Tridimenzionalni harmonski oscilator II

Andrej Grut

14. maj 2008

Naloga

Obravnavaj lastna stanja izotropnega tridimezionalnega harmonskega oscilatorja

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

- 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:

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + \frac{1}{2} a (x^2 + y^2 + z^2)$$

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

S kreacijskim in anihilacijskim operatorjem

$$a_w^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{w}{w_0} - w_0 \frac{\partial}{\partial w}\right)$$

$$a_w = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{w}{w_0} + w_0 \frac{\partial}{\partial w}\right)$$

$$w = x, y, z \qquad w_0 = x_0 = y_0 = z_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}}$$

zapišemo operator hamiltonove funkcije kot:

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

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

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

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 ψ(x,y,z) zapišemo kot produkt lastnih funkcij hamiltonke 1-D harmonskega oscilatorja.

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

$$\hat{H}_x\psi = \eta\,\varsigma\hat{H}_x\xi$$

$$\hat{H}_y\psi = \xi\,\varsigma\hat{H}_y\eta$$

$$\hat{H}_z\psi = \xi\,\eta\,\hat{H}_z\varsigma$$

$$\hat{H}\psi = \eta\,\varsigma\hat{H}_x\xi + \xi\,\varsigma\hat{H}_y\eta + \xi\,\eta\,\hat{H}_z\varsigma = E\xi\,\eta\,\varsigma$$ to enačbo delim z ξ η ζ

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

Lastne energije in funkcije tidimenzionalneg harmonskega oscilatorja zapišemo kot:

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

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

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: $\left|2{,}0{,}0\right\rangle, \left|0{,}2{,}0\right\rangle, \left|0{,}0{,}2\right\rangle, \left|1{,}1{,}0\right\rangle, \left|1{,}0{,}1\right\rangle in \left|0{,}1{,}1\right\rangle$

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

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

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

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

($\hat{n}_x$ 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):

$$[a_w, a_w^+] = 1$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2((a_y^+ a_z - a_z^+ a_y)^2 + (a_z^+ a_x - a_x^+ a_z)^2 + (a_x^+ a_y - a_y^+ a_x)^2$$

$$\hat{L}_z^2 = -\hbar^2(a_x^+ a_x^+ a_y a_y - a_y^+ a_y a_x a_x^+ - a_x^+ a_x a_y a_y^+ + a_y^+ a_y^+ a_x a_x) =$$

$$= -\hbar^2(a_x^+ a_x^+ a_y a_y + a_y^+ a_y^+ a_x a_x - a_y^+ a_y(a_x^+ a_x + 1) - a_x^+ a_x(a_y^+ a_y + 1)) =$$

$$= -\hbar^2(a_x^+ a_x^+ a_y a_y + a_y^+ a_y^+ a_x a_x - n_y(n_x + 1) - n_x(n_y + 1) =$$

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

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

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

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

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):

$$\hat{L}^2|1,0,0\rangle = \hbar^2(2(n_x n_y|1,0,0\rangle + n_x n_z|1,0,0\rangle + n_y n_z|1,0,0\rangle) + 2(n_x|1,0,0\rangle + n_y|1,0,0\rangle + n_z|1,0,0\rangle) -$$

$$- {a_x^+}^2 {a_y}^2|1,0,0\rangle - {a_y^+}^2 {a_x}^2|1,0,0\rangle - {a_x^+}^2 {a_z}^2|1,0,0\rangle - {a_z^+}^2 {a_x}^2|1,0,0\rangle - {a_y^+}^2 {a_z}^2|1,0,0\rangle - {a_z^+}^2 {a_y}^2|1,0,0\rangle) =$$

$$= \hbar^2(2\cdot(0+0+0) + 2\cdot(|1,0,0\rangle + 0 + 0) - 0 - 0 - 0 - 0 - 0 - 0 = 2\hbar^2|1,0,0\rangle = l(l+1)\hbar^2|1,0,0\rangle, l = 1$$

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

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

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

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

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

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

$$\hat{L}^2|2,0,0\rangle = \hbar^2(2(n_x n_y|2,0,0\rangle + n_x n_z|2,0,0\rangle + n_y n_z|2,0,0\rangle) + 2(n_x|2,0,0\rangle + n_y|2,0,0\rangle + n_z|2,0,0\rangle) -$$

$$- {a_x^+}^2 {a_y}^2|2,0,0\rangle - {a_y^+}^2 {a_x}^2|2,0,0\rangle - {a_x^+}^2 {a_z}^2|2,0,0\rangle - {a_z^+}^2 {a_x}^2|2,0,0\rangle - {a_y^+}^2 {a_z}^2|2,0,0\rangle - {a_z^+}^2 {a_y}^2|2,0,0\rangle) =$$

$$= \hbar^2(2\cdot(0+0+0) + 2\cdot(2|1,0,0\rangle + 0 + 0) - 0 - 2|0,2,0\rangle - 0 - 2|0,0,2\rangle - 0 - 0) = \hbar^2(4|1,0,0\rangle - 2|0,2,0\rangle - 2|0,0,2\rangle)$$

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

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

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 funcije 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)

$$\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) =$$

$$= -\frac{i\hbar}{2}\left(\frac{xy}{x_0y_0} + \frac{y_0}{x_0}x\frac{\partial}{\partial y} - \frac{x_0}{y_0}y\frac{\partial}{\partial x} - y_0x_0\frac{\partial^2}{\partial x\partial y} - \left(\frac{xy}{x_0y_0} + \frac{x_0}{y_0}y\frac{\partial}{\partial x} - \frac{y_0}{x_0}x\frac{\partial}{\partial y} - y_0x_0\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}\right)\right) =$$

$$= -i\hbar\left(\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0} - x_0\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\frac{y}{y_0} + y_0\frac{\partial}{\partial y}\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{y}{y_0} - y_0\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(\frac{x}{x_0} + x_0\frac{\partial}{\partial x}\right)\right) =$$

$$= -i\hbar(a_x^+ a_y - a_y^+ a_x)$$

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

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

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.

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

Sedaj trebamo izračunati matrične elemente, pri tem pa upoštevamo

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

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 izrčunamo 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 nlm se izražajo s starimi baznimi funkcijami $n_x n_y n_z$:

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

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 $\left|2,2,0\right\rangle_{nlm}, \left|2,2,1\right\rangle_{nlm}, \left|2,2,-1\right\rangle_{nlm}$.