Naloga: Dvodimenzionalni harmonski oscilator

Avtor: Peter Jakopič

Obravnavaj Lastna stanja dvodimenzionalnega harmonskega oscilatorja.

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} a_x x^2 + \frac{1}{2} a_y y^2$$

V primeru ko je $a_x = a_y$ poišči taka lastna stanja, ki so hkrati tudi lastna stanja operatorja vrtilne količine okoli osi z:

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

1 Lastna stanja vsote neodvisnih Hamiltonovih operatorjev

V primeru, da je hamiltonian sestavljen iz vsote členov H_i, ki so med seboj neodvisni t.j. delujejo v različnih podprostorih (npr. različnih koordinatah), lahko lastno funkcijo takega hamiltoniana zapišemo kot

$$\psi = \prod_{i=1}^{n} \psi_i,$$

lastna vrednost pa je vsota lastnih vrednosti za posamezne H_i.

To vidimo iz

$$(H_1 + H_2 + ... + H_n)\, \psi_1\psi_2...\psi_n = (E_1 + E_2 + ... + E_n)\psi_1\psi_2...\psi_n$$

$$H_1\psi_1\psi_2...\psi_n + H_2\psi_1\psi_2...\psi_n + ... + H_n\psi_1\psi_2...\psi_n = E_1\psi_1\psi_2...\psi_n + E_2\psi_1\psi_2...\psi_n + ... + E_n\psi_1\psi_2...\psi_n$$

Vidimo, da je $H_i\psi_1\psi_2...\psi_i...\psi_n = E_i\psi_1\psi_2...\psi_i...\psi_n$, saj operator H_i deluje le na funkcijo ψ_i, vse ostale pa se iz izraza okrajšajo.

2 Lastna stanja 2D harmoničnega oscilatorja

Hamiltonian za 2D harmonični oscilator zapišemo v komponentah:

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}a_x x^2 + \frac{1}{2}a_y y^2 = H_x + H_y$$

Vidimo, da ga lahko razstavimo v vsoto hamiltonianov za posamezna oscilatorja, torej bo lastno stanje enako produktu lastnih stanj hamiltonovega operatorja za posamezno smer.

Najprej si poglejmo poseben primer:

2.1 $\mathbf{a}_x = \mathbf{0}, \mathbf{a}_y > \mathbf{0}$

V smeri x torej nimamo vezanega stanja, rešitev predstavlja ravni val

$$\psi_x = e^{ik_x x} = {}_x\langle x|k_x\rangle_x$$

kjer je $k_x = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_x}$, v smeri y pa imamo

$$\psi_y = {}_y\langle y|n_y\rangle_y$$

kjer je $|n_y\rangle_y = \frac{a_y^{+n}}{\sqrt{n!}}|0\rangle_y$ n-to lastno stanje enodimenzionalnega harmoničnega oscilatorja. Celotna valovna funkcija je torej produkt, ki ga označimo:

$$|k_x n_y\rangle = |k_x\rangle|n_y\rangle,$$

lastno energijo pa zapišemo kot

$$E = E_x + E_y = \frac{(\hbar k_x)^2}{2m} + \hbar\omega_y \left(n_y + \frac{1}{2}\right)$$

kjer je $\omega_y = \sqrt{\frac{a_y}{m}}$.

2.2 $\mathbf{a}_x > \mathbf{0}, \mathbf{a}_y > \mathbf{0}$

V tem primeru imamo prava vezana stanja, ki jih zapišemo kot

$$|n_x n_y\rangle = |n_x\rangle_x |n_y\rangle_y$$

z lastno energijo

$$E = \hbar\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y \left(n_y + \frac{1}{2}\right)$$

2.3 $\mathbf{a}_x = \mathbf{a}_y = \mathbf{a}$

V primeru, da imamo $a_x = a_y = a$, ima potencial rotacijsko simetričen paraboličnen profil. Lastne energije so v tem primeru enake

$$E = \hbar\omega(n_x + n_y + 1)$$

kjer je $\omega = \sqrt{\frac{a}{m}}$. Vidimo, da dobimo stanja, ki so degenerirana:

n_x	n_y
0	0
0	1
1	0
2	0
1	1
0	2

n - to stanje je torej $(n+1)$ krat degenerirano.

3 Lastna stanja operatorja vrtilne količine

Zgornji hamiltonian zapišemo eksplicitno v polarnem koordinatnem sistemu:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}a\left(x^2+y^2\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right] + \frac{1}{2}ar^2$$

Vidimo, da komponenta φ v izrazu ne nastopa eksplicitno. Če zapišemo operator vrtilne količine

$$L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi},$$

vidimo, da velja: $[L_z, H] = 0$, torej je lastna vrednost operatorja L_z dobro kvantno število. Lastna stanja vrtilne količine dobimo:

$$L_z|\psi\rangle = l|\psi\rangle$$
$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = l\psi$$
$$\psi = Ae^{i\frac{l}{\hbar}\varphi}$$

Upoštevamo periodični robni pogoj:

$$\psi\left(2\pi+\varphi\right) = \psi\left(\varphi\right)$$
$$e^{i\frac{l}{\hbar}2\pi} = 1 \Rightarrow \frac{l}{\hbar}2\pi = 2\pi m \Rightarrow l = m\hbar$$

Izraz še normaliziramo:

$$1 = \int_0^{2\pi}\psi^*\psi d\varphi = A^2 2\pi \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Valovna funkcija je torej

$$\psi_m\left(\varphi\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$$

Ker sta torej $n = n_1 + n_2$ in m dobri kvantni števili, lahko iz teh stanj sestavimo bazo.

4 Prehod na novo bazo

Poglejmo sedaj, kako izrazimo bazne vektorje te nove baze $|nm\rangle$ z baznimi vektorji stare baze $|n_1 n_2\rangle$.

Prvi dve stanji enodimenzionalnega harmoničnega oscilatorja poznamo:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$$

$$\psi_1(x) = \frac{\sqrt{2}x}{x_0} \psi_0(x)$$

Oglejmo si torej stanja $|1,0\rangle$, $|0,1\rangle$, (v bazi $|n_1 n_2\rangle$) in jih poskušajmo kombinirati tako, da bomo lahko iz njih dobili lastna stanja v bazi $|nm\rangle$, ki bodo hkrati lastna stanja H in L_z.

$$\psi_{01} = \psi_0 \psi_1 = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} \sqrt{2} \frac{y}{x_0} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}} e^{-\frac{y^2}{2x_0^2}} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{x_0^2} r \sin\varphi \; e^{-\frac{r^2}{2x_0^2}}$$

$$\psi_{10} = \psi_1 \psi_0 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{x_0^2} r \cos\varphi \; e^{-\frac{r^2}{2x_0^2}}$$

kjer smo upoštevali polarni zapis: $x = r\cos\varphi$ in $y = r\sin\varphi$. Vidimo, da lahko valovni funkciji sestavimo tako, da iz kotnih funkcij dobimo ravno člen $e^{im\varphi}$, kjer je m lahko 1 ali -1.

$$|1, \pm 1\rangle_{nm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1,0\rangle_{n_1 n_2} \pm i|0,1\rangle_{n_1 n_2}\right)$$

Poleg valovne funkcije smo zapisali oznako baze.

Ta postopek je bil trivialen za prvo vzbujeno stanje, za višja stanja pa ni mogoče tako enostavno ugotoviti, zato bomo izračun ponovili z bolj splošnim postopkom. V splošnem za lastna stanja vrtilne količine velja

$$L_z \psi = l\psi$$

kjer je $l = m\hbar$. Zapišemo splošen nastavek za valovno funkcijo v stari bazi:

$$\psi = a|1,0\rangle + b|0,1\rangle$$

V nastavek smo vključili zgolj stanja z isto energijo. Ta nastavek vstavimo v enačbo za lastna stanja vrtilne količine in dobimo

$$aL_z|1,0\rangle + bL_z|0,1\rangle = am\hbar|1,0\rangle + bm\hbar|0,1\rangle$$

Če sedaj enačbo posamič z desne množimo z $\langle 1,0|$ in $\langle 0,1|$ (oz. projeciramo enačbo na posamezne smeri), dobimo enačbi:

$$\langle 1,0|L_z|1,0\rangle a + \langle 1,0|L_z|0,1\rangle b = am\hbar$$

$$\langle 0,1|L_z|1,0\rangle a + \langle 0,1|L_z|0,1\rangle b = bm\hbar$$

Oziroma v matrični obliki:

$$\begin{bmatrix} \langle 1,0|L_z|1,0\rangle & \langle 1,0|L_z|0,1\rangle \\ \langle 0,1|L_z|1,0\rangle & \langle 0,1|L_z|0,1\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = m\hbar \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

Vidimo torej, da ima ta matrika lastni vrednosti, ki sta ravno lastni vrednosti operatorja vrtilne količine, in lastna vektorja, ki sta ravno koeficienta razvoja valovne funkcije po novi bazi. Lastni vrednosti matrike nam bosta torej definirali nova bazna vektorja, pripadajoča lastna vektorja pa bosta koeficienta razvoja teh novih baznih vektorjev po stari bazi. V našem primeru torej dobimo:

$$\langle 0,1|L_z|0,1\rangle = \int_0^{2\pi} \frac{2}{\pi} \frac{1}{x_0^2} r^2 \sin\varphi \;\; (-i\hbar)\cos\varphi \; e^{-\frac{2r^2}{2x_0^2}} r dr d\varphi = 0, \qquad \text{integral kotnega dela je očitno nič}$$

$$\langle 1,0|L_z|1,0\rangle = \int_0^{2\pi} \frac{2}{\pi}\frac{1}{x_0^2} r^2 \cos\varphi \ \ (i\hbar) \sin\varphi \ e^{-\frac{2r^2}{2x_0^2}} r dr d\varphi = 0$$

$$\langle 0,1|L_z|1,0\rangle = \int\limits_0^{2\pi} \frac{2}{\pi}\frac{1}{x_0^4} r^2 \sin\varphi \, (-i\hbar) \, (-\sin\varphi) \, e^{\frac{-2r^2}{2x_0^2}} r dr d\varphi = i\hbar \int\limits_0^{2\pi} |\psi_{01}|^2 = i\hbar$$

$$\langle 1,0|L_z|0,1\rangle = \int\limits_0^{2\pi} \frac{2}{\pi}\frac{1}{x_0^4} r^2 \cos\varphi \, (-i\hbar) \, (\cos\varphi) \, e^{\frac{-2r^2}{2x_0^2}} r dr d\varphi = -i\hbar \int\limits_0^{2\pi} |\psi_{10}|^2 = -i\hbar$$

Imamo torej matriko:

$$\begin{bmatrix} 0 & i\hbar \\ -i\hbar & 0 \end{bmatrix}$$

Lastni vrednosti sta:

$$\lambda^2 - \hbar^2 = 0 \Rightarrow \lambda_{1,2} = \pm\hbar$$

Lastna vektorja pa:

$$c\begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}, \quad c\begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix}, \ c = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ (dobimo iz normalizacije)}$$

Končni rezultat je torej:

$$|1,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1,0\rangle + i|0,1\rangle\right)$$

$$|1,-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1,0\rangle - i|0,1\rangle\right)$$

kar je isto kot prej. Enako bi lahko postopali tudi za višja vzbujena stanja.