

Tridimenzionalni harmonski oscilator II

Andrej Grut

14. 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

Hamiltonova funkcija za sferno simetričen 3-D harmonski oscilator izražena v kartezičnih koordinatah je preproste oblike:

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + \frac{1}{2}a(x^2 + y^2 + z^2)$$
$$\hat{H} = \frac{-\hbar}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{2}a(x^2 + y^2 + z^2)$$

S kreacijskim in anihilacijskim operatorjem

$$a_w^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{w}{w_0} - w_0 \frac{\partial}{\partial w} \right)$$
$$a_w = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{w}{w_0} + w_0 \frac{\partial}{\partial w} \right)$$
$$w = x, y, z \quad w_0 = x_0 = y_0 = z_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}}$$

zapišemo operator hamiltonove funkcije kot:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left((a_x^\dagger a_x + \frac{1}{2}) + (a_y^\dagger a_y + \frac{1}{2}) + (a_z^\dagger a_z + \frac{1}{2}) \right)$$

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z$$

$$\hat{H}_w = \hbar\omega \left(a_w^\dagger a_w + \frac{1}{2} \right), w = x, y, z$$

Vidimo, da je zgornja hamiltonka sestavljena iz členov, ki vsak zase predstavljajo hamiltonko enodimenzionalnega harmonskega oscilatorja, zato lahko lastne funkcije hamiltonke 3-D harmonskega oscilatorja $\psi(x,y,z)$ zapišemo kot produkt lastnih funkcij hamiltonke 1-D harmonskega oscilatorja.

$$\psi(x, y, z) = \xi(x)\eta(y)\zeta(z)$$

$$\hat{H}_x \psi = \eta \zeta \hat{H}_x \xi$$

$$\hat{H}_y \psi = \xi \zeta \hat{H}_y \eta$$

$$\hat{H}_z \psi = \xi \eta \hat{H}_z \zeta$$

$$\hat{H} \psi = \eta \zeta \hat{H}_x \xi + \xi \zeta \hat{H}_y \eta + \xi \eta \hat{H}_z \zeta = E \xi \eta \zeta \quad \text{to enačbo delim z } \xi \eta \zeta$$

$$\frac{1}{\xi} \hat{H}_x \xi + \frac{1}{\eta} \hat{H}_y \eta + \frac{1}{\zeta} \hat{H}_z \zeta = E_x + E_y + E_z = \hbar\omega \left((n_x + \frac{1}{2}) + (n_y + \frac{1}{2}) + (n_z + \frac{1}{2}) \right) = \hbar\omega \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) = E$$

Lastne energije in funkcije tidimenzionalneg harmonskega oscilatorja zapišemo kot:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right), n = n_x + n_y + n_z$$

$$\psi = |n_x\rangle |n_y\rangle |n_z\rangle = |n_x, n_y, n_z\rangle$$

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: $|2,0,0\rangle, |0,2,0\rangle, |0,0,2\rangle, |1,1,0\rangle, |1,0,1\rangle, |0,1,1\rangle$

Delujmo na zgornjo 3-D lastno funkcijo z 1-D operatorji:

$$a_x |n_x, n_y, n_z\rangle = \sqrt{n_x} |n_x - 1, n_y, n_z\rangle;$$

$$a_x^\dagger |n_x, n_y, n_z\rangle = \sqrt{n_x + 1} |n_x + 1, n_y, n_z\rangle;$$

$$a_x^\dagger a_x |n_x, n_y, n_z\rangle = \hat{n}_x |n_x, n_y, n_z\rangle = n_x |n_x, n_y, n_z\rangle$$

(\hat{n}_x je operator štetja, n_x pa njegova lastna vrednost) Podobno velja za 1-D operatorje drugih dveh koordinatnih osi.

Zapišimo sedaj operator kvadrata vrtilne količine z anihilacijskim in kreacijskim operatorjem (upoštevamo, da enodimenzionalna operatorja različnih koordinatnih osi med seboj komutirata):

$$\begin{aligned} [a_w, a_w^\dagger] &= 1 \\ \hat{L}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2((a_y^\dagger a_z - a_z^\dagger a_y)^2 + (a_z^\dagger a_x - a_x^\dagger a_z)^2 + (a_x^\dagger a_y - a_y^\dagger a_x)^2) \\ \hat{L}_z^2 &= -\hbar^2(a_x^\dagger a_x^\dagger a_y a_y - a_y^\dagger a_y^\dagger a_x a_x - a_x^\dagger a_x a_y a_y^\dagger + a_y^\dagger a_y a_x a_x^\dagger) = \\ &= -\hbar^2(a_x^\dagger a_x^\dagger a_y a_y + a_y^\dagger a_y^\dagger a_x a_x - a_y^\dagger a_y (a_x^\dagger a_x + 1) - a_x^\dagger a_x (a_y^\dagger a_y + 1)) = \\ &= -\hbar^2(a_x^\dagger a_x^\dagger a_y a_y + a_y^\dagger a_y^\dagger a_x a_x - n_y(n_x + 1) - n_x(n_y + 1)) = \\ &= -\hbar^2(a_x^{+2} a_y^2 + a_y^{+2} a_x^2 - 2n_x n_y - (n_x + n_y)) \end{aligned}$$

$$\hat{L}_y^2 = -\hbar^2(a_x^{+2} a_z^2 + a_z^{+2} a_x^2 - 2n_x n_z - (n_x + n_z))$$

$$\hat{L}_x^2 = -\hbar^2(a_y^{+2} a_z^2 + a_z^{+2} a_y^2 - 2n_y n_z - (n_y + n_z))$$

$$\hat{L}^2 = \hbar^2(2(n_x n_y + n_x n_z + n_y n_z) + 2(n_x + n_y + n_z) - a_x^{+2} a_y^2 - a_y^{+2} a_x^2 - a_x^{+2} a_z^2 - a_z^{+2} a_x^2 - a_y^{+2} a_z^2 - a_z^{+2} a_y^2)$$

Sedaj iščemo lastna stanja kvadrata vrtilne količine, ki so tudi lastne funkcije Hamiltonovega operatorja. Delujmo z operatorjem kvadrata vrtilne količine na nekaj lastnih funkcij hamiltonke z najnižjimi energijami ($n=0,1,2$):

$$\begin{aligned} \hat{L}^2|1,0,0\rangle &= \hbar^2(2(n_x n_y |1,0,0\rangle + n_x n_z |1,0,0\rangle + n_y n_z |1,0,0\rangle) + 2(n_x |1,0,0\rangle + n_y |1,0,0\rangle + n_z |1,0,0\rangle) - \\ &- a_x^{+2} a_y^2 |1,0,0\rangle - a_y^{+2} a_x^2 |1,0,0\rangle - a_x^{+2} a_z^2 |1,0,0\rangle - a_z^{+2} a_x^2 |1,0,0\rangle - a_y^{+2} a_z^2 |1,0,0\rangle - a_z^{+2} a_y^2 |1,0,0\rangle) = \\ &= \hbar^2(2 \cdot (0 + 0 + 0) + 2 \cdot (|1,0,0\rangle + 0 + 0) - 0 - 0 - 0 - 0 - 0 - 0) = 2\hbar^2 |1,0,0\rangle = l(l+1)\hbar^2 |1,0,0\rangle, l=1 \end{aligned}$$

$$\hat{L}^2|0,1,0\rangle = 2\hbar^2|0,1,0\rangle; l=1$$

$$\hat{L}^2|0,0,1\rangle = 2\hbar^2|0,0,1\rangle; l=1$$

$$\hat{L}^2|1,1,0\rangle = 6\hbar^2|1,1,0\rangle; l=2$$

$$\hat{L}^2|1,0,1\rangle = 6\hbar^2|1,0,1\rangle; l=2$$

$$\hat{L}^2|0,1,1\rangle = 6\hbar^2|0,1,1\rangle; l=2$$

$$\hat{L}^2|0,0,0\rangle = 0; l=0$$

$$\begin{aligned} \hat{L}^2|2,0,0\rangle &= \hbar^2(2(n_x n_y |2,0,0\rangle + n_x n_z |2,0,0\rangle + n_y n_z |2,0,0\rangle) + 2(n_x |2,0,0\rangle + n_y |2,0,0\rangle + n_z |2,0,0\rangle) - \\ &- a_x^{+2} a_y^2 |2,0,0\rangle - a_y^{+2} a_x^2 |2,0,0\rangle - a_x^{+2} a_z^2 |2,0,0\rangle - a_z^{+2} a_x^2 |2,0,0\rangle - a_y^{+2} a_z^2 |2,0,0\rangle - a_z^{+2} a_y^2 |2,0,0\rangle) = \\ &= \hbar^2(2 \cdot (0 + 0 + 0) + 2 \cdot (2|1,0,0\rangle + 0 + 0) - 0 - 2|0,2,0\rangle - 0 - 2|0,0,2\rangle - 0 - 0) = \hbar^2(4|1,0,0\rangle - 2|0,2,0\rangle - 2|0,0,2\rangle) \end{aligned}$$

$$\hat{L}^2|0,2,0\rangle = \hbar^2(4|0,2,0\rangle - 2|2,0,0\rangle - 2|0,0,2\rangle)$$

$$\hat{L}^2|0,0,2\rangle = \hbar^2(4|0,0,2\rangle - 2|2,0,0\rangle - 2|0,2,0\rangle)$$

Vidimo torej, da so nekatere lastne funkcije hamiltonke tudi lastne funkcije operatorja kvadrata vrtilne količine $\hat{L}^2|\psi\rangle = l(l+1)\hbar^2|\psi\rangle$, druge pa ne ($|2,0,0\rangle, |0,2,0\rangle$ in $|0,0,2\rangle$). Zato nam ostanejo le še tri lastne funkcije drugega vzbujenega stanja, ki so tudi lastne funkcije kvadrata vrtilne količine ($|1,1,0\rangle, |1,1,1\rangle$ in $|0,1,1\rangle$). Vse kar še moramo narediti je, da si pogledamo, kako zapišemo stanje z dobro določeno vrtilno količino v z smeri z lastnimi funkcijami hamiltonke in operatorja kvadrata vrtilne količine (zanimajo nas samo stanja z $l=2$).

Prej pa še zapišimo operatorje vrtilne količine našega 3-D harmonskega oscilatorja s kreacijskim in anihilacijskim operatorjem (izpeljava ostrega pogleda, ki se lepše bere v nasprotni smeri)

$$\begin{aligned}\hat{L}_z &= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \\ &= -\frac{i\hbar}{2}\left(\frac{xy}{x_0y_0} + \frac{y_0}{x_0}x\frac{\partial}{\partial y} - \frac{x_0}{y_0}y\frac{\partial}{\partial x} - y_0x_0\frac{\partial^2}{\partial x\partial y} - \left(\frac{xy}{x_0y_0} + \frac{x_0}{y_0}y\frac{\partial}{\partial x} - \frac{y_0}{x_0}x\frac{\partial}{\partial y} - y_0x_0\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}\right)\right) = \\ &= -i\hbar\left(\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0} - x_0\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\frac{y}{y_0} + y_0\frac{\partial}{\partial y}\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{y}{y_0} - y_0\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(\frac{x}{x_0} + x_0\frac{\partial}{\partial x}\right)\right) = \\ &= -i\hbar(a_x^+a_y - a_y^+a_x) \\ \hat{L}_y &= -i\hbar(a_z^+a_x - a_x^+a_z) \\ \hat{L}_x &= -i\hbar(a_y^+a_z - a_z^+a_y)\end{aligned}$$

Prej smo omenili, da je drugo vzbujeno lastno stanje z energijo E_2 šestkrat degenerirano. Ko pogledamo, katere od teh lastnih funkcij so tudi lastne funkcije operatorja kvadrata vrtilne količine, ugotovimo, da nam ostanejo le še tri: $|1,1,0\rangle, |1,1,1\rangle$ in $|0,1,1\rangle$. Splošen nastavek za valovno funkcijo drugega vzbujenega stanja, ki je hkrati lastna funkcij H in L^2 je:

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

Iščemo pa taka stanja, ki so hkrati lastna stanja H, L^2 in L_z . Zgornje stanje je že lastna funkcija H in L^2 . Zadostiti moramo še zahtevi: $\hat{L}_z|\psi\rangle = \lambda\psi = \hbar m|\psi\rangle$. Če to enačbo z leve pomnožimo posebej z $\langle 1,1,0|, \langle 1,0,1|$ in $\langle 0,1,1|$ dobimo sistem treh enačb za a, b in c.

$$\begin{bmatrix} \langle 1,1,0|\hat{L}_z|1,1,0\rangle, \langle 1,1,0|\hat{L}_z|1,0,1\rangle, \langle 1,1,0|\hat{L}_z|0,1,1\rangle \\ \langle 1,0,1|\hat{L}_z|1,1,0\rangle, \langle 1,0,1|\hat{L}_z|1,0,1\rangle, \langle 1,0,1|\hat{L}_z|0,1,1\rangle \\ \langle 0,1,1|\hat{L}_z|1,1,0\rangle, \langle 0,1,1|\hat{L}_z|1,0,1\rangle, \langle 0,1,1|\hat{L}_z|0,1,1\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}$$

Sedaj trebamo izračunati matrične elemente, pri tem pa upoštevamo

$$\begin{aligned}\hat{L}_z|1,1,0\rangle &= -i\hbar(a_x^+a_y - a_y^+a_x)|1,1,0\rangle = -i\hbar\sqrt{2}(|2,0,0\rangle - |0,2,0\rangle) \\ \hat{L}_z|1,0,1\rangle &= -i\hbar(a_x^+a_y - a_y^+a_x)|1,0,1\rangle = i\hbar|0,1,1\rangle \\ \hat{L}_z|0,1,1\rangle &= -i\hbar(a_x^+a_y - a_y^+a_x)|0,1,1\rangle = -i\hbar|1,0,1\rangle\end{aligned}$$

ter, da so lastne funkcije med sabo ortogonalne in normirane.

Dobimo:

$$\begin{bmatrix} 0,0,0 \\ 0,0,-i\hbar \\ 0,i\hbar,0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}$$

Iz tega izračunamo lastne vrednosti, ter lastne vektorje:

$$\det \begin{bmatrix} -\lambda, 0, 0 \\ 0, -\lambda, -i\hbar \\ 0, i\hbar, -\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = 0$$

$$-\lambda(\lambda^2 - \hbar^2) = 0, \lambda_1 = 0; \lambda_{2,3} = \pm \hbar; m=0, 1, -1$$

Lastni vektorji, ki pripadajo lastnim vrednostim so

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ i \end{bmatrix}; \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -i \end{bmatrix}$$

Lastne funkcije operatorjev H, L^2 in L_z v bazi n, l, m se izražajo s starimi baznimi funkcijami n_x, n_y, n_z :

$$\begin{aligned}|2,2,0\rangle_{nlm} &= |1,1,0\rangle \\ |2,2,1\rangle_{nlm} &= \frac{1}{\sqrt{2}}|1,0,1\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|0,1,1\rangle \\ |2,2,-1\rangle_{nlm} &= \frac{1}{\sqrt{2}}|1,0,1\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}|0,1,1\rangle\end{aligned}$$

Če je delec v tridimenzionalnem harmonskem oscilatorju v magnetnem polju, moramo k hamiltonianu prišteti še en člen:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}ar^2 - \gamma L_z B_z$$

Razcep v magnetnem polju je odvisen od kvantnega števila m . Ker lahko drugo vzbujeno stanje sestavimo iz stanj z vrednostmi $m=0,1,-1$, se energija drugega vzbujenega stanja v magnetnem polju razcepi v 3 dele. V $|2,2,0\rangle_{nlm}, |2,2,1\rangle_{nlm}, |2,2,-1\rangle_{nlm}$.