1 Dvodimenzionalni harmonski oscilator

Imamo Hamiltonian, ki ima optencial podan s spremenljivkama x in y.

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}k_x x^2 + \frac{1}{2}k_y y^2$$

Tokrat je gibalna količina vektor, p^2 pa je vsota kvadratov njegovih komponent, torej

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 = -i\hbar\nabla^2 = -i\hbar\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)$$

Tako lahko tudi Hamiltonian razdelimo na dva dela:

$$H = H_x + H_y = \left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}k_x x^2\right) + \left(\frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}k_y y^2\right)$$

Iščemo rešitve stacionarne Schrödingerjeve enačbe

$$\widehat{H}\psi_n(x,y) = E_n(x,y)$$

Zdaj naredimo separacijo spremenljivk: $\psi(x,y) = \varphi(x)\chi(y)$

$$H_x\varphi_m(x) = E_m^{(x)}\varphi_n(x)$$

$$H_y\chi_n(y) = E_n^{(y)}\chi_n(y)$$

Ali drugače:

$$H\varphi_m(x)\chi_n(y) = (E_m^{(x)} + E_n^{(y)})\varphi_m(x)\chi_n(y)$$

V Diracovem zapisu:

$$H\left|m\right\rangle_x\left|n\right\rangle_y = (E_m^{(x)} + E_n^{(y)})\left|m\right\rangle_x\left|n\right\rangle_y$$

Označimo $\left|mn\right\rangle = \left|m\right\rangle_x\left|n\right\rangle_y$ (gre v bistvu za indedksiranje po matriki).

$$H\left|mn\right\rangle = (E_m^{(x)} + E_n^{(y)})\left|mn\right\rangle$$

Ker v eni dimenziji poznamo rešitev LHO:

$$H_x\left|m\right\rangle_x = \hbar\omega_x\left(m + \frac{1}{2}\right)\left|m\right\rangle_x, \qquad \omega_x = \sqrt{\frac{k_x}{m}}$$

$$H_y\left|n\right\rangle_y = \hbar\omega_y\left(n + \frac{1}{2}\right)\left|n\right\rangle_y, \qquad \omega_y = \sqrt{\frac{k_y}{m}}$$

Tako je celotna lastna energija harmonskega oscilatorja enaka

$$H\left|mn\right\rangle = \left[\hbar\omega_x\left(m + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y\left(n + \frac{1}{2}\right)\right]\left|mn\right\rangle$$

1.1 "Enosmerni" harmonski oscilator

Predpostavili smo, da sta k_x in k_y oba večja od 0, sicer sta verdnosti ω_x in ω_y imaginarni. Če je $k_x = 0$ ali $k_y = 0$, pa dobimo v tisti smeri Hamiltomian

$$H_i = \frac{p_i}{2m},$$

katerega rešitve so ravni valovi. V tem primeru dobimo, npr. za $k_y = 0$:

$$H\left|m_x\, q_y\right\rangle = \left[\hbar\omega_x\left(m + \frac{1}{2}\right) = \frac{\hbar^2 q_y^2}{2m}\right]\left|m_x\, q_y\right\rangle$$

1.2 Izotropni harmonski oscilator

Drugi zanimiv primer je izotropni harmonski oscilator, pri katerem je $k_x = k_y = k$.

$$H\left|n_x n_y\right\rangle = \hbar\omega\left(n_x + n_y + 1\right)\left|n_x n_y\right\rangle$$

Opazimo, da ima prvo vzbujeno stanje dve možni lastni funkciji, in sicer $|0,\,1\rangle$ in $|1,\,0\rangle$, torej pride do degeneracije. Pokažimo, da ti stanji tvorita bazo vseh funkcij z energijo $2\hbar\omega$.

$$H(\alpha\left|0,\,1\right\rangle + \beta\left|1,\,0\right\rangle) = \alpha H\left|0,\,1\right\rangle + \beta H\left|1,\,0\right\rangle = 2\hbar\omega\left(\alpha\left|0,\,1\right\rangle + \beta\left|1,\,0\right\rangle\right)$$

Sledi, da je linearna kombinacija teh lastnih funkcij tudi lastna funkcija z isto energijo.

Če zapišemo Schrödingerjevo enačbo za dvodimenzionalni izotropni LHO, opazimo, da jo lahko zapišemo v polarnih koordinatah:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}k(x^2 + y^2) = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

Tak operator komutira z operatorjem z-komponente vrtilne količine L_z, zapisanega kot

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

$$[H, L_z] = 0$$

Ker operatorja komutirata, lahko poiščemo lastne funkcije za oba hkrati, in sicer so lastne funkcije L_z linearne kombinacije lastnih funkcij H. Poglejmo si to na primeru prvega vzbujenega stanja, ki je dvakrat degenerirano.

$$L_z\left|\psi\right\rangle = \lambda\left|\psi\right\rangle$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\left|\psi\right\rangle = \lambda\left|\psi\right\rangle$$

To rešujemo kot diferencialno enačbo prvega reda.

$$\psi(\varphi) = C\,e^{i\frac{\lambda}{\hbar}\varphi}$$

Robni pogoj je periodičnost s periodo 2π, torej mora veljati

$$\frac{\lambda}{\hbar} = m, \quad m \in \mathbb{Z}$$

Iz normalizacije pa dobimo zahtevo za C:

$$\int_0^{2\pi} |\psi(x)|^2\,\mathrm{d}\varphi = 2\pi C^2 = 1$$

$$\psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}, \quad m \in \mathbb{Z}$$

Zdaj obravnavamo linearno kombinacijo ψ_{01} in ψ_{10}:

$$\psi(x, y) = \alpha\psi_{01}(x, y) = \beta\psi_{10}(x, y)$$

Zapišemo ločeno:

$$\psi_{01}(x, y) = \psi_0(x)\psi_1(y)$$

$$\psi_{10}(x, y) = \psi_1(x)\psi_0(y)$$

ψ_0 je ravni val:

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

Iščemo še ψ_1. Vemo:

$$a^+\left|0\right\rangle = \left|1\right\rangle$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} - i\frac{p_x}{p_0}\right)\psi_0(x) = \psi_1(x)$$

Pri čemer je

$$p_x = -i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \qquad p_0 = \frac{\hbar}{x_0}$$

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi x_0^2}} \left(\frac{x}{x_0}\, e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} - i\frac{x_0}{\hbar} \left(-i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\, e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} \right) \right)$$

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

Zdaj zelo lahko dobimo ψ_{01} in ψ_{10}:

$$\psi_{01} = \sqrt{\frac{2}{\pi y_0^2}}\frac{y}{y_0}\, e^{-\frac{1}{y_0^2}(x^2+y^2)}$$

$$\psi_{10} = \sqrt{\frac{2}{\pi x_0^2}}\frac{x}{x_0}\, e^{-\frac{1}{x_0^2}(x^2+y^2)}$$

V polarnih koordinatah to izrazimo kot produkt radialne funkcije in kotne funkcije:

$$\psi_{10} = \sqrt{\frac{2}{\pi x_0^2}}\frac{r\cos\varphi}{x_0}\, \exp\left(-\frac{r^2}{2x_0^2}\right) = \cos\varphi\, f(r)$$

$$\psi_{01} = \sqrt{\frac{2}{\pi y_0^2}}\frac{r\sin\varphi}{y_0}\, \exp\left(-\frac{r^2}{2y_0^2}\right) = \sin\varphi\, f(r)$$

Zdaj se vrnimo na prejšnjo zahtevo:

$$\psi(\varphi) = e^{-im\varphi}, \qquad m \in \mathbb{Z}$$

Zaradi Eulerjeve formule lahko izrazimo

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

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

Drugačen postopek iskanja lastnih funkcij bi bil, da stvar zapišemo kot sistem linearnih enačb:

$$|\psi\rangle = \alpha\, |0,\, 1\rangle + \beta\, |1,\, 0\rangle$$

$$L_z\, |\psi\rangle = \lambda\, |\psi\rangle$$

$$\alpha L_z\, |1,\, 0\rangle + \beta L_z\, |0,\, 1\rangle = \lambda\left(\alpha\, |1,\, 0\rangle + \beta\, |0,\, 1\rangle\right)$$

Enačbo najprej pomnožimo z $\langle 1,\, 0|$, da dobimo prvo enačbo, nato pa z $\langle 0,\, 1|$, da dobimo drugo enačbo:

$$\langle 1,\, 0|\, \alpha L_z\, |1,\, 0\rangle + \langle 1,\, 0|\, \beta L_z\, |0,\, 1\rangle = \lambda\alpha \tag{1}$$

$$\langle 0,\, 1|\, \alpha L_z\, |1,\, 0\rangle + \langle 0,\, 1|\, \beta L_z\, |0,\, 1\rangle = \lambda\beta \tag{2}$$

Če enačbo prepišemo v matrični obliki, gre za problem lastnih vrednosti

$$\begin{bmatrix} \langle 1,\, 0|\, L_z\, |1,\, 0\rangle & \langle 1,\, 0|\, L_z\, |0,\, 1\rangle \\ \langle 0,\, 1|\, L_z\, |1,\, 0\rangle & \langle 0,\, 1|\, L_z\, |0,\, 1\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$$

Matrične elemente izračunamo tako, da L_z zapišemo z a in $a^\dagger$:

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

Po zgledu enodimenzionalnega LHO zapišemo:

$$x = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\left(a_x + a_x^\dagger\right) \qquad y = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\left(a_y + a_y^\dagger\right)$$

$$p_x = \frac{p_0}{i\sqrt{2}}\left(a_x - a_x^\dagger\right) \qquad p_y = \frac{p_0}{i\sqrt{2}}\left(a_y - a_y^\dagger\right)$$

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \qquad p_0 = \frac{\hbar}{x_0}$$

Iz lastnosti parcialnih odvodov, da je

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right) = \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right),$$

sledi:

$$[a_x,\, a_y] = [a_x,\, a_y^\dagger] = [a_x^\dagger,\, a_y] = [a_x^\dagger,\, a_y^\dagger] = 0$$

To nam koristi, ko sestavimo L_z: veliko členov se namreč med seboj odšteje.

$$L_z = xp_y - yp_x = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\frac{p_0}{\sqrt{2}i}\left(a_x + a_x^\dagger\right)\left(a_y - a_y^\dagger\right) - \frac{x_0}{\sqrt{2}}\frac{p_0}{\sqrt{2}i}\left(a_y + a_y^\dagger\right)\left(a_x - a_x^\dagger\right) =$$

$$= \frac{\hbar}{2i}\left[\left(a_xa_y - a_xa_y^\dagger + a_x^\dagger a_y - a_x^\dagger a_y^\dagger\right) - \left(a_ya_x - a_ya_x^\dagger + a_y^\dagger a_x - a_y^\dagger a_x^\dagger\right)\right] =$$

$$= \frac{\hbar}{2i}\left[(a_xa_y - a_ya_x) + \left(-a_xa_y^\dagger - a_y^\dagger a_x\right) + \left(a_x^\dagger a_y + a_ya_x^\dagger\right) - \left(-a_x^\dagger a_y^\dagger + a_y^\dagger a_x^\dagger\right)\right] =$$

$$= \frac{\hbar}{2i}\left[-2a_xa_y^\dagger + 2a_x^\dagger a_y\right] = \frac{\hbar}{i}\left(a_x^\dagger a_y - a_xa_y^\dagger\right)$$

Zdaj lahko izračunamo matrične elemente:

$$a_x^\dagger a_y \left|1,\, 0\right\rangle = a_x^\dagger a_y \left|1\right\rangle_x \left|0\right\rangle_y = \left(a_x^\dagger \left|1\right\rangle_x\right)\left(a_y^\dagger \left|0\right\rangle\right)$$

Vemo, da je $a^\dagger \left|n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle$ in $a\left|0\right\rangle = 0$, torej dobimo:

$$a_x^\dagger a_y \left|1,\, 0\right\rangle = \sqrt{2}\left|2\right\rangle \cdot 0 = 0$$

Ker je

$$a_xa_y^\dagger \left|1,\, 0\right\rangle = \left|0,\, 1\right\rangle,$$

je prvi element matrike:

$$\left\langle 1,\, 0\right| L_z \left|1,\, 0\right\rangle = \frac{\hbar}{i}\left\langle 1,\, 0\right| \left(a_x^\dagger a_y - a_xa_y^\dagger\right)\left|1,\, 0\right\rangle =$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left\langle 1,\, 0\right| \left(0 - \left|0,\, 1\right\rangle\right) = -\frac{\hbar}{i}\left\langle 1,\, 0\,\middle|\, 0,\, 1\right\rangle = 0$$

zaradi ortogonalnosti. Podobno naredimo za ostale kombinacije:

$$\left\langle 0,\, 1\right| L_z \left|1,\, 0\right\rangle = -\frac{\hbar}{i}\left\langle 0,\, 1\,\middle|\, 0,\, 1\right\rangle = i\hbar$$

$$\left\langle 1,\, 0\right| L_z \left|0,\, 1\right\rangle = \frac{\hbar}{i}\left\langle 1,\, 0\,\middle|\, 1,\, 0\right\rangle = -i\hbar$$

$$\left\langle 0,\, 1\right| L_z \left|0,\, 1\right\rangle = \frac{\hbar}{i}\left\langle 0,\, 1\,\middle|\, 1,\, 0\right\rangle = 0$$

Naš problem diagonaliozacije postane

$$\begin{bmatrix} 0 & i\hbar \\ -i\hbar & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \lambda\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$$

$$\det\begin{bmatrix} -\lambda & i\hbar \\ -i\hbar & -\lambda \end{bmatrix} = \lambda^2 - \hbar^2 = 0$$

Sledi $\lambda = \pm\hbar$. Za lastni vektor dobimo zahtevo $\alpha = \pm i\beta$, nato pa upoštevamo normalizacijo $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ in dobimo:

$$\lambda = \hbar: \; v_1 = \left(-\frac{i}{\sqrt{2}}, \; \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \qquad \lambda = -\hbar: \; v_2 = \left(\frac{i}{\sqrt{2}}, \; \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$$

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

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

Dobili smo enak rezultat kot prej, ki pa je zamaknjen za fazo $-i$. Rezultat je torej matematično drugačen, fizikalno pa ta fazni zamik ne vpliva na nobeno merljivo količino.