Benjamin Batistič

Harmonski oscilator

Naloga:

Delec se giblje v potencialu

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

Izračunaj enegijski spekter v posebnem primeru $b = 0$. Pokaži, da valovno funkcijo v tem primeru lahko zapišemo kot $R(r)F(\varphi)$, kjer sta r in φ polarni koordinati.

Reševanje:

Nalogo rešimo šablonsko:

Ko postavimo b na 0, zapišemo potencial:

$$V(x, y) = a(x^2 + y^2) .$$

Zapišemo še Schroedingerjevo enačbo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2})\psi + a(x^2 + y^2)\psi = E\psi$$

in opazimo, da jo velja rešiti z metodo separacije spremenljivk:

Rešitev zapišemo kot produkt funkcij posameznih koordinat:

$$\psi(x, y) = X(x)Y(y) ,$$

nastavek vsatvimo v enačbo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(X''Y + X\ddot{Y}) + (a(x^2 + y^2) - E)XY = 0$$

in separiramo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X''}{X}+ax^2=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ddot{Y}}{Y}-ay^2+E.$$

Če naj velja zgornja identiteta za vsak par neodvisnih spremenljivk {x , y}, potem moramo zahtevati, da sta izraza na levi in desni strani enačbe konstantna. V našem primeru bomo konstanti rekli E_x ,ker ustreza energiji nihanja v x smeri.Tako prvoten (dvodimenzionalen) problem razpade na dva (enodimenzionalna):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X''}{X}+ax^2=E_x$$

in

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ddot{Y}}{Y}+ay^2=E-E_x=E_y.$$

Rešitve so znane. Zanimamo se za energijski spekter:

$$\begin{aligned}
E_x &= \hbar\omega(n_x+\tfrac{1}{2}) \\
E_y &= \hbar\omega(n_y+\tfrac{1}{2}) \\
E &= E_x+E_y=\hbar\omega(n+1) \\
n &= n_x+n_y
\end{aligned}$$

Med tem smo vpeljali $\omega=\sqrt{\frac{2a}{m}}$. Opazimo, da isti energiji ustreza več lastnih funkcij. Opravka imamo z degeneracijo. Enostavno se da videti, da n-ti energiji v energijskem spektru ustreza $n+1$ valovnih načinov.

Primeri:

E_n	$\{n_x, n_y\}$
E_0	$\{0,0\}$
E_1	$\{0,1\},\{1,0\}$
E_2	$\{2,0\},\{1,1\},\{0,1\}$

Iz degeneracije lahko sklepamo na simetrije našega sistema. Valovne funkcije so, v našem primeru, neobčutljive na rotacijo koordinatnega sistema (rešitve v novih koordinatah so identične rešitvam, ki se izražajo s starimi). Poglejmo kakšne so posledice:

Zapišimo nove koordinate, v zavrtenem sistemu (za majhen kot θ):

$$\begin{aligned}
x' &= x+y\,d\theta \\
y' &= y-x\,d\theta
\end{aligned}$$

V starih koordinatah se Schroedingerjeva enačba glasi:

$$H\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

v novih pa:

$$H\psi(x + yd\theta, y - xd\theta, z) = E\psi(x + yd\theta, y - xd\theta, z)$$

ψ razvijemo v Taylorjevo vrsto do prvega reda:

$$H\psi(x, y, z) + H(\frac{\partial\psi}{\partial y}x - \frac{\partial\psi}{\partial x}y)d\theta = E\psi(x, y, z) + E(\frac{\partial\psi}{\partial y}x - \frac{\partial\psi}{\partial x}y)d\theta$$

potem ko upoštevamo vse identitete dobimo končen izraz:

$$H(\frac{\partial}{\partial y}x - \frac{\partial}{\partial x}y)\psi = (\frac{\partial}{\partial y}x - \frac{\partial}{\partial x}y)H\psi$$

Tako smo pridelali operator, ki komutira s hamiltonko:

$$\left[H, (\frac{\partial}{\partial x}y - \frac{\partial}{\partial y}x)\right] = 0$$

Kakšen fizikalen pomen ima naš komutirajoči operator? Spomnimo se kako se zapiše operator vrtilne količine:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \frac{\hbar}{i}(\frac{\partial}{\partial z}y - \frac{\partial}{\partial y}z, \frac{\partial}{\partial x}z - \frac{\partial}{\partial z}x, \frac{\partial}{\partial y}x - \frac{\partial}{\partial x}y)$$

in opazimo da je $L_z = \frac{\hbar}{i}(\frac{\partial}{\partial y}x - \frac{\partial}{\partial x}y)$ natanko to kar iščemo.

Iz dejstva, da L_z komutira s hamilonko, lahko zatrdimo, da se L_z ohranja s časom. Trdimo pa lahko tudi sledeče: če poljubna operatorja A in B komutirata ([A,B]=0), potem se da lastne funkcije operatorja A linerno izraziti z lastnimi funkcijami operatorja B in obratno. Dokažimo:

Če operatorja A in B komutirata velja:

$$AB = BA$$

Z desne pomnožimo z lastno funkcijo operatorja A:

$$AB\psi_A = aB\psi_A$$
$$A(B\psi_A) = a(B\psi_A)$$

a je lastna vrednost operatorja A.

Vidimo da je $B\psi_A$ pravtako lastna funkcija operatorja A z isto lastno vrednostjo a. Lahko bi rekli, da B slika lastne funkcije operatorja A v prostor lastnih funkcij operatorja A. Če operatorju A, pri lastni vrednosti a ustreza n valovnih funkcij (degeneracija), potem se da poiskati takšna linearna kombinacija $\psi_B = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \psi_{Ai}$, da je ψ_B lastna funkcija operatorja B ($B\psi_B = b\psi_B$), ob pogoju, da lahko B dijagonaliziramo. Kaj to pomeni? Če obstaja set funkcij $s = \{\psi_1, \psi_2, ..., \psi_m\}$ tako da za vsak i=1,...,m velja: $\frac{1}{b_i} B\psi_i \in s$ potem lahko operator B predstavimo z matriko (˝kvazi permutacijsko matriko˝: v vsaki vrstici je najmanj m-1 elemntov enakih 0), ki se za zadostitev prejšnjih trditev mora dati diagonalizirat. Recimo da je A n-krat degeneriran pri lastni vrednosti a, potem je v splošnem matrika, ki prezentira B, m dimenzionalna, kjer je $m \in \{n, n+1, n+2, ..., 2n\}$. Set s namreč generiramo z unijo nekega ortogonaliziranega niza lastnih funkcij operatorja A (ki pripadjo lastni vrednosti a) in niza vseh njegovih slik, ki jih dobimo s preslikavo B.

Primer:

$$s = \{\psi_1, \psi_2\}$$

$$B\psi_1 = b_1\psi_2$$

$$B\psi_2 = b_2\psi_1$$

$$B = \begin{pmatrix} 0 & b_1 \\ b_2 & 0 \end{pmatrix}$$

Iščemo linearno kombinacijo $\psi_B = \sum_{i=1}^{2} \alpha_i \psi_{Ai}$ tako, da velja $B\psi_B = b\psi_B$:

$$\begin{pmatrix} 0 & b_1 \\ b_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = b \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

to je problem lastnih vrednosti in lastnih vektorjev.

Splača se videti, da če ima set s, ki ga generira operator A pri lastni vrednosti a le en element, je ta element lastna funkcija operatorja B.

Vrnimo se k nalogi. Iz nabora lastnih funkcij hamiltonjana bomo skonstruirali lastne funkcije operatorja komponente vrtilne količine v smeri z. Vzemimo netrivialen set, ki ga naš hamiltonjan generira pri energiji E_1:

$$s = \left\{ \frac{\sqrt{2}x}{x_0} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}} e^{-\frac{x^2+y^2}{2x_0^2}}, \frac{\sqrt{2}y}{x_0} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}} e^{-\frac{x^2+y^2}{2x_0^2}} \right\}$$

vpeljali smo $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\varpi}}$. Zavoljo preglednosti bomo presedlali na cilindrične koordinate in ponovno zapisali set:

$$s=\left\{\frac{\sqrt{2}r}{x_0}\frac{Cos(\varphi)}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}}e^{-\frac{r^2}{2x_0^2}},\frac{\sqrt{2}r}{x_0}\frac{Sin(\varphi)}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}}e^{-\frac{r^2}{2x_0^2}}\right\}=\{Cos(\varphi)R,Sin(\varphi)R\}=\{\psi_x,\psi_y\}$$

Operator L_z, v cilindričnih koordinatah zapišemo kot $L_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ in nadaljujemo:

$$L_z\psi_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}Cos(\varphi)R=i\hbar Sin(\varphi)R=i\hbar\psi_y$$

$$L_z\psi_y=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}Sin(\varphi)R=-i\hbar Cos(\varphi)R=-i\hbar\psi_x$$

$$L_z=-i\hbar\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}$$

Poiščemo lastne vrednosti in lastne vektorje matrike $L_z/(-i\hbar)$ (vsi vemo kako se to dela):

$$\lambda_1=i$$
$$\vec{v}_1=(i\quad 1)$$
$$\lambda_2=-i$$
$$\vec{v}_2=(-i\quad 1)$$

In končno zapišemo lastni funkciji operatorja L_z:

$$\psi_{L1}=i\frac{\sqrt{2}r}{x_0}\frac{Cos(\varphi)}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}}e^{-\frac{r^2}{2x_0^2}}+\frac{\sqrt{2}r}{x_0}\frac{Sin(\varphi)}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}}e^{-\frac{r^2}{2x_0^2}}=i\frac{\sqrt{2}r}{x_0}\frac{1}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}}e^{-\frac{r^2}{2x_0^2}}e^{-i\varphi}$$

$$\psi_{L2}=-i\frac{\sqrt{2}r}{x_0}\frac{Cos(\varphi)}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}}e^{-\frac{r^2}{2x_0^2}}+\frac{\sqrt{2}r}{x_0}\frac{Sin(\varphi)}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}}e^{-\frac{r^2}{2x_0^2}}=-i\frac{\sqrt{2}r}{x_0}\frac{1}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}}e^{-\frac{r^2}{2x_0^2}}e^{i\varphi}$$

Na cilindrično simetrijo bi lahko pomislili že na začetku reševanja. Rešimo nalogo še na drug način:

Zapišimo Schrodingerjevo enačbo v cilindričnih koordinatah:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2})\psi+ar^2\psi=E\psi$$

Rešitev bomo nastavli kot produkt radialne in kotne funkcije: $\psi=R(r)F(\varphi)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(R''F + \frac{1}{r^2}R\ddot{F}) + ar^2RF = ERF$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}r^2\frac{R''}{R} + r^2(ar^2 - E) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ddot{F}}{F} = k'$$

$$F = C_1e^{ik\varphi} + C_2e^{-ik\varphi}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mk'}{\hbar^2}}, k \in \mathrm{Z}$$

v izvajanju smo zahtevali, da je k element celih števil. To je nujno zaradi periodičnega pogoja za F: F(0) = F(2 k Pi). Vidimo da so kotne fukcije F, lastne funkcije z komponente operatorja vrtilne količine. Tako smo do njih prišli po drugi poti. Radialna rešitev ni analitična (pa je zato ne bom zapisal).