Kvantna mehanika I – Domača naloga
2D harmonski oscilator

Andrej Petelin

19. april 2004

1 Naloga

Delec se giblje v potencialu

$$V = ax^2 + 2bxy + ay^2.$$

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

2 Uvod

Iščemo funkcije $\Psi(x, y)$, ki rešijo Schrödingerjevo enačbo

$$H\Psi(x, y) = E\Psi(x, y).$$

Kjer je seveda

$$H = \frac{p^2}{2m} + V, \quad p^2 = -\hbar^2\nabla^2.$$

Rešitve za 1D harmonični potencial poznamo, zato poiščemo nove koordinate v katerih se H zapiše kot

$$H = H_1(x') + H_2(y').$$

Tako bomo lahko poiskali rešitve za Ψ z nastavkom:

$$\Psi = X(x')Y(y').$$

3 Rešitev

3.1 Vpeljava novih koordinat

Potencial lahko zapišemo v matrični obliki

$$V = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \vec{x}^T A \vec{x}.$$

Poiskati želimo koordinate, v katerih se potencial zapiše kot

$$V = k_1 x'^2 + k_2 y'^2 = \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} k_1 & 0 \\ 0 & k_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \vec{y}^T D \vec{y}.$$

Matriko A moramo torej diagonalizirati, temu pa ustreza rotacija, saj je matrika A simetrična.

$$V = \vec{x}^T A \vec{x} = \vec{x}^T S^T D S \vec{x} = \vec{y}^T D \vec{y},$$

D diagonalna matrika, S pa ustrezna rotacijska matrika. Matrika D ima za diagonalne elemente kar lastne vrednosti matrike A, S pa ima v stolpcih ustrezne lastne vektorje. Poiskati moramo lastne vrednosti (λ) in njihove lastne vektorje (u).

$$\det(A - \lambda I) = \det \begin{pmatrix} a - \lambda & b \\ b & a - \lambda \end{pmatrix} = (a - \lambda)^2 - b^2 = 0.$$

Lastni vrednosti sta:

$$\lambda_1 = a + b$$
$$\lambda_2 = a - b.$$

Za lastna vektorja velja

$$\begin{pmatrix} a - \lambda & b \\ b & a - \lambda \end{pmatrix} u = 0.$$

Hitro vidimo, da sta lastna vektorja:

$$u_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$u_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Končno lahko zapišemo

$$D = \begin{pmatrix} a + b & 0 \\ 0 & a - b \end{pmatrix},$$

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

Tako dobimo za potencial:

$$V = \begin{pmatrix} \frac{x+y}{\sqrt{2}} \\ \frac{x-y}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} a + b & 0 \\ 0 & a - b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{x+y}{\sqrt{2}} \\ \frac{x-y}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left((a + b) (x + y)^2 + (a - b) (x - y)^2 \right).$$

Zapišemo $x + y = \alpha$ in $x - y = \beta$. Novi koordinatni sistem je zasukan[1] glede na prvotni koordinatni sistem, ∇^2 se zato zapiše identično v novih koordinatah. Operator H se prepiše v:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\right) + (a+b)\,\alpha^2 + (a-b)\,\beta^2. \tag{1}$$

3.2 Separacija spremenljivk

Poskusimo z nastavkom $\Psi = F(\alpha)G(\beta)$:

$$H\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 FG + \left((a+b)\,\alpha^2 + (a-b)\,\beta^2\right)FG = EFG = E\Psi.$$

Delimo zgornjo enačbo z $F(\alpha)G(\beta)$ in izpišemo ∇^2:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{F}\frac{\partial^2 F}{\partial\alpha^2} + \frac{1}{G}\frac{\partial^2 G}{\partial\beta^2}\right) + (a+b)\,\alpha^2 + (a-b)\,\beta^2 = E. \tag{2}$$

E je konstanta. Da bo enačba (2) zadoščala vsaki vrednosti α in β mora veljati:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{F}\frac{\partial^2 F}{\partial\alpha^2}\right) + (a+b)\,\alpha^2 = E_\alpha \tag{3}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{G}\frac{\partial^2 G}{\partial\beta^2}\right) + (a-b)\,\beta^2 = E_\beta, \tag{4}$$

kjer sta E_α in E_β konstanti in velja $E_\alpha + E_\beta = E$. Enačbi (3 in 4) nam predstavljata harmoski oscilator v 1D.

3.3 Lastne energije, lastna stanja

Opazimo, da morata biti konstanti a in b izbrani tako, da velja $a + b \geq 0$ in $a - b \geq 0$. V tem primeru poznamo lastne energije:

$$E_\alpha = \hbar\omega_\alpha(n_\alpha + \frac{1}{2}) \qquad \omega_\alpha = \sqrt{\frac{2(a+b)}{m}},$$

$$E_\beta = \hbar\omega_\beta(n_\beta + \frac{1}{2}) \qquad \omega_\beta = \sqrt{\frac{2(a-b)}{m}}.$$

Lastne funkcije so:

$$|n_\alpha\rangle_F = \frac{a_\alpha^{\dagger n_\alpha}}{\sqrt{n_\alpha!}}|0\rangle_F,$$

$$|n_\beta\rangle_G = \frac{a_\beta^{\dagger n_\beta}}{\sqrt{n_\beta!}}|0\rangle_G,$$

[1] Iz rotacijske matrike S lahko hitro razberemo, da kot zasuka znaša 45°

kjer je $\left|0\right\rangle_F$ funkcija osnovnega stanja za harmonski oscilator (3) in $\left|0\right\rangle_G$ osnovno stanje za (4), $a_\alpha^\dagger$ in $a_\beta^\dagger$ pa sta ustrezna kreacijska operatorja.

Lastne funkcije operatorja H (1) so torej:

$$\left|n_\alpha, n_\beta\right\rangle = \left|n_\alpha\right\rangle_F \left|n_\beta\right\rangle_G = \frac{a_\alpha^{\dagger n_\alpha} a_\beta^{\dagger n_\beta}}{\sqrt{n_\alpha! n_\beta!}} \left|00\right\rangle.$$

Lastne energije operatorja H pa so seveda:

$$E_{\alpha,\beta} = \hbar\omega_\alpha(n_\alpha + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_\beta(n_\beta + \frac{1}{2}).$$

Poglejmo še, kakšne so lastne energije in lastne funkcije v primeru $b = a$. Iz enačb (3 in 4) dobimo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{F}\frac{\partial^2 F}{\partial\alpha^2}\right) + (2a)\,\alpha^2 = E_\alpha, \tag{5}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{G}\frac{\partial^2 G}{\partial\beta^2}\right) = E_\beta. \tag{6}$$

Enačba (5) nam zopet predstavlja harmonski oscilator, medtem ko je rešitev enačbe (6) ravni val. V smeri α torej dobimo vezano stanje, v smeri koordinate β pa je delec prost in ima poljubno energijo $E_\beta = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.
Lastne funkcije so tako:

$$\left|n_\alpha, k\right\rangle = \left|n_\alpha\right\rangle_F \left|k\right\rangle = \frac{a_\alpha^{\dagger n_\alpha}}{\sqrt{n_\alpha!}} \left|0, k\right\rangle.$$

Lastne energije:

$$E_{\alpha,k} = \hbar\omega_\alpha(n_\alpha + \frac{1}{2}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$