Tridimenzionalni harmonski oscilator II

Andrej Grut

20. maj 2008

Naloga

Obravnavaj lastna stanja izotropnega tridimezionalnega harmonskega oscilatorja

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}ar^2$$

- Za drugo vzbujeno stanje poišči taka lastna stanja, ki so hkrati lastna stanja operatorja vrtilne količine okoli osi z in kvadrata velikosti vrtilne količine.
- Kako se drugo vzbujeno stanje razcepi v homogenem magnetnem polju?

Reševanje

Ker govorimo o tridimenzionalnem harmonskem oscilatorju, v zgornjem izrazu za H nastopata **p** in **r** kot vektorja z tremi elementi. Izraz za H prepišemo v vsoto treh delov - vsak od teh delov je bodisi odvisen samo od koordinate x bodisi samo od y, bodisi od z.

$$H = \left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}ax^2\right) + \left(\frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}ay^2\right) + \left(\frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2}az^2\right)$$

To smo naredili zato, ker bomo poskušali poiskati lastne funkcije Hamiltonovega operatorja kot produkt funkcij, ki so odvisne samo od ene koordinate.

$$\psi(x,y,z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$$

Lastne funkcije $\psi_x(x), \psi_y(y) in \psi_z(z)$ operatorjev *Hx* ,*Hy, Hz* , lahko iščemo posebej

$$H_x\psi_x = E_x\psi_x, \qquad H_y\psi_y = E_y\psi_y, \qquad H_z\psi_z = E_z\psi_z,$$

potem pa lastno funkcijo operatorja *H* izračunamo kot produkt $\psi_x\psi_y\psi_z$ z lastno vrednostjo E = Ex + Ey + Ex. Da bi to dokazali, s Hamiltonovim operatorjem delujmo na omenjen produkt

$$H\psi_x\psi_y\psi_z = H_x\psi_x\psi_y\psi_z + H_y\psi_y\psi_x\psi_z + H_z\psi_z\psi_x\psi_y = (E_x + E_y + E_z)\psi_x\psi_y\psi_z$$

Del Hamiltonovega operatorja, ki je odvisen od x, deluje le na ψ_x in enako za y ter z.

Operatorji Hx ,Hy in Hz predstavljajo v resnici harmonski oscilator v eni dimenziji. Zanj že poznamo lastne funkcije in lastne energije

$$E_{x/y/z} = \hbar\omega\,(n_{x/y/z} + \frac{1}{2}),$$

kjer sta $\omega = \sqrt{a/m}$ in $n_{x/y/z} = 0,1,2,...$ Lastne energije in funkcije tridimenzionalnega harmonskega oscilatorja zapišemo kot

$$E = \hbar\omega\,(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2})$$
$$|\psi\rangle = |n_x\rangle|n_y\rangle|n_z\rangle = |n_x n_y n_z\rangle.$$

Dobili smo lastna stanja, ki so degenerirana. Prvo vzbujeno stanje $E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega$ je naprimer trikrat degenerirano, drugo vzbujeno stanje $E_2 = \frac{7}{2}\hbar\omega$ pa je šestkrat degenerirano. Lastna stanja z energijo E_2 so namreč: $|2,0,0\rangle, |0,2,0\rangle, |0,0,2\rangle, |1,1,0\rangle, |1,0,1\rangle in |0,1,1\rangle$.

Trditev: Če poljubna operatorja A in B komutirata ([A,B]=0), potem se da lastne funkcije operatorja A linearno izraziti z lastnimi funkcijami operatorja B in obratno.

Vemo pa, da L_z in L^2 komutirata s Hamiltonovim operatorjem H. Torej to pomeni, če bi poznali lastne funkcije, ki so hkrati lastne funkcije L_z in L^2 bi jih lahko linearno izrazili z lastnimi funkcijami hamiltonke in obratno. Take funkcije pa poznamo. To so pa sferni harmoniki ali krogelne funkcije ($Y_{lm} = |lm\rangle$). Splošna valovna funkcija, ki je hkrati lastna funkcija H, L_z in L^2 se zapiše kot: $\psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)Y(\vartheta,\varphi) = |R\rangle|lm\rangle$.

Sedaj iz lastnih funkcij 1D harmonskega oscilatorja skonstruiramo lastne funkcije za 3D harmonski oscilator. Lastne funkcije za 1D harmonski oscilator so:

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}} e^{\frac{x^2}{2x_0^2}}, \qquad \psi_1 = \psi_0 \sqrt{2}\frac{x}{x_0}, \qquad \psi_2 = \psi_0 (\sqrt{2}(\frac{x}{x_0})^2 - \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Upoštevamo še, da je $x_0 = y_0 = z_0 = r_0$

Kartezične koordinate pa niso preveč ugodne za računanje, saj se izkaže, da moram računati s sfernimi harmoniki. Zato grem v sferične koordinate:

$$x = r\cos\varphi\,\sin\vartheta$$
$$y = r\sin\varphi\,\sin\vartheta$$
$$z = r\cos\vartheta$$

Dobim:

$$|110\rangle = \left(\pi r_0^2\right)^{-3/4} \exp(-\frac{r^2}{2r_0^2})\frac{2}{r_0^2} r^2 \cos\varphi \, \sin\varphi \, \sin^2\vartheta$$

$$|101\rangle = \left(\pi r_0^2\right)^{-3/4} \exp(-\frac{r^2}{2r_0^2})\frac{2}{r_0^2} r^2 \cos\varphi \, \sin\vartheta \, \cos\vartheta$$

$$|011\rangle = \left(\pi r_0^2\right)^{-3/4} \exp(-\frac{r^2}{2r_0^2})\frac{2}{r_0^2} r^2 \sin\varphi \, \sin\vartheta \, \cos\vartheta$$

$$|200\rangle = \left(\pi r_0^2\right)^{-3/4} \exp(-\frac{r^2}{2r_0^2})\frac{2(\frac{r\cos\varphi \, \sin\vartheta}{r_0})^2 - 1}{\sqrt{2}}$$

$$|020\rangle = \left(\pi r_0^2\right)^{-3/4} \exp(-\frac{r^2}{2r_0^2})\frac{2(\frac{r\sin\varphi \, \sin\vartheta}{r_0})^2 - 1}{\sqrt{2}}$$

$$|002\rangle = \left(\pi r_0^2\right)^{-3/4} \exp(-\frac{r^2}{2r_0^2})\frac{2(\frac{r\cos\vartheta}{r_0})^2 - 1}{\sqrt{2}}$$

Žal zgornje lastne funkcije niso lastne funkcije L_z in L^2. Lastne funkcije za ta stanja so sferni harmoniki $Y_{lm} = |lm\rangle$. Zato poskušam gornje funkcije izraziti s pomočjo $|lm\rangle$. To storim tako, da najprej zapišem $|n_x n_y n_z\rangle$ kot linearno kombinacijo $|lm\rangle$:

$$|n_x n_y n_z\rangle = a_{00}|l_0 m_0\rangle ... a_{uv}|l_u m_v\rangle,$$

kjer a_{pq} izračunam po formuli:

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \langle n_x n_y n_z | l_p m_q\rangle \sin\vartheta \, d\varphi \, d\vartheta$$

Če gornjemu integralu odstranim radialni del, dobim ravno a_{pq}.

Za 2. vzbujeno stanje se izkaže, da so od nič različni koeficienti pred sfernimi harmoniki: Y_{00}, Y_{22}, Y_{21}, Y_{20}, Y_{2-1}, Y_{2-2}. Koeficiente, ki sem jih izračunal s pomočjo enačbe za a_{pq}, zapišem v matriko in tako dobim sistem 6×6. Paziti moram, da so funkcije normirane:

$$\begin{pmatrix} \psi_{011} \\ \psi_{101} \\ \psi_{110} \\ \psi_{200} \\ \psi_{020} \\ \psi_{002} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -2i\sqrt{\frac{2}{15}} & 0 & -2i\sqrt{\frac{2}{15}} & 0 \\ 0 & 0 & -2\sqrt{\frac{2}{15}} & 0 & 2i\sqrt{\frac{2}{15}} & 0 \\ 0 & 2i\sqrt{\frac{2}{15}} & 0 & 0 & 0 & -2i\sqrt{\frac{2}{15}} \\ \frac{2\sqrt{2}}{3} & \frac{2}{\sqrt{15}} & 0 & -\frac{2\sqrt{\frac{2}{5}}}{3} & 0 & \frac{2}{\sqrt{15}} \\ \frac{2\sqrt{2}}{3} & -\frac{2}{\sqrt{15}} & 0 & -\frac{2\sqrt{\frac{2}{5}}}{3} & 0 & -\frac{2}{\sqrt{15}} \\ \frac{2\sqrt{2}}{3} & 0 & 0 & \frac{4\sqrt{\frac{2}{5}}}{3} & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} Y_{00} \\ Y_{22} \\ Y_{21} \\ Y_{20} \\ Y_{2-1} \\ Y_{2-2} \end{pmatrix}$$

Sedaj sferne harmonike izrazim s pomočjo valovnih funkcij $\psi_{n_x n_y n_z}$:

$$\begin{pmatrix} Y_{00} \\ Y_{22} \\ Y_{21} \\ Y_{20} \\ Y_{2-1} \\ Y_{2-2} \end{pmatrix} = A^{-1} \cdot \begin{pmatrix} \psi_{011} \\ \psi_{101} \\ \psi_{110} \\ \psi_{200} \\ \psi_{020} \\ \psi_{002} \end{pmatrix}$$

In končno dobim lastne funkcije za drugo vzbujeno stanje, ki so hkrati lastna stanja operatorja vrtilne količine okoli osi z in kvadrata velikosti vrtilne količine:

$$\begin{pmatrix} Y_{00} \\ Y_{22} \\ Y_{21} \\ Y_{20} \\ Y_{2-1} \\ Y_{2-2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\sqrt{\frac{2}{3}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_{011} \\ \psi_{101} \\ \psi_{110} \\ \psi_{200} \\ \psi_{020} \\ \psi_{002} \end{pmatrix}$$

Stanja $|2,0,0\rangle, |0,2,0\rangle, |0,0,2\rangle, |1,1,0\rangle, |1,0,1\rangle in |0,1,1\rangle$ imajo seveda enako energijo, kar pa se spremeni potem, ko vklopimo magnetno polje. Hamiltonianu dodamo člen $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, ki predstavlja energijo magnetnega dipola v magnetnem polju, pri čemer je $\vec{\mu} = -\frac{\mu_B \vec{l}}{\hbar}$ operator magnetnega momenta, $\vec{l}$ pa operator vrtilne količine.

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} ar^2 + \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{\vec{l}} \cdot \vec{B} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} ar^2 + \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{l}_z \cdot B_z$$

Ko ta Hamiltonian deluje na lastne funkcije dobimo za n = 2:

$$H|R\rangle|lm\rangle = (\frac{7}{2}\hbar\omega + m\mu_B B)|R\rangle|lm\rangle$$

Razcep v magnetnem polju je odvisen od kvantnega števila m. Ker lahko drugo vzbujeno stanje sestavimo iz stanj z vrednostmi $m = 0, \pm 1, \pm 2$, se energija drugega vzbujenega stanja v magnetnem polju razcepi v 5 delov.