Oscilador Harmônico 2D

Mônica A Caracanhas
23/11/20

4. Ache as autofunções e autovalores de um oscilador harmônico em duas dimensões, cuja energia potencial é dada por

$$V(x,y) = \frac{1}{2}k(x^2+y^2)\ .$$

Expresse o resultado em termos das funções de onda ϕ_n do oscilador unidimensional. Discuta a degenerescência de cada nível de energia.

Potencial do oscilador harmônico 2D (isotrópico)

$$V(x,y) = \tfrac{1}{2}\mu\omega^2 \ \left(x^2+y^2\right) \qquad \omega = \sqrt{k/\mu}$$

Equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}\right)+\frac{1}{2}\mu\ w^2\left(x^2+y^2\right)\psi(x,y) = E\ \psi(x,y)$$

Usamos a técnica de separação de variáveis para resolver a equação diferencial parcial

$$\psi(x,y) = X(x)\,Y(y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(Y\,\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + X\,\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{2}\mu\,w^2\,\left(x^2+y^2\right)\,XY\;=E\,X\,Y$$

Podemos dividir ambos os lados por **X**(**x**) **Y** (**y**) e agrupar os termos com dependência em x e y

$$\left(-\frac{1}{X}\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\mu\,w^2\,x^2\right)_1 + \left(-\frac{1}{Y}\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{1}{2}\mu\,w^2\,y^2\right)_2 = E$$

$$(\;)_1 = E_x \qquad (\;)_2 = E_y \qquad\qquad E_x + E_y = E$$

Teremos duas equações diferenciais (OH 1D)

Espectro de energia

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2X}{dx^2}+\frac{1}{2}\mu\, w^2\, x^2\, X(x) = E_x\, X(x) \quad \Rightarrow \quad E_x = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\, \hbar\omega$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2Y}{dy^2}+\frac{1}{2}\mu\, w^2\, y^2\, Y(Y) = E_y\, Y(x) \quad \Rightarrow \quad E_y = \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\, \hbar\omega$$

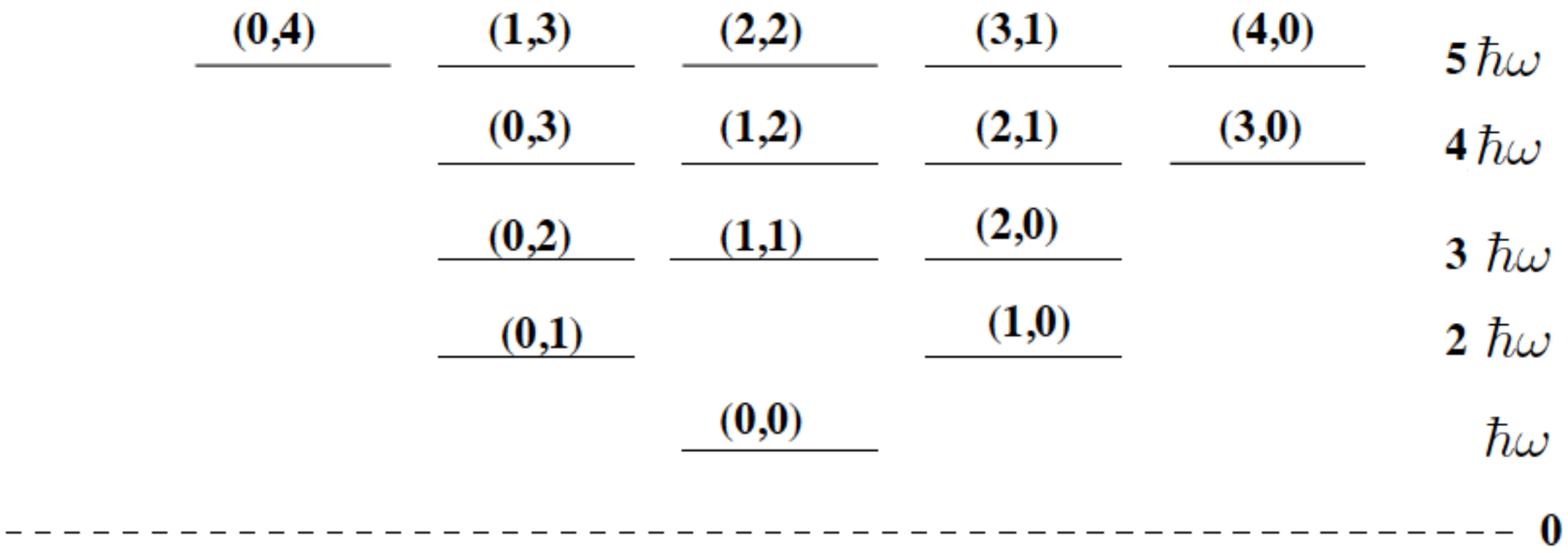
Energia total:

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

$$n_x, n_y \in 0, 1, 2, ..$$

Podemos escrever para o espectro de energia

$$E = (n+1)\ \hbar\omega \qquad n \in 0, 1, 2....$$



Degenerescência do nível **n** é igual a **n+1**

Soluções para **X**(**x**) **Y** (**y**) (funções de onda do problema OH 1D)

$$X_{n_x}(x) = \mathcal{N}_{n_x}\ H_{n_x}(\xi)\ \exp\left(-\xi^2/2\right) \qquad \xi = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\ x$$

$$Y_{n_y}(y) = \mathcal{N}_{n_y}\ H_{n_y}(\eta)\ \exp\left(-\eta^2/2\right) \qquad \eta = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\ y$$

Função de onda solução: $\psi_{nx,ny}(x,y) = X_{nx}(x)\, Y_{ny}(y)$

$$\psi_{nx,ny}(\xi,\eta) = \mathcal{N}\ H_{n_x}(\xi)\ \exp\left(-\xi^2/2\right) \times H_{n_y}(\eta)\ \exp\left(-\eta^2/2\right)$$

Utilizando os polinômios de Hermite

$H_o = 1$	$H_3 = 8\,\xi^3 - 12\,\xi$
$H_1 = 2\,\xi$	$H_4 = 16\,\xi^4 - 48\,\xi^2 + 12$
$H_2 = 4\,\xi^2 - 2$	$H_5 = 32\,\xi^5 - 160\,\xi^3 + 120\,\xi$

$$\psi_{nx,ny}(\xi,\eta) = \mathcal{N}\; H_{n_x}(\xi)\;\exp\left(-\xi^2/2\right) \;\times H_{n_y}(\eta)\;\exp\left(-\eta^2/2\right)$$

coordenadas cartesianas coordenadas polares

(n_x, n_y)	E	ψ	ψ
(0,0)	$\hbar\omega$	$\exp\left(-\gamma\rho^2/2\right)$	$\exp\left(-\gamma\rho^2/2\right)$
(1,0)	$2\hbar\omega$	$x\;\exp\left(-\gamma\rho^2/2\right)$	$\rho\;\cos\phi\;\exp\left(-\gamma\rho^2/2\right)$
(0,1)	$2\hbar\omega$	$y\;\exp\left(-\gamma\rho^2/2\right)$	$\rho\;\sin\phi\;\exp\left(-\gamma\rho^2/2\right)$
(1,1)	$3\hbar\omega$	$x\,y\;\exp\left(-\gamma\rho^2/2\right)$	$\rho^2\;\cos\phi\sin\phi\exp\left(-\gamma\rho^2/2\right)$
(2,0)	$3\hbar\omega$	$\left(2\,\gamma\,x^2 - 1\right)\;\exp\left(-\gamma\rho^2/2\right)$	$\left(2\gamma\rho^2\;\cos^2\phi - 1\right)\;\exp\left(-\gamma\rho^2/2\right)$
(0,2)	$3\hbar\omega$	$\left(2\,\gamma\,y^2 - 1\right)\;\exp\left(-\gamma\rho^2/2\right)$	$\left(2\gamma\rho^2\;\sin^2\phi - 1\right)\;\exp\left(-\gamma\rho^2/2\right)$

$$x = \rho\cos\phi$$

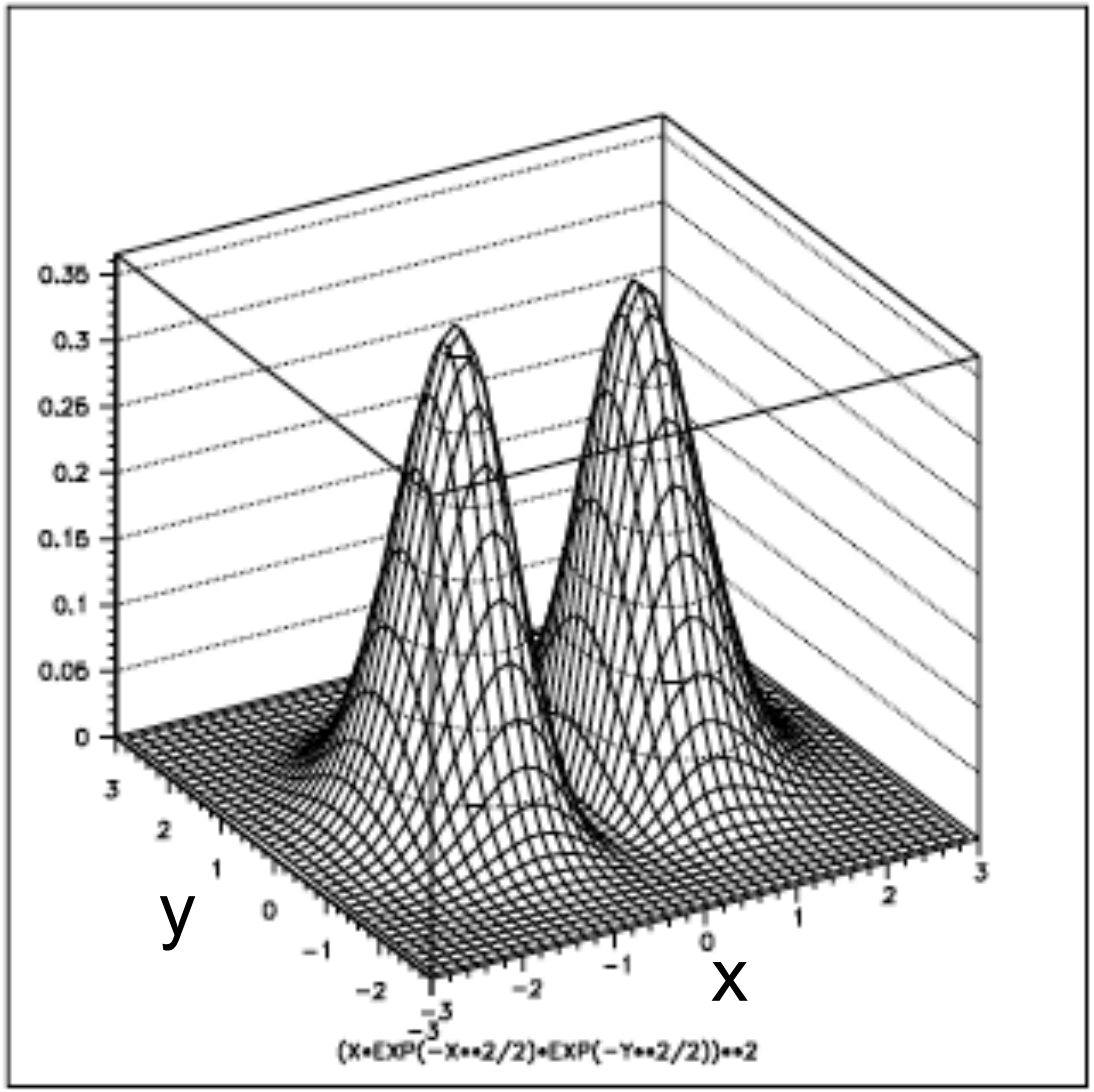
$$y = \rho\sin\phi.$$

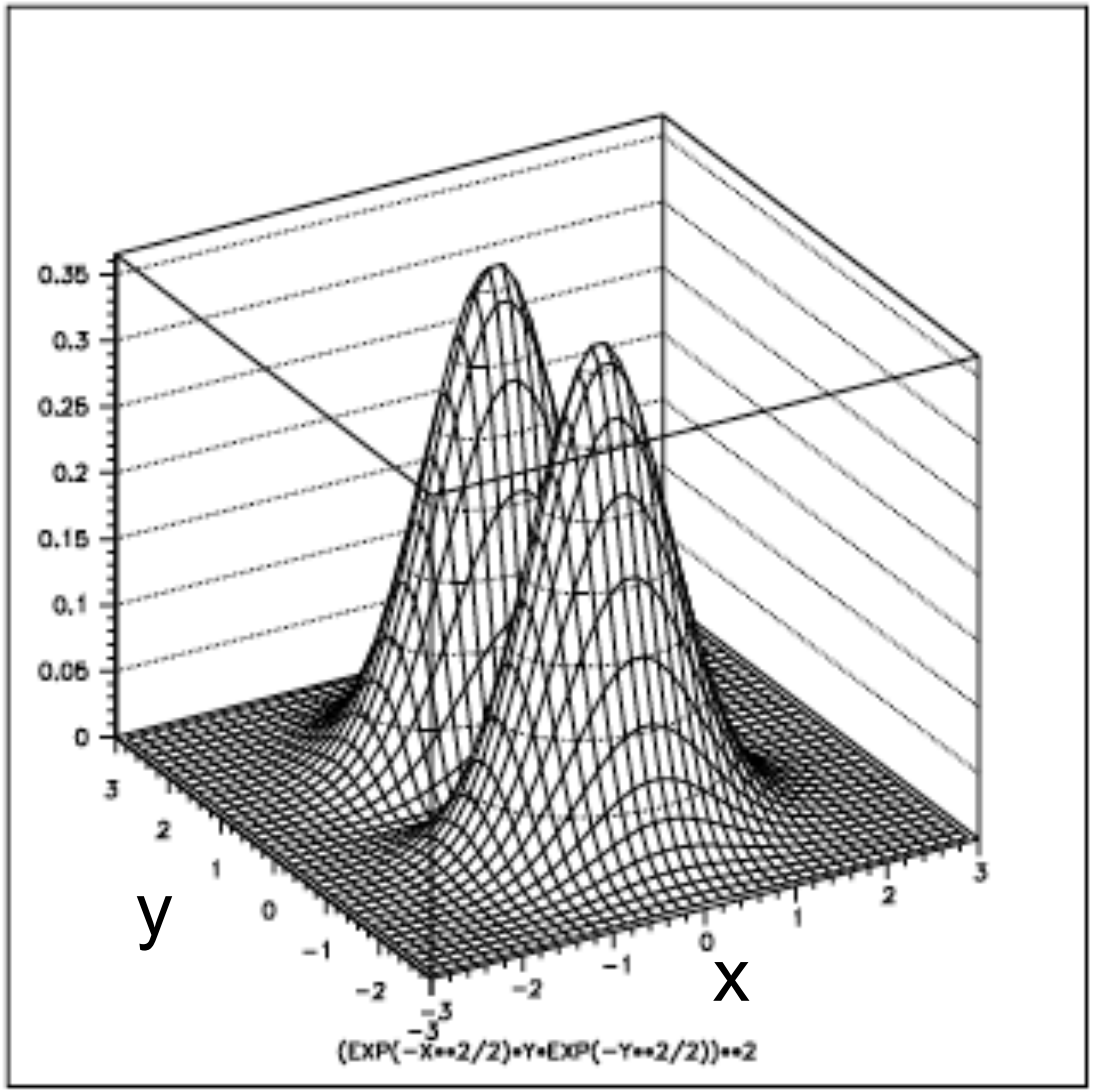
$$\gamma = \frac{\mu\omega}{\hbar}$$

$$\xi = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\;\;x$$

$$\eta = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\;\;y$$

Perfil da função de onda dos estados degenerados $\psi_{1,0}(x,y)$ e $\psi_{0,1}(x,y)$:





$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$$

$$\phi = \tan^{-1}(y/x)$$

$$V = \frac{1}{2}\mu\omega^2 \ (x^2 + y^2) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 \ \rho^2$$

Vemos que o potencial não apresenta dependência em **ϕ**, sendo apenas função de ρ

Dado que o potencial tem simetria axial, temos que os estados degenerados $\psi_{1,0}(x, y)$ e $\psi_{0,1}(x, y)$ quebram essa simetria (orientação dos nodos ao longo dos eixos y e x, respectivamente).

A combinação linear desses auto-estados degenerados também será um estado estacionário do Hamiltoniano com energia $2\hbar\boldsymbol{\omega}$.

$$\psi_{\pm} = \psi_{1,0} \pm i\,\psi_{0,1}$$

Simetria axial!

Considerando combinação linear:

$$\psi_{1,0}(x,y) = x \exp\left(-\gamma\rho^2/2\right)$$
$$\psi_{0,1}(x,y) = y \exp\left(-\gamma\rho^2/2\right)$$

$$\psi_{\pm} = \psi_{1,0} \pm i\,\psi_{0,1}$$

$$\psi_+ \propto \mathcal{N}\,(x+iy)\,e^{-\gamma\left(x^2+y^2\right)/2} \quad , \quad \psi_- \propto (x-iy)\,e^{-\gamma\left(x^2+y^2\right)/2}$$

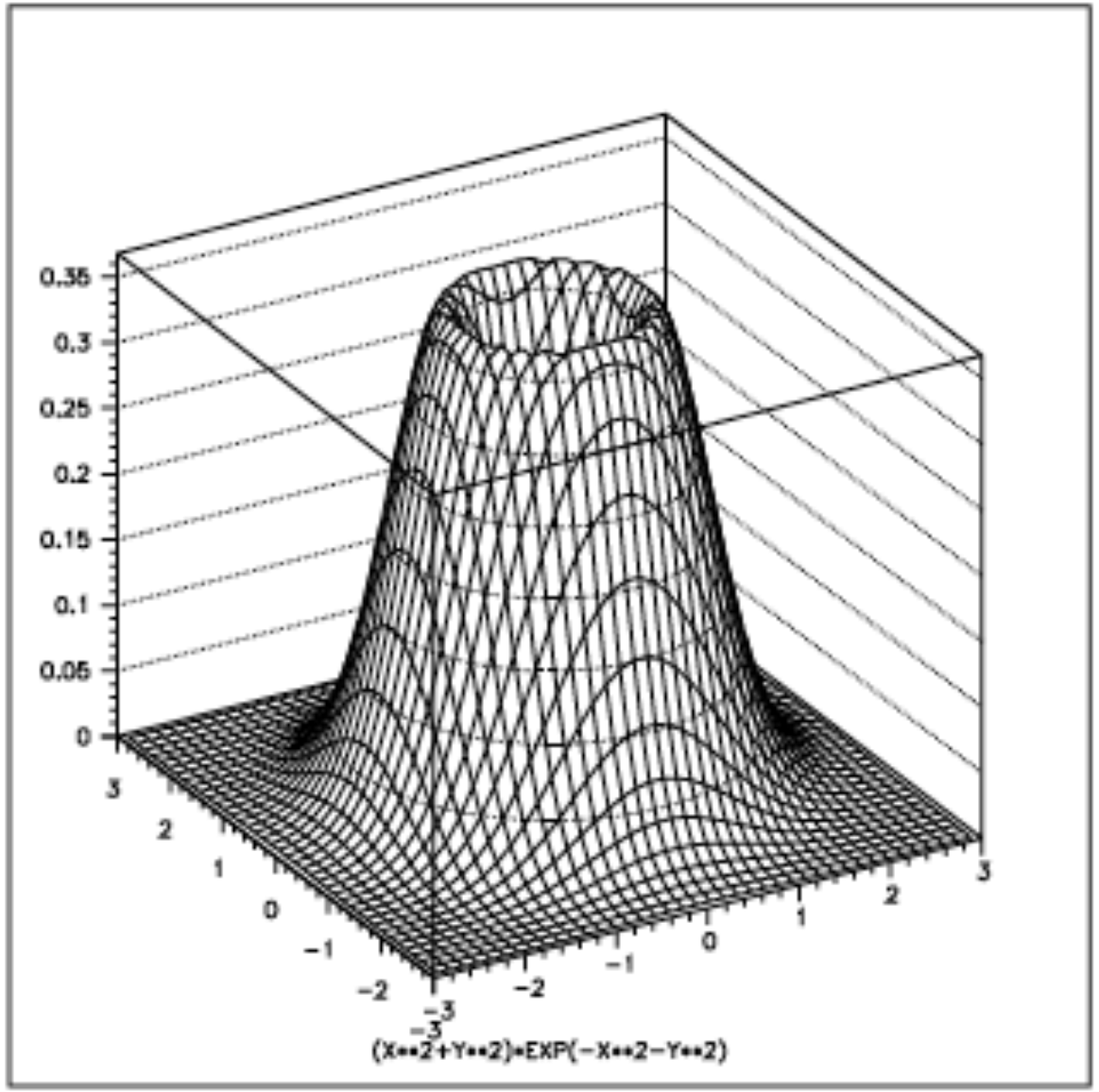
Podemos reescrever esses autoestados em termos de coordenadas polares

$$x \pm iy = \rho(\cos\phi \pm i\sin\phi) = e^{\pm i\phi}\,\rho$$

$$\psi_{\pm}(\rho,\phi) = \mathcal{N}\rho\,e^{-\gamma\rho^2/2}\,e^{\pm i\phi}$$

A dependência azimuthal (**ϕ**) só afeta a fase da função de onda.
Estado estacionário complexo com fase dependente da posição

Módulo quadrado $|\boldsymbol{\psi} \pm|^2$ que é apenas função de $\boldsymbol{\rho}$ ➡ Simetria axial!



$$\psi_{\pm}(\rho, \phi) = \mathcal{N} \rho \, e^{-\gamma \rho^2/2} \, e^{\pm i \phi}$$

Função de onda carrega corrente de densidade de probabilidade que circula ao longo da direção $\hat{\boldsymbol{\phi}}$.

⬇

Temos um momento angular associado a esse estado, nesse caso na direção $\hat{z}$

Operador momento Angular:

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

Podemos converter esse operador para forma polar

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \rho}{\partial x}\,\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial \phi}{\partial x}\,\frac{\partial}{\partial \phi} \quad , \quad \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial \rho}{\partial y}\,\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial \phi}{\partial y}\,\frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2} \quad , \quad \phi = \tan^{-1}(y/x)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial x} = \frac{x}{\rho} \quad , \quad \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{-\sin^2\phi}{y}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial y} = \frac{y}{\rho} \quad , \quad \frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\cos^2\phi}{x}$$

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

Operador momento Angular:

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

Auto-Estado com simetria axial:

$$\psi_\pm(\rho,\phi) = \mathcal{N}\rho\; e^{-\gamma\rho^2/2}\; e^{\pm i\phi}$$

$$\frac{\hbar}{i}\;\frac{\partial}{\partial \varphi}\psi_\pm = L_z\;\psi_\pm$$

As funções de onda $\psi_\pm$ são auto-estados do operador $\hat{L}_Z$ com autovalor $L_z = \pm\hbar$

- As funções originais $\psi_{1,0}$ e $\psi_{0,1}$ eram funções de onda puramente reais com densidade de corrente zero, e que quebravam a simetria do potencial.

- Construímos funções de onda alternativas com esses estados degenerados, as quais exibiram simetria axial.

$$\psi_{\pm} = \psi_{1,0} \pm i\,\psi_{0,1}$$

- Fase complexa da função de onda dependente da posição representa fluxo de corrente de probabilidade no sentido horário (-) ou anti-horário (+).

$$\psi_{\pm}(\rho,\phi) = \mathcal{N}\rho\, e^{-\gamma\rho^2/2}\, e^{\pm i\phi}$$

- As funções de onda $\psi_{\pm}$ são auto-estados do operador $\hat{L}_Z$ com autovalor $L_z = \pm\hbar$

Cada uma das funções de onda originais $\psi_{1,0}$ e $\psi_{0,1}$ pode, por sua vez, ser escrita como combinações lineares de $\psi_{\pm}$, com igual probabilidade de estar em qualquer um dos estados. Isso significa que a medida de $\hat{L}_z$ em $\psi_{1,0}$ ou $\psi_{0,1}$, metade das vezes resultará no valor $L_z = \hbar$, e metade das vezes o valor da medida resultará em $L_z = -\hbar$.

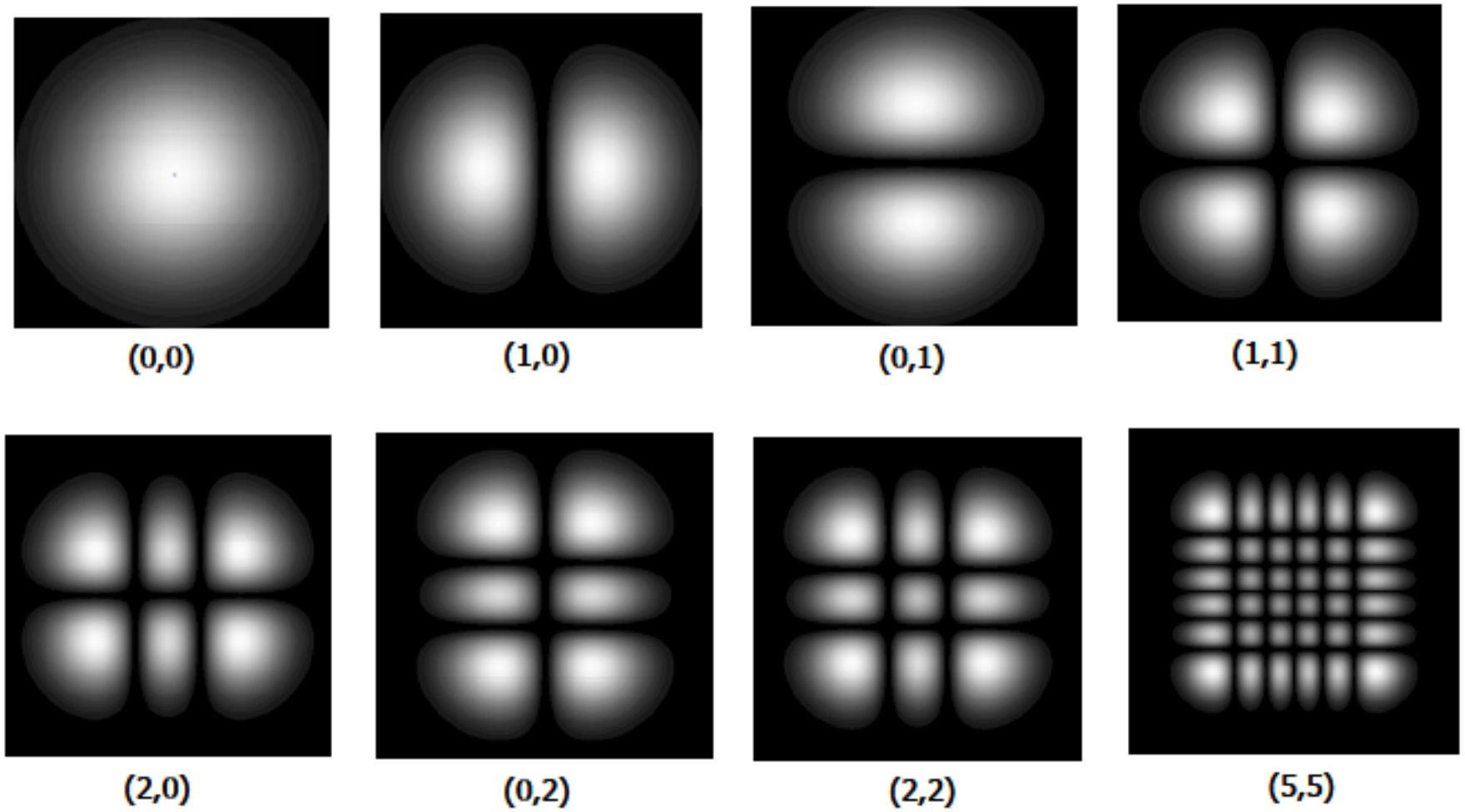
Referência

Quantum Mechanics vol 1- by Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Frank Laloe.

- Complemento E**v:**

"*The isotropic three-dimensional harmonic oscillator*"

Eigenstates of the 2D Isotropic Harmonic Oscillator



Probability density patterns of eigenstates for the 2D isotropic harmonic oscillator