_0 + k_0 - m + i\epsilon}} \underbrace{\sigma_z S_F(p_0 + l_0) \sigma_z S_F(p_0)}_{S_F(p_0 + l_0)} \right\} h(l_0) \\ &+ \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \left\{ \sigma_- S_F(p_0 + k_0) \underbrace{\sigma_+ S_F(p_0) \sigma_+ S_F(p_0 + l_0)}_0 \sigma_- S_F(p_0) \right\} h(l_0) \\ &+ \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \left\{ \underbrace{\sigma_- S_F(p_0 + k_0) \sigma_+ S_F(p_0)}_{\frac{2P_\perp}{p_0 + k_0 - m + i\epsilon}} \underbrace{\sigma_- S_F(p_0 + l_0) \sigma_+ S_F(p_0)}_{\frac{2P_\perp}{p_0 + l_0 - m + i\epsilon}} \right\} h(l_0). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_+^{(4c)}(k_0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{2}{p_0 + k_0 - m + i\epsilon} \text{Tr}\{\mathbf{P}_\downarrow S_F(p_0) S_F(p_0 + l_0) S_F(p_0)\} h(l_0) \\
&+ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{2}{p_0 + k_0 - m + i\epsilon} \frac{2}{p_0 + l_0 - m + i\epsilon} \text{Tr}\{\mathbf{P}_\downarrow S_F(p_0) \mathbf{P}_\downarrow S_F(p_0)\} h(l_0) \\
&= 2 \int_0^{\infty} dk g^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 + k_0 - m + i\epsilon)(p_0 + l_0 + m - i\epsilon)(p_0 + m - i\epsilon)^2 (l_0^2 - k^2 + i\epsilon)} \\
&+ 4 \int_0^{\infty} dk g^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 + k_0 - m + i\epsilon)(p_0 + l_0 - m + i\epsilon)(p_0 + m - i\epsilon)^2 (l_0^2 - k^2 + i\epsilon)}.
\end{aligned}$$

Wykonując całkowanie względem zmiennej l_0 metodą residuum otrzymujemy

$$\begin{aligned}
P_+^{(4c)}(k_0) &= -i \int_0^{\infty} \frac{dk}{k} g^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 + k_0 - m + i\epsilon)(p_0 + k + m - i\epsilon)(p_0 - m + i\epsilon)^2} \\
&- i \int_0^{\infty} \frac{dk}{k} g^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \frac{2}{(p_0 - k - m + i\epsilon)(p_0 + k_0 - m + i\epsilon)(p_0 + m - i\epsilon)^2}.
\end{aligned}$$

Po wykonaniu całkowania względem p_0 otrzymujemy wyrażenie na dodatnią składową tej poprawki radiacyjnej

$$\begin{aligned}
P_+^{(4c)}(k_0) &= \int_0^{\infty} \frac{dk}{k} g^2(k) \frac{1}{(k_0 - 2m)^2 (k_0 - k - 2m - i\epsilon)} + \int_0^{\infty} \frac{dk}{k} g^2(k) \frac{2(k + 4m - k_0)}{(k + 2m)^2 (k_0 - 2m)^2} \\
&= \frac{1}{2m - k_0} \int_0^{\infty} \frac{dk}{k} \frac{g^2(k)}{(k + 2m)} \left[\frac{2}{k + 2m} + \frac{k + 2m - 2k_0}{(2m - k_0)(k + 2m - k_0 - i\epsilon)} \right]. \tag{Z.9a}
\end{aligned}$$

Wykorzystując symetrię odwrócenia w czasie natychmiast otrzymujemy wyrażenie na ujemną składową tej poprawki

$$P_-^{(4c)}(k_0) = P_+^{(4c)}(-k_0) = \frac{1}{2m + k_0} \int_0^{\infty} \frac{dk}{k} \frac{g^2(k)}{(k + 2m)} \left[\frac{2}{k + 2m} + \frac{k + 2m + 2k_0}{(2m + k_0)(k + 2m + k_0 - i\epsilon)} \right]. \tag{Z.9b}$$

Zerową składową tej poprawki wyliczamy analogicznie

$$\begin{aligned}
P_0^{(4c)}(k_0) &= \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \sigma_z S_F(p_0 + k_0) \sigma_z S_F(p_0) \sigma_m S_F(p_0 + l_0) \sigma_m S_F(p_0) \} h(l_0) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \underbrace{\sigma_z S_F(p_0 + k_0) \sigma_z S_F(p_0)}_{S_F(p_0+k_0)} \underbrace{\sigma_z S_F(p_0 + l_0) \sigma_z S_F(p_0)}_{S_F(p_0+l_0)} \} h(l_0) \\
&\quad + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \underbrace{\sigma_z S_F(p_0 + k_0) \sigma_z S_F(p_0)}_{S_F(p_0+k_0)} \underbrace{\sigma_+ S_F(p_0 + l_0) \sigma_- S_F(p_0)}_{\frac{2\mathbf{P}_\uparrow}{p_0+l_0+m-i\epsilon}} \} h(l_0) \\
&\quad + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \underbrace{\sigma_z S_F(p_0 + k_0) \sigma_z S_F(p_0)}_{S_F(p_0+k_0)} \underbrace{\sigma_- S_F(p_0 + l_0) \sigma_+ S_F(p_0)}_{\frac{2\mathbf{P}_\downarrow}{p_0+l_0-m+i\epsilon}} \} h(l_0) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} S_F(p_0 + k_0) S_F(p_0) S_F(p_0 + l_0) S_F(p_0)}_0 \} h(l_0) \\
&\quad + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{2}{p_0 + l_0 + m - i\epsilon} \text{Tr} \{ S_F(p_0 + k_0) S_F(p_0) \mathbf{P}_\uparrow S_F(p_0) \} h(l_0) \\
&\quad + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{2}{p_0 + l_0 - m + i\epsilon} \text{Tr} \{ S_F(p_0 + k_0) S_F(p_0) \mathbf{P}_\downarrow S_F(p_0) \} h(l_0) \\
&= 2 \int_0^\infty dk g^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 + l_0 + m - i\epsilon)(p_0 + k_0 - m + i\epsilon)(p_0 - m + i\epsilon)^2(l_0^2 - k^2 + i\epsilon)} \\
&\quad + 2 \int_0^\infty dk g^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 + l_0 - m + i\epsilon)(p_0 + k_0 + m - i\epsilon)(p_0 + m - i\epsilon)^2(l_0^2 - k^2 + i\epsilon)}.
\end{aligned}$$

Wykonując całkowanie względem zmiennej l_0 metodą residuum otrzymujemy

$$\begin{aligned} P_0^{(4c)}(k_0) &= -i \int_0^\infty \frac{dk}{k} g^2(k) \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 + k_0 - m + i\epsilon)(p_0 + k + m - i\epsilon)(p_0 - m + i\epsilon)^2} \\ &\quad - i \int_0^\infty \frac{dk}{k} g^2(k) \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 + k_0 + m - i\epsilon)(p_0 - k - m + i\epsilon)(p_0 + m - i\epsilon)^2}. \end{aligned}$$

Wykonanie całki metodą residuum względem p_0 daje w rezultacie wyrażenie na zerową składową rozważanej poprawki radiacyjnej

$$\begin{aligned} P_0^{(4c)}(k_0) &= - \int_0^\infty \frac{dk}{k} \frac{g^2(k)}{(k+2m)} \frac{1}{(k+2m)^2 - k_0^2 - i\epsilon} - \int_0^\infty \frac{dk}{k} \frac{g^2(k)}{(k+2m)} \frac{1}{(k+2m)^2 - k_0^2 - i\epsilon} \\ &= -2 \int_0^\infty \frac{dk}{k} \frac{g^2(k)}{(k+2m)} \frac{1}{(k+2m)^2 - k_0^2 - i\epsilon}. \end{aligned} \tag{Z.9c}$$

Z.2.5. Poprawka radiacyjna $P^{(4d)}(k_0)$

Poprawka radiacyjna $P^{(4d)}(k_0)$ jest reprezentowana przez wyrażenie

$$-i P_{ij}^{(4d)}(k_0) = \text{diagram} = \delta m \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \sigma_i S_F(p_0 + k_0) \sigma_j S_F(p_0) \sigma_z S_F(p_0) \}.$$

Wyliczenie poszczególnych składowych poprawki w bazie momentu pędu

$$\begin{aligned} P_+^{(4d)}(k_0) &= i \delta m \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \text{Tr} \left\{ \underbrace{\sigma_- S_F(p_0 + k_0) \sigma_+}_{\frac{2\mathbf{P}_\downarrow}{p_0+k_0-m+i\epsilon}} S_F(p_0) \sigma_z S_F(p_0) \right\} = i \delta m \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \frac{2}{p_0 + k_0 - m + i\epsilon} \text{Tr} \{ \mathbf{P}_\downarrow S_F(p_0) \sigma_z S_F(p_0) \} \\ &= -2i \delta m \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 + k_0 - m + i\epsilon)(p_0 + m - i\epsilon)^2}. \end{aligned}$$

Wykonując całkowanie względem p_0 metodą residuum otrzymujemy wyrażenie na dodatnią składową tej poprawki

$$P_+^{(4d)}(k_0) = -\frac{2\delta m}{(2m - k_0)^2}. \quad (\text{Z.10a})$$

Składową ujemną otrzymujemy wykorzystując symetrię odwrócenia w czasie

$$P_-^{(4d)}(k_0) = P_+^{(4d)}(-k_0) = -\frac{2\delta m}{(2m + k_0)^2}. \quad (\text{Z.10b})$$

Składowa zerowa tej poprawki jest równa zero ze względu na fakt, że bieguny występujących wyrażień podcałkowych leżą w jednej półpłaszczyźnie zespolonej. Wynika to z następującego rozumowania

$$\begin{aligned} P_0^{(4d)}(k_0) &= i \delta m \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \text{Tr} \left\{ \underbrace{\sigma_z S_F(p_0 + k_0) \sigma_z}_{S_F(p_0+k_0)} S_F(p_0) \sigma_z S_F(p_0) \right\} \\ &= i \delta m \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \text{Tr} \left\{ S_F(p_0 + k_0) S_F(p_0) \sigma_z S_F(p_0) \right\} \\ &= i \delta m \left(\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 + k_0 - m + i\epsilon)(p_0 - m + i\epsilon)^2}}_0 - \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 + k_0 + m - i\epsilon)(p_0 + m - i\epsilon)^2}}_0 \right) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (\text{Z.10c})$$

Z.2.6. Poprawka radiacyjna $P^{(4e)}(k_0)$

Poprawka radiacyjna $P^{(4e)}(k_0)$ daje się łatwo sprowadzić do wyrażenia na poprawkę $P^{(4d)}(k_0)$

$$-i P_{ij}^{(4e)}(k_0) = \text{diagram} = -M_t \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \text{Tr} \left\{ \sigma_i S_F(p_0 + k_0) \sigma_j S_F(p_0) \sigma_z S_F(p_0) \right\} = -\frac{M_t}{\delta m} \cdot \left(-i P_{ij}^{(4d)}(k_0) \right).$$

Ostatnią równość wynika z obserwacji, że całka występująca w wyrażeniu na tą poprawkę jest dokładnie taka sama jak całka w wyrażeniu na poprawkę $P^{(4d)}(k_0)$. Na tej podstawie otrzymujemy następujące wzory na kolejne składowe rozważanej poprawki

$$P_+^{(4e)}(k_0) = \frac{2M_t}{(2m - k_0)^2}, \quad P_-^{(4e)}(k_0) = \frac{2M_t}{(2m + k_0)^2}, \quad P_0^{(4e)}(k_0) = 0. \quad (\text{Z.11a})$$

Z.2.7. Poprawki radiacyjne $P^{(4f)}(k_0)$, $P^{(4g)}(k_0)$ i $P^{(4h)}(k_0)$

Poprawki radiacyjne $P^{(4f)}(k_0)$, $P^{(4g)}(k_0)$ i $P^{(4h)}(k_0)$ są reprezentowane przez następujące wyrażenia

$$\begin{aligned} -i P_{ij}^{(4f)}(k_0) &= \text{Diagram 1} \\ &= -i \sum_{mn} \int_0^\infty dl \int_0^\infty dl' \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \sigma_i S_F(p_0 + k_0) V_m(l) S_F(p_0 + k_0 + l_0) V_n(l') S_F(p_0 + k_0) \sigma_j S_F(p_0) \} D_{Fmn}(l, l', l_0), \\ -i P_{ij}^{(4g)}(k_0) &= \text{Diagram 2} = \delta m \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \sigma_i S_F(p_0 + k_0) \sigma_z S_F(p_0 + k_0) \sigma_j S_F(p_0) \}, \\ -i P_{ij}^{(4h)}(k_0) &= \text{Diagram 3} = -M_t \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \sigma_i S_F(p_0 + k_0) \sigma_j S_F(p_0) \sigma_z S_F(p_0) \}. \end{aligned}$$

Przesuwając zmienną całkowania p_0 wg przepisu $p_0 \rightarrow p_0 - k_0$ oraz zmieniając cyklicznie kolejność macierzy pod śladem łatwo można pokazać, że zachodzą związki

$$P_{ij}^{(4f)}(k_0) = P_{ji}^{(4c)}(-k_0), \quad (\text{Z.12a})$$

$$P_{ij}^{(4g)}(k_0) = P_{ji}^{(4d)}(-k_0), \quad (\text{Z.12b})$$

$$P_{ij}^{(4h)}(k_0) = P_{ji}^{(4e)}(-k_0). \quad (\text{Z.12c})$$

Po wykorzystaniu symetrii odwrócenia w czasie, o której już wielokrotnie wspominaliśmy, powyższe związki oznaczają, że w bazie momentu pędu zachodzą następujące równości

$$P_+^{(4f)}(k_0) = P_-^{(4c)}(-k_0) = P_+^{(4c)}(k_0), \quad (\text{Z.13a})$$

$$P_-^{(4g)}(k_0) = P_+^{(4d)}(-k_0) = P_-^{(4d)}(k_0), \quad (\text{Z.13b})$$

$$P_0^{(4h)}(k_0) = P_0^{(4e)}(-k_0) = P_0^{(4e)}(k_0). \quad (\text{Z.13c})$$

Z.3. Poprawki radiacyjne dla atomu dwupoziomowego (TLA)

Z.3.1. Poprawka masowa $\widehat{\Sigma}^{(2a)}(p_0)$

Poprawka masowa $\widehat{\Sigma}^{(2a)}(p_0)$ reprezentowana jest przez następujące wyrażenie

$$-i\widehat{\Sigma}^{(2a)}(p_0) = \text{diagram} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \int_0^{\infty} dk \int_0^{\infty} dk' V(k) S_F(p_0 + k_0) V(k') D_F(k, k', k_0).$$

Wykorzystując własności macierzy σ_x i σ_z można to wyrażenie sprowadzić do postaci

$$\begin{aligned} \widehat{\Sigma}^{(2a)}(p_0) &= i \int_0^{\infty} dk \widehat{g}^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \underbrace{\sigma_x S_F(p_0 + k_0) \sigma_x}_{-S_F(-p_0 - k_0)} \frac{1}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon} \\ &= i \int_0^{\infty} dk \widehat{g}^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \left[\frac{\mathbf{P}_{\uparrow}}{(k_0 + p_0 + m - i\epsilon)(k_0^2 - k^2 + i\epsilon)} + \frac{\mathbf{P}_{\downarrow}}{(k_0 + p_0 - m + i\epsilon)(k_0^2 - k^2 + i\epsilon)} \right]. \end{aligned}$$

Wykonując całkowanie względem zmiennej k_0 metodą residuum otrzymujemy wyrażenie na poprawkę $\widehat{\Sigma}^{(2a)}$

$$\widehat{\Sigma}^{(2a)}(p_0) = \int_0^{\infty} \frac{dk}{2k} \widehat{g}^2(k) \left[\frac{\mathbf{P}_{\uparrow}}{p_0 + k + m - i\epsilon} + \frac{\mathbf{P}_{\downarrow}}{p_0 - k - m + i\epsilon} \right]. \quad (\text{Z.14a})$$

Wykorzystując jawne wzory (2.46) na operatory rzutowe \mathbf{P}_\uparrow i \mathbf{P}_\downarrow można to wyrażenie zapisać w następującej formie

$$\widehat{\Sigma}^{(2a)}(p_0) = \int_0^\infty \frac{dk}{2k} \widehat{g}^2(k) \frac{p_0 - (k+m)\sigma_z}{p_0^2 - (k+m)^2 + i\epsilon}. \quad (\text{Z.14b})$$

Z.3.2. Diagram kijankowy

W przypadku atomu dwupoziomowego (TLA) wszystkie diagramy zawierające przynajmniej jeden diagram kijankowy nie dają wkładu w żadnym rzędzie rachunku zaburzeń. Jest to bezpośrednia konsekwencja faktu, że $\text{Tr}\{\sigma_x S_F(p_0)\} = 0$. Mamy bowiem

$$\text{Diagram} = - \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_0^\infty dk \int_0^\infty dk' \text{Tr}\{V(k)S_F(p_0)\}V(k')D_F(k, k', 0) = 0. \quad (\text{Z.15})$$

Z.3.3. Poprawka radiacyjna $\widehat{\mathbf{P}}^{(4b)}(k_0)$

Poprawka radiacyjna $\widehat{\mathbf{P}}^{(4b)}(k_0)$ jest reprezentowana przez wyrażenie

$$\begin{aligned} -i \widehat{\mathbf{P}}^{(4b)}(k_0) &= \text{Diagram} \\ &= -i \int_0^\infty dl \int_0^\infty dl' \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr}\{\sigma_x S_F(p_0 + k_0)V(l)S_F(p_0 + k_0 + l_0)\sigma_x S_F(p_0 + l_0)V(l')S_F(p_0)\}D_F(l, l', l_0). \end{aligned}$$

Wykorzystując własności macierzy σ_x oraz σ_z można przepisać to wyrażenie do postaci

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{P}}^{(4b)}(k_0) &= \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr}\{\sigma_x S_F(p_0 + k_0)\sigma_x S_F(p_0 + k_0 + l_0)\sigma_x S_F(p_0 + l_0)\sigma_x S_F(p_0)\}\widehat{h}(l_0) \\ &= \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr}\{\underbrace{\sigma_x S_F(p_0 + k_0)\sigma_x}_{-S_F(-p_0-k_0)} S_F(p_0 + k_0 + l_0) \underbrace{\sigma_x S_F(p_0 + l_0)\sigma_x}_{-S_F(-p_0-l_0)} S_F(p_0)\}\widehat{h}(l_0). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\widehat{P}^{(4b)}(k_0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ S_F(-p_0 - k_0) S_F(p_0 + k_0 + l_0) S_F(-p_0 - l_0) S_F(p_0) \} \widehat{h}(l_0) \\
&= \int_0^{\infty} dk \widehat{g}^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 + k_0 - m + i\epsilon)(p_0 + m - i\epsilon)(l_0 + p_0 - m + i\epsilon)(l_0 + p_0 + k_0 + m - i\epsilon)(l_0^2 - k^2 + i\epsilon)} \\
&+ \int_0^{\infty} dk \widehat{g}^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 + k_0 + m - i\epsilon)(p_0 - m + i\epsilon)(l_0 + p_0 + m - i\epsilon)(l_0 + p_0 + k_0 - m + i\epsilon)(l_0^2 - k^2 + i\epsilon)}.
\end{aligned}$$

Łatwo można pokazać, że obie występujące w tym wyrażeniu całki są sobie równe. W tym celu należy najpierw dokonać przesunięcia zmiennej całkowania p_0 wg przepisu $p_0 \rightarrow p_0 - l_0$, a następnie zmienić całkowanie względem l_0 na całkowanie względem $-l_0$. Otrzymujemy zatem

$$\widehat{P}^{(4b)}(k_0) = 2 \int_0^{\infty} dk \widehat{g}^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 + k_0 - m + i\epsilon)(p_0 + m - i\epsilon)(l_0 + p_0 - m + i\epsilon)(l_0 + p_0 + k_0 + m - i\epsilon)(l_0^2 - k^2 + i\epsilon)}.$$

Wykonując całkowanie względem l_0 metodą residuum otrzymujemy następujące wyrażenia

$$\widehat{P}^{(4b)}(k_0) = \int_0^{\infty} dk \widehat{g}^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \frac{2(k+m) + k_0}{k(2m+k_0)(p_0 - k - m + i\epsilon)(p_0 + k_0 - m + i\epsilon)(p_0 + m - i\epsilon)(p_0 + k_0 + k + m - i\epsilon)}.$$

Wykonując analogiczne całkowanie względem p_0 otrzymujemy wyrażenie na poprawkę $\widehat{P}^{(4b)}$

$$\widehat{P}^{(4b)}(k_0) = \frac{2}{4m^2 - k_0^2} \int_0^{\infty} \frac{dk}{k} \frac{\widehat{g}^2(k)}{k + 2m}. \quad (\text{Z.16})$$

Z.3.4. Poprawka radiacyjna $\widehat{P}^{(4c)}(k_0)$

Poprawka radiacyjna $P^{(4c)}(k_0)$ jest reprezentowana przez wyrażenie

$$-i \widehat{P}^{(4c)}(k_0) = \text{diagram} = -i \int_0^{\infty} dl \int_0^{\infty} dl' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \sigma_x S_F(p_0 + k_0) \sigma_x S_F(p_0) V(l) S_F(p_0 + l_0) V(l') S_F(p_0) \} D_F(l, l', l_0).$$

Wykorzystując własności macierzy σ_x oraz σ_z można przepisać to wyrażenie do postaci

$$\begin{aligned}
\widehat{P}^{(4c)}(k_0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \sigma_x S_F(p_0 + k_0) \sigma_x S_F(p_0) \sigma_x S_F(p_0 + l_0) \sigma_x S_F(p_0) \} \widehat{h}(l_0) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \underbrace{\sigma_x S_F(p_0 + k_0) \sigma_x S_F(p_0)}_{-S_F(-p_0 - k_0)} \underbrace{\sigma_x S_F(p_0 + l_0) \sigma_x S_F(p_0)}_{-S_F(-p_0 - l_0)} \} \widehat{h}(l_0) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ S_F(-p_0 - k_0) S_F(p_0) S_F(-p_0 - l_0) S_F(p_0) \} \widehat{h}(l_0) \\
&= \int_0^{\infty} dk \widehat{g}^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 + m - i\epsilon)^2 (p_0 + k_0 - m + i\epsilon) (l_0 + p_0 - m + i\epsilon) (l_0^2 - k^2 + i\epsilon)} \\
&\quad + \int_0^{\infty} dk \widehat{g}^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 - m + i\epsilon)^2 (p_0 + k_0 + m - i\epsilon) (l_0 + p_0 + m - i\epsilon) (l_0^2 - k^2 + i\epsilon)}.
\end{aligned}$$

Wykonując całkowanie względem l_0 metodą residuum otrzymujemy następujące wyrażenia

$$\begin{aligned}
\widehat{P}^{(4c)}(k_0) &= -i \int_0^{\infty} dk \widehat{g}^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \frac{1}{2k(p_0 + m - i\epsilon)^2 (p_0 - k - m + i\epsilon) (p_0 + k_0 - m + i\epsilon)} \\
&\quad - i \int_0^{\infty} dk \widehat{g}^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \frac{1}{2k(p_0 - m + i\epsilon)^2 (p_0 + k + m - i\epsilon) (p_0 + k_0 - m + i\epsilon)}.
\end{aligned}$$

Wykonując analogiczne całkowanie względem p_0 otrzymujemy wyrażenie na poprawkę $\widehat{P}^{(4c)}$

$$\widehat{P}^{(4c)}(k_0) = \frac{1}{4m^2 - k_0^2} \int_0^{\infty} dk \frac{\widehat{g}^2(k)}{k(k+2m)} \left[\frac{k}{k+2m} + \frac{8m^2}{4m^2 - k_0^2} \right]. \quad (\text{Z.17})$$

Z.3.5. Poprawka radiacyjna $\widehat{P}^{(4d)}(k_0)$

Poprawka radiacyjna $\widehat{P}^{(4d)}(k_0)$ jest reprezentowana przez wyrażenie

$$-i \widehat{P}^{(4d)}(k_0) = \text{diagram} = \delta \widehat{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \sigma_x S_F(p_0 + k_0) \sigma_x S_F(p_0) \sigma_z S_F(p_0) \}.$$

Wykorzystując własności macierzy σ_x oraz σ_z można przepisać to wyrażenie do postaci

$$\begin{aligned}\widehat{P}^{(4d)}(k_0) &= i\delta\widehat{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \text{Tr}\left\{ \underbrace{\sigma_x S_F(p_0 + k_0) \sigma_x}_{-S_F(-p_0 - k_0)} S_F(p_0) \sigma_z S_F(p_0) \right\} = -i\delta\widehat{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \text{Tr}\left\{ S_F(-p_0 - k_0) S_F(p_0) \sigma_z S_F(p_0) \right\} \\ &= i\delta\widehat{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 - m + i\epsilon)^2 (p_0 + k_0 + m - i\epsilon)} - i\delta\widehat{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 + m - i\epsilon)^2 (p_0 + k_0 - m + i\epsilon)}.\end{aligned}$$

Wykonując całkowanie względem zmiennej p_0 metodą residuum otrzymujemy wyrażenie na poprawkę $\widehat{P}^{(4d)}(k_0)$

$$\widehat{P}^{(4d)}(k_0) = \delta\widehat{m} \left[\frac{2}{4m^2 - k_0^2} - \frac{16m^2}{(4m^2 - k_0^2)^2} \right]. \quad (\text{Z.18a})$$

Wykorzystując natomiast jawny wzór na poprawkę masową $\delta\widehat{m}$ w drugim rzędzie rachunku zaburzeń możemy zapisać to wyrażenie w postaci

$$\widehat{P}^{(4d)}(k_0) = \frac{1}{4m^2 - k_0^2} \int_0^{\infty} dk \frac{\widehat{g}^2(k)}{k(k+2m)} \left[1 - \frac{8m^2}{4m^2 - k_0^2} \right]. \quad (\text{Z.18b})$$

Jak widać „podwójne bieguny” poprawek $\widehat{P}^{(4c)}$ oraz $\widehat{P}^{(4d)}$ wzajemnie się redukują.

Z.3.6. Poprawki radiacyjne $\widehat{P}^{(4f)}(k_0)$, $\widehat{P}^{(4g)}(k_0)$

Poprawki radiacyjne $\widehat{P}^{(4f)}(k_0)$, $\widehat{P}^{(4g)}(k_0)$ są reprezentowane przez następujące wyrażenia

$$\begin{aligned}-i\widehat{P}^{(4f)}(k_0) &= \text{Diagram 1} \\ &= -i \int_0^{\infty} dl \int_0^{\infty} dl' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr}\left\{ \sigma_x S_F(p_0 + k_0) V(l) S_F(p_0 + k_0 + l_0) V(l') S_F(p_0 + k_0) \sigma_x S_F(p_0) \right\} D_F(l, l', l_0), \\ -i\widehat{P}^{(4g)}(k_0) &= \text{Diagram 2} = \delta\widehat{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \text{Tr}\left\{ \sigma_x S_F(p_0 + k_0) \sigma_z S_F(p_0 + k_0) \sigma_x S_F(p_0) \right\}.\end{aligned}$$

Przesuwając zmienną całkowania p_0 wg przepisu $p_0 \rightarrow p_0 - k_0$ oraz zmieniając cyklicznie kolejność macierzy pod śladem łatwo można pokazać, że zachodzą związki

$$\widehat{\mathbf{P}}^{(4f)}(k_0) = \widehat{\mathbf{P}}^{(4c)}(-k_0), \quad \widehat{\mathbf{P}}^{(4g)}(k_0) = \widehat{\mathbf{P}}^{(4d)}(-k_0). \quad (\text{Z.19})$$

Ze wzorów (Z.17) i (Z.18) wynika jednak, że poprawki $\widehat{\mathbf{P}}^{(4c)}$ i $\widehat{\mathbf{P}}^{(4d)}$ są funkcjami parzystymi k_0 . W związku z tym zachodzą równości

$$\widehat{\mathbf{P}}^{(4f)}(k_0) = \widehat{\mathbf{P}}^{(4c)}(k_0), \quad \widehat{\mathbf{P}}^{(4g)}(k_0) = \widehat{\mathbf{P}}^{(4d)}(k_0). \quad (\text{Z.20})$$

Z.4. Poprawki radiacyjne dla atomu dipolowego

Z.4.1. Poprawka masowa $\check{\Sigma}^{(2a)}(p_0)$

Poprawka masowa $\check{\Sigma}^{(2a)}(p_0)$ reprezentowana jest przez następujące wyrażenie

$$-i\check{\Sigma}^{(2a)}(p_0) = \text{diagram} = \sum_{ij} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \int_0^{\infty} dk \int_0^{\infty} dk' V_i(k) S_F(p_0 + k_0) V_j(k') D_{Fij}(k, k', k_0).$$

Wykorzystując własności macierzy τ można to wyrażenie sprowadzić do postaci

$$\begin{aligned} \check{\Sigma}^{(2a)}(p_0) &= i \int_0^{\infty} dk \check{g}^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \underbrace{\sum_i \tau_i S_F(p_0 + k_0) \tau_i}_{\frac{\mathbf{P}_{\uparrow}}{p_0+k_0-m_{\downarrow}-i\epsilon} + \frac{3\mathbf{P}_{\uparrow}}{p_0+k_0-m_{\uparrow}+i\epsilon}} \frac{1}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon} \\ &= i \int_0^{\infty} dk \hat{g}^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \left[\frac{\mathbf{P}_{\uparrow}}{(k_0 + p_0 - m_{\downarrow} - i\epsilon)(k_0^2 - k^2 + i\epsilon)} + \frac{3\mathbf{P}_{\downarrow}}{(k_0 + p_0 - m_{\uparrow} + i\epsilon)(k_0^2 - k^2 + i\epsilon)} \right]. \end{aligned}$$

Wykonując całkowanie względem k_0 metodą residuum otrzymujemy wyrażenie na poprawkę $\check{\Sigma}^{(2a)}$

$$\check{\Sigma}^{(2a)}(p_0) = \int_0^{\infty} \frac{dk}{2k} \hat{g}^2(k) \left[\frac{\mathbf{P}_{\uparrow}}{p_0 + k - m_{\downarrow} - i\epsilon} + \frac{3\mathbf{P}_{\downarrow}}{p_0 - k - m_{\uparrow} + i\epsilon} \right]. \quad (\text{Z.21})$$

Z.4.2. Diagram kijankowy

Podobnie jak w przypadku atomu dwupoziomowego (TLA), w przypadku atomu dipolowego wszystkie diagramy zawierające przynajmniej jeden diagram kijankowy nie dają wkładu w żadnym rzędzie rachunku zaburzeń. Jest to bezpośrednia konsekwencja faktu, że $\text{Tr}\{\tau_i S_F(p_0)\} = 0$ dla $i = 1, 2, 3$. Mamy zatem

$$\begin{array}{c} \circ \\ \text{---} \end{array} = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_0^{\infty} dk \int_0^{\infty} dk' \text{Tr}\{V_i(k)S_F(p_0)\} V_j(k') D_{Fij}(k, k', 0) = 0. \quad (\text{Z.22})$$

Z.4.3. Poprawka radiacyjna $\check{P}^{(4b)}(k_0)$

Poprawka radiacyjna $P^{(4b)}(k_0)$ jest reprezentowana przez wyrażenie

$$\begin{aligned} -i \check{P}_{ij}^{(4b)}(k_0) &= \begin{array}{c} \circ \\ \text{---} \end{array} \\ &= -i \sum_{mn} \int_0^{\infty} dl \int_0^{\infty} dl' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr}\{\sigma_i S_F(p_0 + k_0) V_m(l) S_F(p_0 + k_0 + l_0) \sigma_j S_F(p_0 + l_0) V_n(l') S_F(p_0)\} D_{Fmn}(l, l', l_0). \end{aligned}$$

Wykorzystując własności macierzy τ oraz wykonując ślad otrzymujemy

$$\begin{aligned} \check{P}_{ij}^{(4b)}(k_0) &= \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr}\{\tau_i S_F(p_0 + k_0) \underbrace{\tau_m S_F(p_0 + k_0 + l_0) \tau_j S_F(p_0 + l_0) \tau_m S_F(p_0)}_{\delta_{mj} S_F(p_0 + l_0) \tau_j S_F(p_0 + k_0 + l_0)}\} \check{h}(l_0) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr}\{\tau_j S_F(p_0) \underbrace{\tau_i S_F(p_0 + k_0) \tau_j S_F(p_0 + k_0 + l_0)}_{\delta_{ij} S_F(p_0 + k_0) \tau_j S_F(p_0)} \tau_j S_F(p_0 + l_0)\} \check{h}(l_0) \\ &= \delta_{ij} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr}\{S_F(p_0 + k_0) \tau_j S_F(p_0) S_F(p_0 + k_0 + l_0) \tau_j S_F(p_0 + l_0)\} \check{h}(l_0). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \check{P}_{ij}^{(4b)}(k_0) &= \delta_{ij} \int_0^\infty dk \check{g}^2(k) \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 - m_\downarrow - i\epsilon)(p_0 + k_0 - m_\uparrow + i\epsilon)(p_0 + l_0 - m_\uparrow + i\epsilon)(p_0 + k_0 + l_0 - m_\downarrow - i\epsilon)(l_0^2 - k^2 + i\epsilon)} \\ &+ \delta_{ij} \int_0^\infty dk \check{g}^2(k) \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 - m_\uparrow + i\epsilon)(p_0 + k_0 - m_\downarrow - i\epsilon)(p_0 + l_0 - m_\downarrow - i\epsilon)(p_0 + k_0 + l_0 - m_\uparrow + i\epsilon)(l_0^2 - k^2 + i\epsilon)}. \end{aligned}$$

Łatwo można pokazać, że obie występujące w tym wyrażeniu całki są sobie równe. W tym celu należy najpierw dokonać przesunięcia zmiennej p_0 wg przepisu $p_0 \rightarrow p_0 - l_0$, a następnie zmienić całkowanie względem l_0 na całkowanie względem $-l_0$. Otrzymujemy zatem

$$\check{P}_{ij}^{(4b)}(k_0) = 2\delta_{ij} \int_0^\infty dk \check{g}^2(k) \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 - m_\downarrow - i\epsilon)(p_0 + k_0 - m_\uparrow + i\epsilon)(p_0 + l_0 - m_\uparrow + i\epsilon)(p_0 + k_0 + l_0 - m_\downarrow - i\epsilon)(l_0^2 - k^2 + i\epsilon)}.$$

Wykonując całkowanie względem zmiennej l_0 metodą residuum otrzymujemy

$$\check{P}_{ij}^{(4b)}(k_0) = -2i\delta_{ij} \int_0^\infty dk \check{g}^2(k) \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \frac{2k + m_\downarrow - m_\uparrow + k_0}{2k(k_0 + m_\uparrow - m_\downarrow)(p_0 - m_\downarrow - i\epsilon)(p_0 - k - m_\uparrow + i\epsilon)(p_0 + k_0 - m_\uparrow + i\epsilon)(p_0 + k_0 + k - m_\downarrow - i\epsilon)}.$$

Wykonując w ten sam sposób całkowanie względem zmiennej p_0 otrzymujemy wyrażenie na poprawkę $\check{P}^{(4b)}$

$$\check{P}_{ij}^{(4b)}(k_0) = \delta_{ij} \frac{2}{\Delta\check{m}^2 - k_0^2} \int_0^\infty dk \frac{\check{g}^2(k)}{k(k + \Delta\check{m})}. \quad (\text{Z.23})$$

Z.4.4. Poprawka radiacyjna $\check{P}^{(4c)}(k_0)$

Poprawka radiacyjna $\check{P}^{(4c)}(k_0)$ jest reprezentowana przez wyrażenie

$$\begin{aligned} -i\check{P}_{ij}^{(4c)}(k_0) &= \text{Diagram} \\ &= -i \sum_{mn} \int_0^\infty dl \int_0^\infty dl' \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr}\{\tau_i S_F(p_0 + k_0) \tau_j S_F(p_0) V_m(l) S_F(p_0 + l_0) V_n(l') S_F(p_0)\} D_{Fmn}(l, l', l_0). \end{aligned}$$

Wykorzystując własności macierzy τ oraz wykonując ślad otrzymujemy

$$\begin{aligned}
\check{P}_{ij}^{(4c)}(k_0) &= \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \tau_i S_F(p_0 + k_0) \tau_j S_F(p_0) \tau_m S_F(p_0 + l_0) \tau_m S_F(p_0) \} \check{h}(l_0) \\
&= \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \underbrace{\tau_m S_F(p_0) \tau_i S_F(p_0 + k_0) \tau_j S_F(p_0) \tau_m S_F(p_0 + l_0)}_{\text{(różne od 0)} \Leftrightarrow (i=j)} \} \check{h}(l_0) \\
&= \delta_{ij} \int_0^{\infty} dk \check{g}^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{1}{(p_0 - m_{\uparrow} + i\epsilon)^2 (p_0 + k_0 - m_{\downarrow} - i\epsilon) (l_0 + p_0 - m_{\downarrow} - i\epsilon) (l_0^2 - k^2 + i\epsilon)} \\
&\quad + \delta_{ij} \int_0^{\infty} dk \check{g}^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \frac{3}{(p_0 - m_{\downarrow} - i\epsilon)^2 (p_0 + k_0 - m_{\uparrow} + i\epsilon) (l_0 + p_0 - m_{\uparrow} + i\epsilon) (l_0^2 - k^2 + i\epsilon)}.
\end{aligned}$$

Wykonując całkowanie względem zmiennej l_0 metodą residuum otrzymujemy

$$\begin{aligned}
\check{P}_{ij}^{(4c)}(k_0) &= -i\delta_{ij} \int_0^{\infty} dk \check{g}^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \frac{1}{2k(p_0 - m_{\uparrow} + i\epsilon)(p_0 + k - m_{\downarrow} - i\epsilon)(p_0 + k_0 - m_{\downarrow} - i\epsilon)} \\
&\quad - i\delta_{ij} \int_0^{\infty} dk \check{g}^2(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \frac{3}{2k(p_0 - m_{\downarrow} - i\epsilon)(p_0 - k - m_{\uparrow} + i\epsilon)(p_0 + k_0 - m_{\uparrow} + i\epsilon)}.
\end{aligned}$$

Wykonując w ten sam sposób całkowanie względem zmiennej p_0 otrzymujemy wyrażenie na poprawkę $\check{P}^{(4c)}$

$$\check{P}_{ij}^{(4c)}(k_0) = \delta_{ij} \int_0^{\infty} dk \frac{\check{g}^2(k)}{2k(k + \Delta\check{m})^2} \left[\frac{2\Delta\check{m} + k_0 + k}{(k_0 + \Delta\check{m})^2} + 3 \frac{2\Delta\check{m} - k_0 + k}{(k_0 - \Delta\check{m})^2} \right]. \quad (\text{Z.24})$$

Z.4.5. Poprawka radiacyjna $\check{P}^{(4d)}(k_0)$

Poprawka radiacyjna $\check{P}^{(4d)}(k_0)$ jest reprezentowana przez wyrażenie

$$-i\check{P}_{ij}^{(4d)}(k_0) = \text{Diagram} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \tau_i S_F(p_0 + k_0) \tau_j S_F(p_0) \delta\check{m} S_F(p_0) \}.$$

Wykorzystując rozkład poprawki masowej (5.41a) oraz wykonując ślad otrzymujemy

$$\begin{aligned} P_{ij}^{(4d)}(k_0) &= i\delta_{ij} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \left[\frac{\delta m_{\uparrow}}{(p_0 - m_{\uparrow} + i\epsilon)^2(p_0 + k_0 - m_{\downarrow} - i\epsilon)} + \frac{\delta m_{\downarrow}}{(p_0 - m_{\downarrow} - i\epsilon)^2(p_0 + k_0 - m_{\uparrow} + i\epsilon)} \right] \\ &= \delta_{ij} \left[\frac{\delta m_{\downarrow}}{(k_0 - \Delta m)^2} - \frac{\delta m_{\uparrow}}{(k_0 + \Delta m)^2} \right]. \end{aligned} \quad (\text{Z.25a})$$

Wykorzystując jawny wzór (5.41b) na poprawkę masową w drugim rzędzie rachunku zaburzeń możemy zapisać powyższe wyrażenie w formie

$$= -\delta_{ij} \left[\frac{3}{(k_0 - \Delta\check{m})^2} + \frac{1}{(k_0 + \Delta\check{m})^2} \right] \int_0^{\infty} dk \frac{\check{g}^2(k)}{2k(k + \Delta\check{m})}. \quad (\text{Z.25b})$$

Jak łatwo sprawdzić wyliczona przez nas poprawka $\check{P}^{(4d)}(k_0)$ kasuje podwójny biegun w poprawce $\check{P}^{(4c)}(k_0)$ i ostatecznie ich suma wyraża się wzorem

$$\check{P}_{ij}^{(4c)}(k_0) + \check{P}_{ij}^{(4d)}(k_0) = \delta_{ij} \frac{2\Delta\check{m} + k_0}{\Delta\check{m}^2 - k_0^2} \int_0^{\infty} dk \frac{\check{g}^2(k)}{k(k + \Delta\check{m})^2}. \quad (\text{Z.26})$$

Z.4.6. Poprawki radiacyjne $\check{P}^{(4f)}(k_0)$ i $\check{P}^{(4g)}(k_0)$

Poprawki radiacyjne $\check{P}^{(4f)}(k_0)$ oraz $\check{P}^{(4g)}(k_0)$ są reprezentowane przez następujące wyrażenia

$$\begin{aligned} -i\check{P}_{ij}^{(4f)}(k_0) &= \text{Diagram: a circle with a wavy line inside and two external lines} \\ &= -i \sum_{mn} \int_0^{\infty} dl \int_0^{\infty} dl' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \tau_i S_F(p_0 + k_0) V_m(l) S_F(p_0 + k_0 + l_0) V_n(l') S_F(p_0 + k_0) \tau_j S_F(p_0) \} D_{Fmn}(l, l', l_0), \\ -i\check{P}_{ij}^{(4g)}(k_0) &= \text{Diagram: a circle with a cross inside and two external lines} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \text{Tr} \{ \tau_i S_F(p_0 + k_0) \delta\check{m} S_F(p_0 + k_0) \tau_j S_F(p_0) \}. \end{aligned}$$

Analogicznie jak to zrobiliśmy w punkcie Z.2.7., tzn. przesuając zmienną całkowania względem zmiennej p_0 wg przepisu $p_0 \rightarrow p_0 - k_0$ oraz zmieniając cyklicznie kolejność macierzy pod śladem łatwo można pokazać, że zachodzą związki

$$\check{P}_{ij}^{(4f)}(k_0) = \check{P}_{ji}^{(4c)}(-k_0), \quad (\text{Z.27a})$$

$$\check{P}_{ij}^{(4g)}(k_0) = \check{P}_{ji}^{(4d)}(-k_0). \quad (\text{Z.27b})$$

Ze względu jednak na fakt, że poprawki $\check{P}^{(4c)}$ i $\check{P}^{(4d)}$ są diagonalne we wskaźnikach i oraz j otrzymujemy natychmiast odpowiednie wzory na poprawki $\check{P}^{(4f)}$ i $\check{P}^{(4g)}$

$$\check{P}_{ij}^{(4f)}(k_0) = \delta_{ij} \int_0^\infty dk \frac{\check{g}^2(k)}{2k(k + \Delta\check{m})^2} \left[\frac{2\Delta\check{m} - k_0 + k}{(k_0 - \Delta\check{m})^2} + 3 \frac{2\Delta\check{m} + k_0 + k}{(k_0 + \Delta\check{m})^2} \right], \quad (\text{Z.28a})$$

$$\check{P}_{ij}^{(4g)}(k_0) = - \left[\frac{3}{(k_0 + \Delta\check{m})^2} + \frac{1}{(k_0 - \Delta\check{m})^2} \right] \int_0^\infty dk \frac{\check{g}^2(k)}{2k(k + \Delta\check{m})}. \quad (\text{Z.28b})$$

Podobnie jak poprzednio suma obu poprawek nie posiada podwójnego bieguna i wyraża się wzorem

$$\check{P}_{ij}^{(4f)}(k_0) + \check{P}_{ij}^{(4g)}(k_0) = \delta_{ij} \frac{2\Delta\check{m} - k_0}{\Delta\check{m}^2 - k_0^2} \int_0^\infty dk \frac{\check{g}^2(k)}{k(k + \Delta\check{m})^2}. \quad (\text{Z.29})$$

Bibliografia

- [Abr63] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, I. E. Dzyaloshinski
„*Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*”
Translated by R. A. Silverman
Prentice-Hall Inc., New Jersey (1963)
- [All75] L. Allen, J. H. Eberly
„*Optical Resonance and Two-Level Atoms*”
Wiley-Interscience, New York (1975)
- [And98] D. L. Andrews, L. C. Dávila Romero, G. E. Stedman
„*Phenomenological damping of nonlinear-optical response tensors*”
Phys. Rev. A **57**, 4925 (1998)
- [And03] D. L. Andrews, L. C. Dávila Romero, G. E. Stedman
„*Polarizability and the resonance scattering of light: Damping sign issues*”
Phys. Rev. A **67**, 55801 (2003)
- [Ben06] I. Bengtsson, K. Życzkowski
„*Geometry of Quantum States: An Introduction to Quantum Entanglement*”
Cambridge University Press, Oxford (2006)
- [Berm06] P. R. Berman, R. W. Boyd, P. W. Milloni
„*Polarizability and the optical theorem for a two-level atom with radiative broadening*”
Phys. Rev. A **74**, 53816 (2006)
- [Bia75] I. Bialynicki-Birula, Z. Bialynicka-Birula
„*Quantum Electrodynamics*”
Pergamon, Oxford (1975)
- [Bia07] I. Bialynicki-Birula, T. Sowiński
„*Quantum electrodynamics of qubits*”
Phys. Rev. A **76**, 062106(2007)
- [Bjo65] J. D. Bjorken, S. D. Drell
„*Relativistic Quantum Fields*”
McGraw-Hill, New York (1965)

- [Buc00] A. D. Buckingham, P. Fischer
„*Phenomenological damping in optical response tensors*”
Phys. Rev. A **61**, 35801 (2000)
- [Buc01] A. D. Buckingham, P. Fischer
Reply to „*Comment on »Phenomenological damping in optical response tensors«*”
Phys. Rev. A **63**, 47802 (2001)
- [Cum65] F. W. Cummings
„*Stimulated Emission of Radiation in a Single Mode*”
Phys. Rev. **140**, A1051 (1965)
- [Dir28] P. A. M. Dirac
„*The Quantum Theory of the Electron*”
Proc. R. Soc. **A117**, 610 (1928)
- [Dir34] P. A. M. Dirac
„*Discussion of the infinite distribution of electrons in the theory of the positron*”
Proc. Cambridge Phil. Soc. **30**, 150 (1934)
- [Dut05] S. M. Dutra
„*Cavity Quantum Electrodynamics. The Strange Theory of Light in a Box*”
Wiley, New Jersey (2005)
- [Dys49] F. J. Dyson
„*The Radiation Theories of Tomonaga, Schwinger, and Feynman*”
Phys. Rev. **75**, 486 (1949)
- [Ebe80] J. H. Eberly, N. B. Narozhny, J. J. Sanchez-Mondragon
„*Periodic Spontaneous Collapse and Revival in a Simple Quantum Model*”
Phys. Rev. Lett. **44**, 1323 (1980)
- [Fer32] E. Fermi
„*Quantum theory of radiation*”
Rev. Mod. Phys. **4**, 87 (1932)
- [Fet71] A. L. Fetter, J. D. Walecka
„*Quantum Theory of Many-Particle Systems*”
McGraw-Hill, New York (1971)
- [Fey49] R. Feynman
„*Space-Time Approach to Quantum Electrodynamics*”
Phys. Rev. **76**, 769 (1949)

-
- [Gel51] M. Gell-Mann, F. Low
„*Bound States in Quantum Field Theory*”
Phys. Rev. **84**, 350 (1951)
- [Gel54] M. Gell-Mann, F. Low
„*Quantum Electrodynamics at Small Distances*”
Phys. Rev. **95**, 1300 (1954)
- [Gre03] W. Greiner, J. Reinhardt
„*Quantum Electrodynamics*”
Springer, New York (2003)
- [Han07] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha, L. M. K. Vandersypen
„*Spins in few-electron quantum dots*”
Rev. Mod. Phys. **79**, 1217 (2007)
- [Hei34] W. Heisenberg
„*Bemerkungen zur Diracschen Theorie des Positrons*”
Z. Phys. **90**, 209 (1934)
- [Itz80] C. Itzykson and J. B. Zuber
„*Quantum Field Theory*”
McGraw-Hill, New York (1980)
- [Jac99] J. D. Jackson
„*Classical Electrodynamics*”
Wiley, New York (1999)
- [Jay63] E. T. Jaynes, F. W. Cummings
„*Comparison of Quantum and Semiclassical Radiation Theory with Application to the Beam Maser*”
Proc. IEEE **51**, 89 (1963)
- [Kra25] H.A. Kramers, W. Heisenberg
„*Über die Streuung von Strahlung durch Atome*”
Zeitschrift für Physik **31**, 681 (1925)
- [Kub57] R. Kubo
„*Statistical Mechanical Theory of Irreversible Processes I*”
J. Phys. Soc. Japan **12**, 570 (1957)
- [Kur00] Ch. Kurtsiefer, S. Mayer, P. Zarda, H. Weinfurter
„*Stable Solid-State Source of Single Photons*”
Phys. Rev. Lett. **85**, 290 (2000)
- [Lip50] B. A. Lippmann, J. Schwinger
„*Variational Principles for Scattering Processes I*”
Phys. Rev. **79**, 469 (1950)

- [Lou73] R. Loudon
„*The Quantum Theory of Light*”
Oxford University Press, Oxford, 1973
- [Lou06] R. Loudon, S. M. Barnett
„*Theory of the linear polarizability of a two-level atom*”
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **39**, S555 (2006)
- [Lou00] B. Lounis, W. E. Moerner
„*Single photons on demand from a single molecule at room temperature*”
Nature **407**, 491 (2000)
- [Lut60] J. M. Luttinger
„*Fermi Surface and Some Simple Equilibrium Properties of a System of Interacting Fermions*”
Phys. Rev. **119**, 1153 (1960)
- [Mat55] T. Matsubara
„*A New Approach to Quantum-Statistical Mechanics*”
Prog. Theoret. Phys. **14**, 351 (1955)
- [Mar59] P. C. Martin, J. Schwinger
„*Theory of Many-Particle Systems I*”
Phys. Rev. **115**, 1342 (1959)
- [Mic00] P. Michler, A. Kiraz, C. Becher, W. V. Schoenfeld, P. M. Petroff, L. Zhang, E. Hu, A. Imamoglu
„*A Quantum Dot Single-Photon Turnstile Device*”
Science **290**, 2282 (2000)
- [Mil04] P. W. Milloni, R. W. Boyd
„*Influence of radiative damping on the optical-frequency susceptibility*”
Phys. Rev. A **69**, 23814 (2004)
- [Pau27] W. Pauli
„*Zur Quantenmechanik des magnetischen Elektrons*”
Z. Phys. **43**, 601 (1927)
- [Rem87] G. Rempe, H. Walther, N. Klein
„*Observation of quantum collapse and revival in a one-atom maser*”
Phys. Rev. Lett **58**, 353 (1987)
- [San01] Ch. Santori, M. Pelton, G. Solomon, Y. Dale, Y. Yamamoto
„*Triggered Single Photons from a Quantum Dot*”
Phys. Rev. Lett. **86**, 1502 (2001)

-
- [Sal51] E. E. Salpeter, H. A. Bethe
„*A Relativistic Equation for Bound-State Problems*”
Phys. Rev. **84**, 1232 (1951)
- [Sch95] B. Schumacher
„*Quantum coding*”
Phys. Rev. A **51**, 2738 (1995)
- [Ser35] R. Serber
„*Linear Modifications in the Maxwell Field Equations*”
Phys. Rev. **48**, 49 (1935)
- [Ste01] G. E. Stedman, S. Naguleswaran, D. L. Andrews, L. C. Dávila Romero
„*Comment on: Phenomenological damping in optical response tensors*”
Phys. Rev. A **63**, 47801 (2001)
- [Veh35] A. E. Vehling
„*Polarization Effects in the Positron Theory*”
Phys. Rev. **48**, 55 (1935)
- [Wat56] K. M. Watson
„*Applications of Scattering Theory to Quantum Statistical Mechanics*”
Phys. Rev. **103**, 489 (1956)
- [Wic50] G. C. Wick
„*The Evaluation of the Collision Matrix*”
Phys. Rev. **80**, 268 (1950)
- [Yua02] Z. Yuan, B. E. Kardynal, R. M. Stevenson, A. J. Shields, Ch. J. Lobo, K. Cooper, N. S. Beattie, D. A. Ritchie, M. Pepper
„*Electrically Driven Single-Photon Source*”
Science **295**, 102 (2002)