Harmonični oscilator v 2D

Matej Batič
11. april 2002

1 Naloga

Delec se giblje v potencialu

$$V(x,y) = -\frac{V_0}{\cosh\left(\sqrt{\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2}\right)}.$$

- Pokaži, da je v bližini minimuma potencial harmonski.
- Izračunaj nekaj najnižjih lastnih stanj in energij.
- Izračunaj energijski spekter v posebnem primeru $a = b$. Pokaži, da valovno funkcijo v tem primeru lahko zapišemo tudi kot produkt $\Psi(r)\Phi(\varphi)$, kjer sta r in φ polarni koordinati. Nariši valovne funkcije za prvo vzbujeno stanje v obeh oblikah.

2 Rešitev

Za začetek narišimo naš potencial.

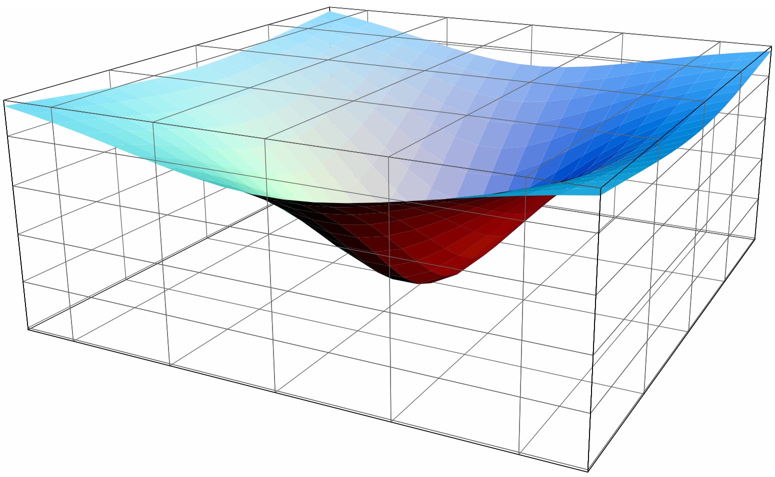

Figure 1: **Potencial; $a = 2$, $b = 5$.**

Izračun lastnih funkcij in lastnih energij za tak potencial bi nam prinesel sive lase. Dejansko. Zato poskusimo raje naš potencial razviti v vrsto okrog točke koordinatnega izhodišča. Zapišimo potencial v eliptičnih koordinatah.

$$x = a \cdot r \cdot \cos(\varphi)$$
$$y = b \cdot r \cdot \sin(\varphi)$$

$$V(r,\varphi) = -\frac{V_0}{\cosh\left(\sqrt{r^2\cos^2(\varphi) + r^2\sin^2(\varphi)}\right)} = -\frac{V_0}{\cosh(r)}$$

Sedaj pa torej razvijemo za $r \ll 1$ oziroma za x in y okrog 0.

$$V(r,\varphi) \approx -\frac{V_0}{1+\frac{r^2}{2}} \approx -V_0\left(1-\frac{r^2}{2}\right)$$

oziroma v kartezičnih koordinatah:

$$V(x,y) \approx -V_0\left(1-\frac{1}{2}\left(\frac{x^2}{a^2}+\frac{y^2}{b^2}\right)\right)$$

Poglejmo si še sliko tega potenciala:

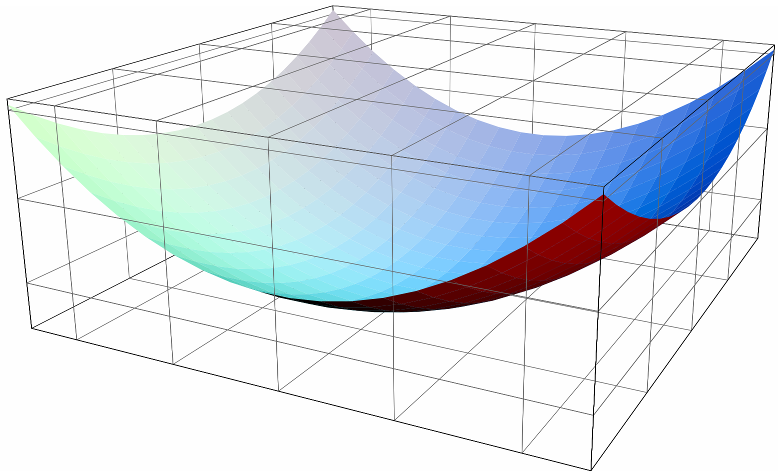

Figure 2: **Skica kvadratičnega potenciala; $a = 2$, $b = 5$.**

Že iz same slike vidimo, da se potenciala precej razlikujeta (risana sta v istem merilu na istem območju). Vendar lahko v bližini $(x,y) = (0,0)$ začeten potencial dobro opišemo s harmonskim. S tem je končan prvi del naloge.

Nadaljujmo z delom.
Zapišimo hamiltonjan:

$$H(x,y) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}\frac{V_0}{a^2}x^2 + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}\frac{V_0}{b^2}y^2 - V_0.$$

Rešujemo enačbo $\mathbf{H\Psi} = \mathbf{E\Psi}$, kjer je H hamiltonov operator, E so lastne energije, Ψ pa lastne funkcije.

Če pogledamo hamiltonjan, vidimo, da ga lahko pišemo kot vsoto dveh delov plus konstanta:

$$H(x, y) = H_1(x) + H_2(y) - V_0,$$

kjer je eden (H_1) odvisen le od x-a, drugi (H_2) pa le od y-a. V takem primeru za reševanje Schroedingerjeve enačbe uporabim nastavek $\Psi(x, y) = \Psi^1(x) \cdot \Psi^2(y)$.

Torej v bistvu rešujem dve enačbi, in sicer:

$$\Psi^1 H_1 = E^1 \Psi^1,$$
$$\Psi^2 H_2 = E^2 \Psi^2,$$

kjer sta H_1 in H_2

$$H_1 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} V_0 \left(\frac{x}{a}\right)^2 = \hbar\omega_x \left(a_x^+ a_x + \frac{1}{2}\right),$$
$$H_2 = \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} V_0 \left(\frac{y}{a}\right)^2 = \hbar\omega_x \left(a_y^+ a_y + \frac{1}{2}\right).$$

Rešitve teh dve enačb pa že poznamo; to sta rešitvi za 1D harmonski oscilator:

$$E_{n_x}^1 = \hbar\omega_x (n_x + \frac{1}{2}) \quad in$$

$$E_{n_y}^2 = \hbar\omega_y (n_y + \frac{1}{2}),$$

kjer sta $\omega_x = \sqrt{\frac{V_0}{ma^2}}$ in $\omega_y = \sqrt{\frac{V_0}{mb^2}}$. Velja tudi pripomniti, da n_x in n_y tečeta od 0,1,2,... Konstante V_0 v izrazih za energije nisem pisal, upošteval jo bom v končnem izrazu za energijo; vem, da mi pravzaprav le premakne vse vrednosti lastnih energij za V_0, torej zapišem:

$$E_{n_x n_y} = \hbar\omega_x (n_x + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_y (n_y + \frac{1}{2}) - V_0.$$

Lastne funkcije pa sestavim s produktom lastnih funkcij za H_1 in H_2, ki jih tudi že poznam:

$$\Psi_{n_x}^1(x) = \left(\frac{m\omega_x}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp^{-\frac{m\omega_x x^2}{2\hbar}} \left(\frac{1}{2^{n_x} n_x!}\right)^{1/2} H_{n_x}\left[\left(\frac{m\omega_x}{\hbar}\right)^{1/2} x\right]$$

$$\Psi_{n_y}^2(y) = \left(\frac{m\omega_y}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp^{-\frac{m\omega_y y^2}{2\hbar}} \left(\frac{1}{2^{n_y} n_y!}\right)^{1/2} H_{n_y}\left[\left(\frac{m\omega_y}{\hbar}\right)^{1/2} y\right]$$

Da ne bomo po nepotrebnem pisali tako dolgih izrazov, bomo prešli na zapis z bra-ji in ket-i, kjer končno lahko zapišemo:

$$\Psi(x, y) = \Psi_{n_x}^1(x) \cdot \Psi_{n_y}^2(y) = |n_x n_y\rangle = |n_x\rangle_x |n_y\rangle_y = \frac{a_x^{+n_x}}{\sqrt{n_x!}} \frac{a_y^{+n_y}}{\sqrt{n_y!}} |0, (x, y)\rangle$$

oziroma

$$\Psi(x, y) = \frac{a_x^{+n_x}}{\sqrt{n_x!}} \frac{a_y^{+n_y}}{\sqrt{n_y!}} |00\rangle$$

Poseben primer je, ko sta a in b enaka. Tedaj pride do degeneracije.

$$\omega_x = \omega_y = \omega = \sqrt{\frac{V_0}{ma^2}},$$

$$E_{n_x n_y} = \hbar\omega\,(m+1) - V_0,$$

kjer je $m = n_x + n_y$. Poglejmo si razpredelnico, kjer sem zapisal energije in valovne funkcije za nekaj najnižjih vrednosti m-ja:

m	$E(x,y)$	$\Psi(x,y)$
0	$\hbar\omega - V_0$	$\|0\rangle_x \|0\rangle_y$
1	$2\hbar\omega - V_0$	$\|1\rangle_x \|0\rangle_y$ $\|0\rangle_x \|1\rangle_y$
2	$3\hbar\omega - V_0$	$\|1\rangle_x \|1\rangle_y$ $\|2\rangle_x \|0\rangle_y$ $\|0\rangle_x \|2\rangle_y$
3	$4\hbar\omega - V_0$	$\|1\rangle_x \|2\rangle_y$ $\|2\rangle_x \|1\rangle_y$ $\|3\rangle_x \|0\rangle_y$ $\|0\rangle_x \|3\rangle_y$

Poglejmo še, kaj novega izvemo, če računamo v polarnih koordinatah. Tedaj je potencial, razvit za majhne odmike okoli ničelne lege, oblike

$$V(r,\varphi) = -V_0\left(1 - \frac{r^2}{2}\right).$$

Kot vidimo, je potencial odvisen le od razdalje od ničelne lege, nič pa od kota φ. V takem primeru vemo, da se ohranja z komponenta vrtilne količine, L_z in najdemo lahko takšne lastne funkcije, ki so lastne funkcije tako operatorju vrtilne količine kot tudi hamiltonovemu operatorju. Poiščmo torej lastne funkcije L_z-ja, ki jih označimo z Φ:

$$\widehat{L}_z = i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\widehat{L}_z\Phi = \hbar M\Phi$$

$$\frac{d\Phi}{\Phi} = -iMd\varphi$$

$$\Phi = \Phi_0 \exp^{-iM\varphi}$$

Ker morajo biti periodične na periodo 2π, je $M \in Z$, normalizacija pa nam za Φ_0 da vrednost $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. Sedaj lahko zapišemo lastne funkcije za prvo vzbujeno stanje za vrtilno količino in za harmonski oscilator. Iz razpredelnice je razvidno, da imamo zaradi generacije dve možnosti: $n_x = 1$ in $n_y = 0$ ter obratno, $n_x = 0$ in $n_y = 1$. Pišimo $|0\rangle_x|1\rangle_y = |01\rangle$ in $|1\rangle_x|0\rangle_y = |10\rangle$.

$$\langle xy|01\rangle = \Psi_{01}(x,y) = \Psi_0^{(x)}\Psi_1^{(y)}$$

$$\langle xy|10\rangle = \Psi_{10}(x,y) = \Psi_1^{(x)}\Psi_0^{(y)}$$

Funkcije $\Psi_{0,1}^{(x/y)}$ dobimo iz že izračunanega rezultata:

$$\Psi_0 = \left(\frac{1}{\pi x_0^2/y_0^2}\right)^{1/4} \exp^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x/y}{x_0/y_0}\right)^2},$$

$$\Psi_1 = \sqrt{2}\frac{x/y}{x_0/y_0}\Psi_0,$$

kjer pišem $x_0 = y_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$.

$$\langle xy|01\rangle = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}} \exp^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} \sqrt{2}\frac{y}{y_0}\frac{1}{\sqrt[4]{\pi y_0^2}} \exp^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{y_0}\right)^2} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp^{-\frac{r^2}{2x_0^2}} \frac{r}{x_0^2} \sin\varphi$$

$$\langle xy|10\rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp^{-\frac{r^2}{2x_0^2}} \frac{r}{x_0^2} \cos\varphi$$

Radi bi dobili lastne funkcije oblike $\Phi \propto \exp^{iM\varphi}$, zato bomo $\langle xy|01\rangle$ pomnožili z i in jo enkrat prišteli, drugič odšteli od $\langle xy|10\rangle$.

$$\clubsuit \qquad (\langle xy|01\rangle \cdot i) + \langle xy|10\rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp^{-\frac{r^2}{2x_0^2}} \frac{r}{x_0^2} (\cos\varphi + i\sin\varphi)$$

$$\spadesuit \qquad \langle xy|10\rangle - (\langle xy|01\rangle \cdot i) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp^{-\frac{r^2}{2x_0^2}} \frac{r}{x_0^2} (\cos\varphi - i\sin\varphi)$$

Funkcije moramo še normalizirati; normalizacija prinese $\frac{1}{\sqrt{2}}$. Tako lahko zapišemo:

$$\clubsuit \qquad \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp^{-\frac{r^2}{2x_0^2}} \frac{r}{x_0^2} e^{i\varphi} = |a\rangle,$$

$$\spadesuit \qquad \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp^{-\frac{r^2}{2x_0^2}} \frac{r}{x_0^2} e^{-i\varphi} = |b\rangle.$$

To sta lastni funkciji operatorjev L_z in H.

$$L_z\langle r\varphi|a\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\langle r\varphi|a\rangle = \hbar\langle r\varphi|a\rangle$$

$$L_z\langle r\varphi|b\rangle = -\hbar\langle r\varphi|b\rangle$$

Za konec narišimo še valovni funkciji za prvo vzbujeno stanje:

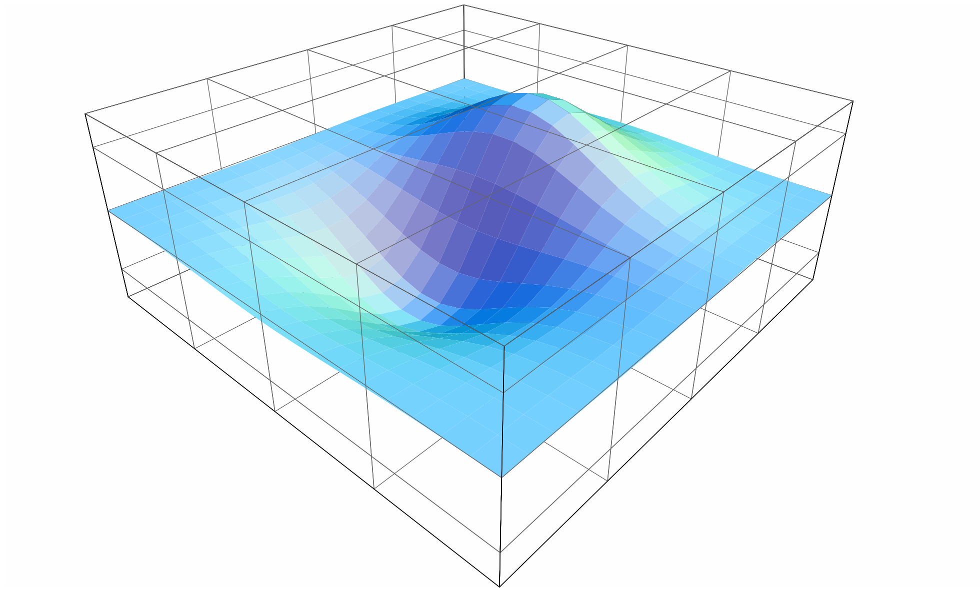

Figure 3: **Skica valovne funkcije** $|01\rangle$**.**

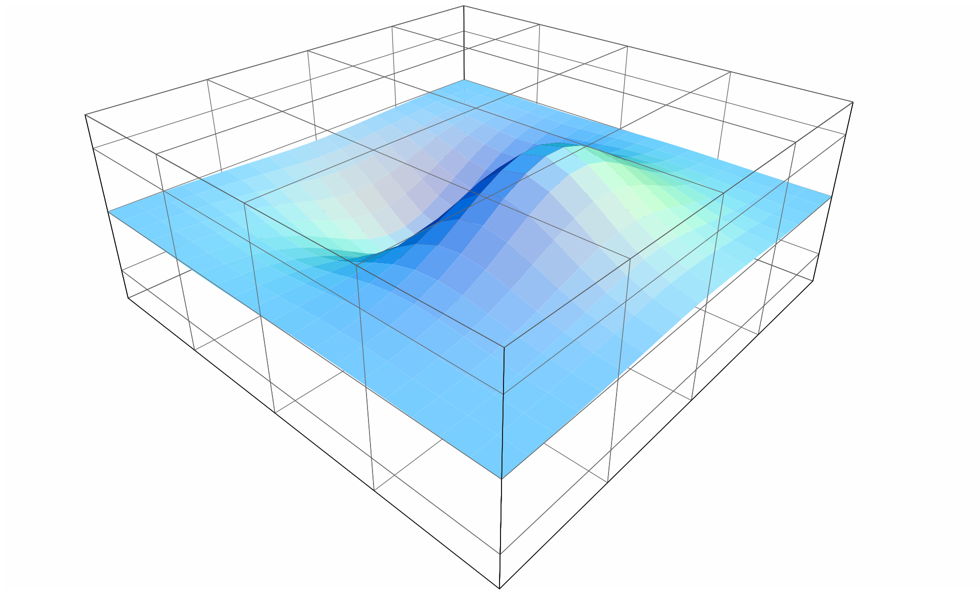

Figure 4: **Skica valovne funkcije** $|10\rangle$**.**