2D harmonski oscilator I

Nejc Košnik

April 2003

Naloga

Delec se giblje v potencialu

$$V(x,y) = ax^2 + 2bxy + ay^2.$$

Obravnavaj lastne funkcije in lastne energije sistema. Kaj se zgodi, če je $b = a$?

Separacija spremenljivk

Poglejmo si primer, ko se da hamiltonijan zapisati kot vsota členov, od katerih je vsak člen odvisen le od ene krajevne spremenljivke.

$$H(x,y) = H_x(x) + H_y(y), \qquad H\psi = E\psi$$

Tak problem rešimo s produktnim nastavkom $\psi(x,y) = X(x)Y(y)$. Vstavimo to v časovno neodvisno Schroedingerjevo enačbo.

$$\begin{aligned} H\psi &= E\psi && (1)\\ (H_x + H_y)XY &= YH_xX + XH_yY = EXY && (2) \end{aligned}$$

Ko zadnjo enačbo delimo z XY, ostane

$$\frac{H_xX}{X}(x) + \frac{H_yY}{Y}(y) = E. \tag{3}$$

Vsota je konstantno enaka lastni energiji E, vsak od obeh členov pa odvisen le od svoje spremenljivke. Sledi, da je vsak člen enak neki konstanti, neodvisni od koordinat.

$$H_xX = E_xX, \qquad H_yY = E_yY.$$

$$E_x + E_y = E$$

Zadnja zahteva sledi iz enačbe (3).

Za našo nalogo se hamiltonijan glasi

$$H(x,y) = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + ax^2 + 2bxy + ay^2,$$

kjer x in y nista razklopljena (mešani člen). Mešanega člena se bomo znebili z uvedbo novih spremenljivk.

Uvedba novih spremenljivk

Potencial $V(x,y) = ax^2+2bxy+ay^2$ je kvadratna forma x in y, zato ga izrazimo v matrični obliki.

$$V(x,y) = (x,y)\begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

V matričnem smislu lahko najdemo bazo, v kateri bo matrika kvadratne forme diagonalna. Diagonalizirajmo jo.

$$\begin{vmatrix} a-\lambda & b \\ b & a-\lambda \end{vmatrix} = (\lambda - a)^2 - b^2 = 0$$

$$\lambda_1 = a+b, \qquad \lambda_2 = a-b$$

Še pripadajoča normirana lastna vektorja :

$$\lambda_1 = a+b \qquad \rightarrow \begin{pmatrix} -b & b \\ b & -b \end{pmatrix} \rightarrow w_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$\lambda_2 = a-b \qquad \rightarrow \begin{pmatrix} b & b \\ b & b \end{pmatrix} \rightarrow w_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Prehodno matriko P za lastno bazo dobimo tako, da jo po stolpcih napolnimo z lastnimi vektorji.

$$P = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Matriko A v stari bazi lahko izrazimo z diagonalno D preko prehodne matrike P kot $A = P^{-1}DP$. Ker je matrika A simetrična, je $P^{-1} = P^T$. Izrazimo sedaj potencial.

$$z = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

$$V = z^T A z = z^T(P^T D P)z = (Pz)^T D(Pz).$$

$$Pz = \begin{pmatrix} \frac{x+y}{\sqrt{2}} \\ \frac{x-y}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Še bolj nazorno :

$$V = \left(\frac{x+y}{\sqrt{2}}, \frac{x-y}{\sqrt{2}}\right)\begin{pmatrix} a+b & 0 \\ 0 & a-b \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{x+y}{\sqrt{2}} \\ \frac{x-y}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \tag{4}$$

$$= (a+b)\left(\frac{x+y}{\sqrt{2}}\right)^2 + (a-b)\left(\frac{x-y}{\sqrt{2}}\right)^2. \tag{5}$$

Očitno je, da moramo vpeljati novi spremenljivki $u = \frac{x+y}{\sqrt{2}}$ in $v = \frac{x-y}{\sqrt{2}}$.

Tudi gibalni količini p_x in p_y, ki nastopata v hamiltonijanu moramo nadomestiti s p_u, p_v. Pravzaprav moramo izraziti vsoto kvadratov $p_x^2+p_y^2$, ki predstavlja velikost gibalne količine. Ker sta naši novi koordinati u in v le za 45° zasukani glede na x, y, se velikost gibalne količine izraža enako – torej $p_x^2+p_y^2 = p_u^2+p_v^2$.

Lastne energije in lastna stanja

Z novima spremenljivkama

$$u = \frac{x+y}{\sqrt{2}}, \qquad v = \frac{x-y}{\sqrt{2}}$$

nam hamiltonijan razpade na vsoto H_u in H_v :

$$\begin{aligned} H(u,v) &= \frac{p_u^2 + p_v^2}{2m} + (a+b)u^2 + (a-b)v^2 \\ &= \left[\frac{p_u^2}{2m} + (a+b)u^2\right] + \left[\frac{p_v^2}{2m} + (a-b)v^2\right] \\ &= H_u(u) + H_v(v) \end{aligned}$$

Ker že vemo za separacijo spremenljivk v takih primerih (vpeljemo $\psi(u,v) = U(u)V(v)$), se kar takoj lotimo reševanja enačb

$$H_u U = E_u U, \qquad H_v V = E_v V.$$

Če ju pogledamo pobliže

$$\left[\frac{p_u^2}{2m} + (a+b)u^2\right] U = E_u U, \qquad \left[\frac{p_v^2}{2m} + (a-b)v^2\right] V = E_v V,$$

vidimo dva harmonska oscilatorja. Katerih lastni energiji in stanji stresemo z rokava.

$$E_u = \hbar\omega_u \left(n_u + \frac{1}{2}\right), \qquad E_v = \hbar\omega_v \left(n_v + \frac{1}{2}\right)$$

$$U_{n_u}(u) = \frac{(a_u^+)^{n_u}|0_u>}{\sqrt{n_u!}}, \qquad V_{n_v}(v) = \frac{(a_v^+)^{n_v}|0_v>}{\sqrt{n_v!}}$$

Frekvenci in kreacijska operatorja oscilatorjev izrazimo iz parametrov a in b kot

$$\omega_u = \sqrt{\frac{2(a+b)}{m}}, \qquad \omega_v = \sqrt{\frac{2(a-b)}{m}},$$

$$x_{0u} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_u}}, \qquad x_{0v} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_v}}$$

$$p_{0u} = \frac{\hbar}{x_{0u}}, \qquad p_{0v} = \frac{\hbar}{x_{0v}}$$

$$a_u^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{u}{x_{0u}} - i\frac{p_u}{p_{0u}}\right), \qquad a_v^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{v}{x_{0v}} - i\frac{p_v}{p_{0v}}\right).$$

Vse skupaj še sestavimo v rešitev našega problema (seštejmo energiji in zmnožimo stanji). Očitno rabimo dve kvantni števili n_u, n_v in spekter je diskreten.

$$E_{n_u,n_v} = \hbar\sqrt{\frac{2(a+b)}{m}}\left(n_u + \frac{1}{2}\right) + \hbar\sqrt{\frac{2(a-b)}{m}}\left(n_v + \frac{1}{2}\right)$$

$$|n_u, n_v> = \frac{(a_u^+)^{n_u}|0_u>}{\sqrt{n_u!}} \frac{(a_v^+)^{n_v}|0_v>}{\sqrt{n_v!}}$$

V primeru, da je $a = b$, se problem zreducira na 1D harmonski oscilator v u smeri. Lastne funkcije v smeri v so kar ravni valovi, saj potencial zaradi koeficienta $(a-b)$ izgine. Tokrat nam kvantno število n_v preide v zvezni valovni vektor k.

$$E_{n_u,k} = 2\hbar\sqrt{\frac{a}{m}}\left(n_u + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$|n_u, k\!> = \frac{(a_u^+)^{n_u}|0_u\!>}{\sqrt{n_u!}}|k\!>$$

$|k\!>$ tu označuje stanje ravnega vala z valovnim številom k. Vidimo, da spekter ni več diskreten, temveč zvezen (k) z diskretnimi skoki (n_u).