



Faculteit Wetenschappen  
Departement Fysica

Academiejaar 2012 - 2013

# Waterstofatoom in $N$ dimensies

Auteur: Keustermans William  
Promotor: Prof. Dr. F. Peeters

THEORETISCH GEDEELTE VAN HET PROEFSCHRIFT  
INGEDIEND TOT HET BEHALEN VAN DE GRAAD  
BACHELOR IN DE FYSICA



# Dankwoord

Sinds dit jaar telt zowel de theoretische als de experimentele bachelorproef voor 6 studiepunten. Voor studenten die nog niet zeker zijn in welk vakgebied ze willen verdergaan is dit een belangrijk moment. Ze kunnen zo aan de lijven ondervinden wat hen het beste ligt. Voor mij was dit niet anders, ik zag deze thesissen als de proef op de som. Toen ons de keuzemogelijkheden werden voorgesteld, spraken de theoretische onderwerpen mij echter niet direct aan. Daarom stelde ik de vraag aan prof. Peeters of het mogelijk was een onderwerp te kiezen onder zijn begeleiding. Tot mijn grote dank was dit geen enkel probleem, en niet veel later kon ik van start gaan.

Zoals in elke thesis zijn er van die momenten dat het even moeilijk wordt en dat de vragen zich opstapelen. Ook op deze momenten kon ik altijd terecht bij prof. Peeters en stond hij me met raad en daad bij. Daarom zou ik van deze sectie willen gebruik maken om hem te bedanken voor de kans die ik gekregen heb en de hulp die hij geboden heeft.

Ook mijn naaste medestudenten wil ik bedanken. Hun programmeerkennis strekt ver boven de mijne uit, en zonder twijfel hadden bepaalde delen van deze thesis meer tijd in beslag genomen zonder handige tips of uitleg van hen.

Bedankt.

# Abstract

The wavefunctions and energy-eigenvalues of the N-dimensional hydrogen atom are calculated analytically. In the 2D and 3D case methods like separation of variables and Frobenius method are used. In one dimension, a modified potential has been used, so that for  $x$  is zero the divergence doesn't occur. The 1D equation has been rewritten in Whittaker's form of the confluent hypergeometric equation. The solutions of this equation are well known, so that the solution of the problem can be expressed in them. Comparison of the different results have been made. The 2D electron in groundstate has a higher negative energy than in the 3D case, so that its more strongly bound to the nucleus. The maximum of the radial probability function has also shifted towards the nucleus. Trough the modification of the 1D potential, the energyspectra of 1D and 3D atom are the same. Last, an attempt has been made to calculate the energy-eigenvalues of a system where surface-electrons interact with a bulk of liquid helium. These electrons polarize the medium, so that an interesting potential arises.

# Inhoudsopgave

1	<b>Inleiding</b> . . . . .	5
2	<b>Het driedimensionaal waterstofatoom</b> . . . . .	6
	2.1 Het ééndeeltje probleem . . . . .	6
	2.2 Scheiden van veranderlijken . . . . .	8
	2.3 Hoekafhankelijk gedeelte . . . . .	9
	2.4 Het radiaal deel . . . . .	13
	2.5 Energiespectrum, golffuncties en waarschijnlijkheden . . . . .	16
3	<b>Het tweedimensionaal waterstofatoom</b> . . . . .	22
	3.1 Scheiden van veranderlijken . . . . .	22
	3.2 Het $\phi$ -gedeelte . . . . .	23
	3.3 Het radiaal deel . . . . .	23
	3.4 Golffuncties en het energiespectrum . . . . .	25
4	<b>Het ééndimensionaal waterstofatoom</b> . . . . .	27
	4.1 Oplossingsmethode . . . . .	27
	4.2 Energiespectrum en golffuncties . . . . .	28
5	<b>Oplossingen vergelijken en bespreken</b> . . . . .	30
6	<b>Elektronen op een bulk vloeibaar helium</b> . . . . .	31
	6.1 Uitwerking . . . . .	32
	6.2 Resultaten . . . . .	33
7	<b>Besluit</b> . . . . .	34

# 1 Inleiding

Het waterstofatoom is structureel het meeste eenvoudige atoom. Een negatief geladen elektron gebonden aan een positief geladen kern. Doorheen de geschiedenis is de kennis inzake dit atoom altijd maar gegroeid. Startend van het klassieke beeld van een elektron dat een wel gekende baan rond de kern doorloopt, tot uiteindelijk de fijnstructuur en de hyperfijnstructuur. Deze kwantummechanische beschrijvingen van het waterstofatoom vereisen kennis van zowel relativiteit (spin-baan koppeling), alsook kennis van de interactie van de kern zijn magnetisch en elektrisch moment met de velden die heersen in het atoom. De behandeling waarbij elektronen beschouwd worden als spinloze puntdeeltjes die elektrostatich interageren met de kern, is gekend als de 'Gross structure'. Dit is dus, letterlijk vertaald, de ruwe beschrijving. Niet te min is het doorlopen van deze beschrijving, en de wiskundige methoden en functies die hierbij onmisbaar zijn, een zeer leerzaam proces. Het doorvoeren van een coördinatentransformatie waar op de gereduceerde massa wordt overgegaan, zal het oorspronkelijke twee-deeltjesprobleem reduceren tot een exact oplosbaar één-deeltjesprobleem. Het oplossen van dit 'relatieve' probleem geeft als resultaat de golffuncties, waarschijnlijkheidsdichtheden en het energiespectrum van het gebonden elektron. Meer concreet, zal telkens gebruik worden gemaakt van de symmetrie van het relatieve probleem. Hierna zal dit worden opgesplitst in deelproblemen door het toepassen van scheiding van veranderlijken. De oplossingen van die deelproblemen worden nadien samengebracht en vormen de gezochte oplossing. Het tweedimensionaal en ééndimensionaal equivalent van het waterstofatoom wordt door middel van zeer soortgelijke technieken onderzocht en de respectievelijke resultaten met elkaar vergeleken. Als laatste wordt de opstelling waar elektronen geplaatst zijn op een bulk vloeibaar helium bekeken. In deze situatie ontstaat zowel een attractieve als repulsieve kracht op de elektronen. De ene is respectievelijk het gevolg van het feit dat de elektronen het medium polariseren, terwijl de andere volgt uit het Pauli exclusieprincipe. Bij de beschrijving van dit systeem, en het uiteindelijk oplossen ervan, zal blijken dat dit sterke gelijkenissen vertoond met het ééndimensionaal waterstofatoom.

## 2 Het driedimensionaal waterstofatoom

### 2.1 Het ééndeeltjesprobleem

Bij de uitwerking van dit probleem werd als leidraad [4] en [5] gebruikt.

De totale energie van het waterstofatoom wordt gegeven door zijn Hamiltoniaan. Hier geeft de eerste term de kinetische energie en de tweede term de potentiele energie weer. Deze tweede hangt enkel af van de absolute waarde van de afstand tussen het elektron en proton.

$$\begin{aligned} H &= T + V \\ &= \frac{p_p^2}{2m_p} + \frac{p_e^2}{2m_e} + V(|\vec{r}_p - \vec{r}_e|) \end{aligned} \quad (2.1)$$

Het vinden van de eigentoestanden en de respectievelijke eigenwaarden komt neer op het oplossen van de vergelijking  $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ . Een slimme keuze van het coördinatenstelsel maakt het probleem eenvoudiger want hierdoor wordt het tweedeeltjesprobleem herleid tot een één-elektronprobleem. Men definieert de relatieve plaatsvector  $\vec{r}$  en de plaatsvector van het massamiddelpunt  $\vec{R}$ :

$$\begin{aligned} \vec{r} &= \vec{r}_p - \vec{r}_e \\ \vec{R} &= \frac{m_p \vec{r}_p + m_e \vec{r}_e}{m_p + m_e} \end{aligned}$$

Gebruik makend van deze plaatsvectoren kan  $\vec{p}$  en  $\vec{P}$  gedefinieerd worden.

$$\begin{aligned} \vec{v} &= \vec{v}_p - \vec{v}_e \\ \vec{V} &= \frac{m_p \vec{v}_p + m_e \vec{v}_e}{m_p + m_e} \end{aligned}$$

Hieruit volgt:

$$\vec{p} = \left( \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} \right) \vec{v} \quad (2.2)$$

$$\vec{P} = (m_p + m_e) \vec{V} \quad (2.3)$$

De factoren  $\frac{m_p m_e}{m_p + m_e}$  en  $m_p + m_e$  worden respectievelijk de gereduceerde massa  $\mu$  en de totale massa  $M$  genoemd. De Hamiltoniaan krijgt zo de vorm:

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \left[ \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(\vec{r}) \right] = H_{MC} + H_{rel} \quad (2.4)$$

Er geldt:  $[H_{MC}, H_{rel}] \stackrel{1}{=} 0 \stackrel{2}{=} [H_{MC}, H] = [H_{rel}, H]$ .

(1)  $\vec{P}$  en  $\vec{p}$  uitgeschreven in operator-vorm zijn partieel afgeleiden en deze commuteren met elkaar. Wanneer de partieel afgeleide genomen wordt, wordt  $\vec{r}$  constant gehouden. (2)  $H_{MC}$  commuteert met zichzelf en commuteert met  $H_{rel}$ , dus ook met  $H$ . Een analoge redenering geldt voor  $[H_{rel}, H]$ .

Er bestaat dus een complete set eigentoestanden van  $H$ ,  $H_{rel}$  en  $H_{MC}$ . Zoeken naar de eigentoestanden van  $H$  is equivalent aan het zoeken naar deze van  $H_{rel}$  en  $H_{MC}$ . Opgelet, dit moet juist geïnterpreteerd worden: niet elke eigentoestand van  $H$  is een eigentoestand van  $H_{rel}$  en  $H_{MC}$ , er

bestaat wel alvast één complete set van eigentoestanden van  $H$ ,  $H_{rel}$  en  $H_{MC}$ .  $\Psi = \Psi_{MC}\Psi_{rel}$ , zodat:

$$\begin{aligned} (H_{MC} + H_{rel})\Psi_{MC}\Psi_{rel} &= E\Psi_{MC}\Psi_{rel} \\ \Psi_{rel}H_{MC}\Psi_{MC} + \Psi_{MC}H_{rel}\Psi_{rel} &= E\Psi_{MC}\Psi_{rel} \\ \Psi_{MC}^{-1}H_{MC}\Psi_{MC} + \Psi_{rel}^{-1}H_{rel}\Psi_{rel} &= E = E_{MC} + E_{rel} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Uiteindelijk bekomt men:

$$H_{MC}\Psi_{MC} = E_{MC}\Psi_{MC} \quad (2.6)$$

$$H_{rel}\Psi_{rel} = E_{rel}\Psi_{rel} \quad (2.7)$$

Vergelijking (2.6) kan herschreven worden als:

$$H_{MC}\Psi_{MC} = \frac{\vec{P}^2}{2M} = \frac{-\hbar^2}{2M}\nabla^2\Psi_{MC} \quad (2.8)$$

Dit is de Schrödingervergelijking voor een vrij deeltje. Deze heeft stationaire toestanden als eigentoestanden. Anders gezegd de golffuncties zijn staande golven:  $\Psi_{MC} = C \exp[i\vec{k}\vec{r}]$ , dit invullen in (2.8) levert:

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2M}\nabla^2 C(k)^2 \exp[i\vec{k}\vec{r}] &= E_{MC} \exp[i\vec{k}\vec{r}] \\ \Leftrightarrow E_{MC} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \end{aligned} \quad (2.9)$$

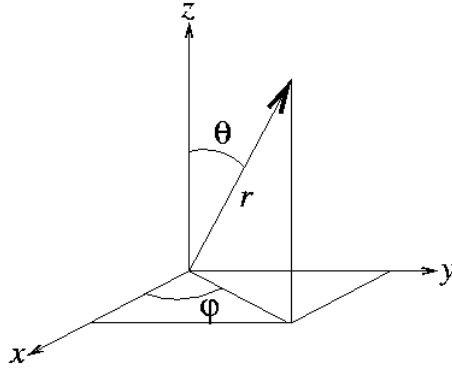
Dat de energie van het atoom afhangt van de snelheid waarmee het beweegt is niets nieuw, onze interesse gaat echter uit naar de interne energiestructuur van het atoom. Er moet echter wel een korte opmerking gemaakt worden over de berekeningen hierboven. Aangezien de massa van een proton ongeveer 1830 keer de elektronmassa is, valt het massamiddelpunt van het atoom zo goed als gelijk met het middelpunt van het proton. Het is dus eigenlijk de kern die zich als een vrij deeltje gedraagt.

De Hamiltoniaan van het resterende probleem, na het laten wegvallen van de onderindices, is van de vorm:

$$H = \frac{-\hbar^2\nabla^2}{2\mu} - V(\vec{r}) \quad (2.10)$$

Er kan nu slim gebruik gemaakt worden van de symmetrie van de potentiaal in dit relatieve probleem, deze is namelijk enkel afhankelijk van de afstand tot de kern m.a.w. sferisch symmetrisch. Overgaan van cartesische naar bolcoördinaten  $(x, y, z) \rightarrow (r, \theta, \phi)$  zal het oplossen van dit probleem vereenvoudigen.





Figuur 2.1: het sferisch coördinatensysteem.

De algemene uitdrukking voor de Laplaciaan luidt:

$$\nabla^2 = \frac{1}{\sqrt{|G|}} \frac{\partial}{\partial x^i} \left( \sqrt{|G|} g^{ij} \frac{\partial}{\partial x^j} \right)$$

De metriek in bolcoördinaten wordt gegeven door:

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \sin^2(\theta) \end{bmatrix}$$

Men vindt dus:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

De Schrödingervergelijking kan dan geschreven worden als:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) \Psi = 0 \quad (2.11)$$

## 2.2 Scheiden van veranderlijken

In bovenstaande uitdrukking (2.11) valt op dat het hoekafhankelijk en het radiaal deel apart voorkomen. Men kan dan het scheiden van de veranderlijken doorvoeren, wat neerkomt op het postuleren dat de oplossing van de vorm  $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$  zal zijn. De gescheiden vorm terug invullen in de vergelijking geeft:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 Y \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) R \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{R}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) Y R = 0$$

na deling door  $\frac{YR}{r^2}$  bekomt men:

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{Y \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{Y \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} (E - V(r)) = 0$$

De som van deze termen is telkens nul, ongeacht ze afhankelijk zijn van verschillende variabelen. Dit kan alleen maar als beide termen constant zijn, men bekomt dus twee vergelijkingen.

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} (E - V(r)) = +A \quad (2.12)$$

$$\frac{1}{Y \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{Y \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} = -A \quad (2.13)$$

Hier valt ook weer op te merken dat de termen die respectievelijk afhangen van  $\theta$  en  $\phi$  gescheiden voorkomen in bovenstaande vergelijking. Vergelijking (2.13) herschrijven en daarna scheiding van veranderlijken  $Y(\theta, \phi) = T(\theta)F(\phi)$  doorvoeren, levert:

$$\begin{aligned} \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} + AY \sin^2(\theta) &= 0 \\ \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) F \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + T \frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2} + ATF \sin^2(\theta) &= 0 \end{aligned}$$

De bekomen vergelijking delen door TF en opsplitsen in deelvergelijking levert:

$$\frac{1}{F} \frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2} = -D \quad (2.14)$$

$$\frac{\sin(\theta)}{T} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + A \sin^2(\theta) = +D \quad (2.15)$$

### 2.3 Hoekafhankelijk gedeelte

De eigenwaardevergelijking (2.14) heeft als oplossing  $F \sim \exp(\pm i\sqrt{D}\phi)$ , waar F moet voldoen aan periodieke randvoorwaarden  $F(\phi) = F(\phi + 2\pi)$ .  $\exp(i\sqrt{D}2\pi)$  moet dus gelijk zijn aan één, of m.a.w.  $\cos(\sqrt{D}2\pi) + i\sin(\sqrt{D}2\pi) = 1$ . Het is eenvoudig in te zien dat hieraan voldaan wordt wanneer  $\sqrt{D}$  een positief geheel getal is. Laten we dan D gelijk stellen aan  $m^2$ , zodat  $F \sim \exp(\pm im\phi)$  met m een geheel getal.

Vergelijking (2.15) neemt nu volgende vorm aan:

$$\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + (A \sin^2(\theta) - m^2)T = 0$$

Door over te gaan op nieuwe veranderlijken  $x = \cos(\theta)$  en  $F(x) = T(\theta)$ , waar  $\theta \in [0, \pi]$  en dus  $x \in [-1, 1]$ , heeft men dat  $\frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{dx}{d\theta} = -\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial x}$ . Hierdoor wordt bovenstaande vergelijking:

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left( (1-x^2) \frac{\partial P}{\partial x} \right) = PA - \frac{Pm^2}{\sin^2(\theta)} \quad (2.16)$$

Deze moet voldoen aan singuliere randvoorwaarden  $\lim_{x \rightarrow \pm 1} P < \infty$ . Vergelijking (2.16) is een vorm van de differentiaalvergelijking van Legendre, oplossingen van deze vergelijking worden gegeven door de Legendre polynomen. Om de specifieke vorm van de oplossingen te bepalen, zal gebruik gemaakt worden van de methode van Fröbenius. Beschouwen we eerst het geval waar m gelijk is aan nul.

Fröbenius:  $P(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+s}$

$$\begin{aligned}
A \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+s} &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[ (1-x^2) \frac{\partial}{\partial x} \left( \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+s} \right) \right] \\
&= -\frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+s) x^{n+s-1} \right) - \left( \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+s) x^{n+s+1} \right) \right] \\
&= -\left[ \left( \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+s)(n+s-1) x^{n+s-2} \right) - \left( \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+s)(n+s+1) x^{n+s} \right) \right] \\
&= -\left[ \sum_{n=0}^1 \sum_{n=2}^{\infty} a_n (n+s)(n+s-1) x^{n+s-2} - \left( \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+s)(n+s+1) x^{n+s} \right) \right]
\end{aligned}$$

De term  $-\sum_{n=0}^1 a_n (n+s)(n+s-1) x^{n+s-2}$  wordt gelijk aan nul gesteld, dit levert ons de waarde van  $s$ . Voor  $n=0$  is hieraan voldaan wanneer  $s=0$  en  $s=1$ , voor  $n=1$  wanneer  $s=0$  en  $s=-1$ . Beide termen zijn nul wanneer  $s=0$ . De overige termen in de vergelijking geven dan:

$$A \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = -\left[ \left( \sum_{n=2}^{\infty} a_n (n)(n-1) x^{n-2} \right) - \left( \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n)(n+1) x^n \right) \right] \quad (2.17)$$

$$A \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = -\sum_{n=0}^{\infty} [a_{n+2}(n+2)(n+1)x^n - a_n(n)(n+1)x^n] \quad (2.18)$$

$$a_{n+2} = \frac{n(n+1) - K}{(n+1)(n+2)} a_n \quad (2.19)$$

De bekomen recursierelatie levert ons een uitdrukking voor de Legendre polynomen. De oplossingen zijn echter enkel aanvaardbaar als ze convergeren in de randpunten  $-1$  en  $+1$ . Dit zal enkel voldaan zijn indien de polynoom wordt afgebroken bij een zekere waarde voor  $n$ . Laten we deze zekere waarde  $l$  noemen, de teller van de recursierelatie wordt nu nul indien  $A = l(l+1)$ . Het  $\theta$ -gedeelte voor  $m$  is nul heeft dus als eigenwaarden  $A = l(l+1)$  met  $l$  is een natuurlijk getal verschillend van nul. De bijhorende eigenfuncties zijn de Legendre polynomen  $P_l(x)$ . Vervolgens beschouwen we het algemene geval met  $m$  is niet gelijk aan nul.

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left( (1-x^2) \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \frac{Pm^2}{\sin^2(\theta)} = AP \quad (2.20)$$

Om de oplossingen van deze differentiaalvergelijking te vinden, wordt eerst gekeken naar het gedrag van  $P$  in nabijheid van de singuliere punten  $+1$  en  $-1$ . In de buurt van deze punten kan men het rechterlid van vergelijking (2.20) verwaarlozen. De vergelijking wordt dan:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( (1-x^2) \frac{\partial P_a}{\partial x} \right) = \frac{P_a m^2}{\sin^2(\theta)} = \frac{P_a m^2}{1-x^2}$$

Kijkend naar deze vergelijking, kan men besluiten dat  $P_a$  van de vorm  $(1-x^2)^\mu$  moet zijn. Substitutie in bovenstaande vergelijking levert:

$$\begin{aligned}
m^2(1-x^2)^{\mu-1} &= -\frac{\partial}{\partial x} \left( (1-x^2)(\mu(1-x^2)^{\mu-1})2x \right) \\
&= -2\mu(1-x^2)^\mu + 4x^2\mu^2(1-x^2)^{\mu-1} \\
m^2 &= -2\mu(1-x^2) + 4x^2\mu^2
\end{aligned}$$

In de limiet voor  $x$  gaande naar  $\pm 1$  valt de eerste term van het rechterlid weg en bekomt men:

$$m^2 = 4\mu^2$$

$$\mu = \pm \frac{m}{2}$$

We vinden dus twee oplossingen, maar wegens de eis op convergentie wordt enkel de positieve behouden. Men heeft dus dat  $\lim_{x \rightarrow \pm 1} P(x) = (1 - x^2)^{\frac{m}{2}}$ . De oplossing van het probleem kan nu geschreven worden als  $P(x) = (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} R(x)$ . Substitutie in vergelijking (2.20) levert:

$$\left( (1 - x^2) \frac{\partial^2 R}{\partial x^2} \right) - (2(m + 1)x \frac{\partial R}{\partial x}) + (A - m(m + 1))R = 0$$

Toepassen van de methode van Fröbenius zal opnieuw een recursierelatie leveren.

Fröbenius:  $R(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+s}$

$$\begin{aligned} 0 &= (1 - x^2) \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n + s)(n + s - 1) x^{n+s-2} - 2(m + 1)x \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n + s) x^{n+s-1} \\ &\quad + (A - m(m + 1)) \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+s} \\ &= \sum_{n=0}^1 a_n (n + s)(n + s - 1) x^{n+s-2} + \sum_{n=2}^{\infty} a_n (n + s)(n + s - 1) x^{n+s-2} \\ &\quad - \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n + s)(n + s - 1) x^{n+s} - (2(m + 1)x \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n + s) x^{n+s-1} \\ &\quad + (A - m(m + 1)) \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+s} \end{aligned}$$

De eerste term van het rechterlid moet weer wegvallen. Voor  $n = 0$  is hieraan voldaan wanneer  $s = 0$  en  $s = 1$ , voor  $n = 1$  wanneer  $s = 0$  en  $s = -1$ . Beide termen zijn nul wanneer  $s = 0$ . De overige termen in de vergelijking geven dan:

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{n=2}^{\infty} a_n (n)(n - 1) x^{n-2} - \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n)(n - 1) x^n - (2(m + 1)x \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n) x^{n-1} \\ &\quad + (A - m(m + 1)) \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} a_{n+2} (n + 2)(n + 1) x^n - \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n)(n - 1) x^n - (2(m + 1) \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n) x^n \\ &\quad + (A - m(m + 1)) \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \\ &= a_{n+2} (n + 2)(n + 1) - n(n - 1) - (2(m + 1)a_n (n) + (A - m(m + 1))a_n \\ a_{n+2} &= \frac{n(n - 1) + 2(m + 1)n - A + m(m + 1)}{(n + 2)(n + 1)} a_n \end{aligned}$$

Dit kan herschreven worden tot volgende recursierelatie:

$$a_{n+2} = \frac{(m+n)(m+n+1) - A}{(n+1)(n+2)} a_n \quad (2.21)$$

Wegens de convergentie eis moet ook hier de reeks worden afgebroken bij een bepaalde  $n=l$ . De eigenwaarden worden dus gegeven door  $A = l(l+1)$  met  $l = m, m+1, \dots$ . De bijhorende eigenfuncties zijn de zogenaamde Geassocieerde Legendre functies  $P_l^m(x)$ . De Legendre polynomen worden gegenereerd door de Rodrigues formule:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l$$

Zodat de Geassocieerde Legendre functie gegeven wordt door:

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l^m$$

Voor het  $\phi$ -gedeelte hadden we  $F \sim \exp(\pm im\phi)$  (met  $m$  een geheel getal), als eigenfuncties gevonden. Het evenredigheidsteken kan nu vervangen worden door een gelijkheidsteken als we normalisatie doorvoeren. Waardoor:

$$C \int_0^{2\pi} |\exp im\phi|^2 d\phi = 1 \iff 2\pi C = 1$$

Men heeft dus:

$$F_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp im\phi \quad (2.22)$$

Een analoge redenering geldt voor het  $\theta$ -gedeelte, echter de afleiding ervan zou ons te ver leiden. Bij de berekening wordt eerst de constante bepaald voor de Legendre polynomen, waarbij meermaals gebruik gemaakt wordt van de orthogonaliteitseigenschap, en daaruit deze van de geassocieerde functies. Deze afleiding kan gevonden worden in wiskundige naslagwerken zoals [9], en het resultaat werd hieruit overgenomen.

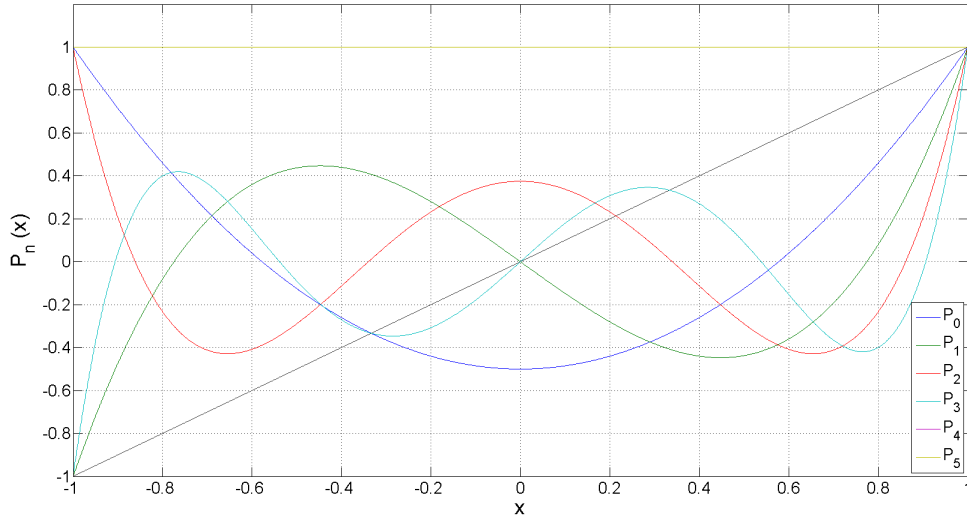
$$\int_{-1}^1 [P_l^m(x)]^2 dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!}$$

Uit bovenstaande volgt dat:

$$T_{l,m} = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^m(\cos(\theta)) \quad (2.23)$$

Waarbij geldt dat  $m$   $2l+1$  mogelijke waarden kan aannemen met  $m \leq |l|$  en  $l \geq 0$ . Men kan nu het  $\theta$ -en  $\phi$ -gedeelte combineren tot het totale hoekafhankelijk gedeelte:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^m(\cos(\theta)) \exp(im\phi) \quad (2.24)$$



Figuur 2.2: de eerste zes Legendre polynomen, met  $x \in [-1, 1]$ .

## 2.4 Het radiaal deel

De vergelijking van het radiale deel, vergelijking (2.12), luidt:

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} (E - V(r)) = +A$$

De potentiaal  $V(r)$  van het relatieve probleem is de Coulomb potentiaal. De potentiële energie wordt dan gegeven door  $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r}$ , met  $\epsilon_0$  de diëlektrische constante van het vacuüm.  $q_1$  stellen we gelijk aan de lading van het elektron  $-e$ , en  $q_2$  de lading van het proton  $+e$ . We weten dat  $A$  gelijk is aan  $l(l+1)$  en door het rechterlid over te brengen en vergelijking (2.12) te vermenigvuldigen met  $\frac{R}{r^2}$  bekomt men:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) R - \left( \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0 \quad (2.25)$$

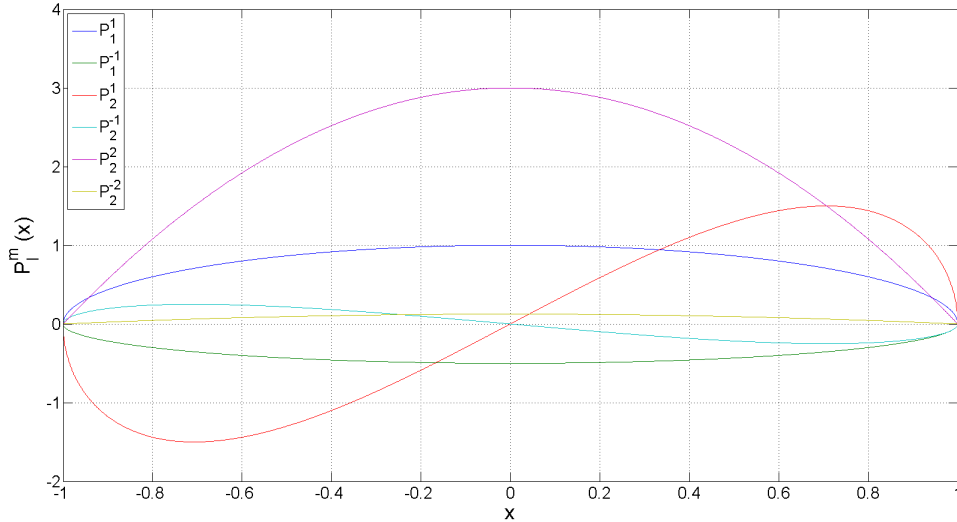
Er wordt overgegaan op een nieuwe eigenwaardevariabele  $\rho = 2\alpha_n r$ , met  $\alpha_n = \sqrt{\frac{2\mu|E_n|}{\hbar^2}}$ . Hierdoor kan de energie uitgedrukt worden als  $E_n = \frac{-\hbar^2 \alpha_n^2}{2\mu}$ . Substitutie van  $\rho$  in vergelijking (2.25) levert:

$$\frac{4\alpha_n^2}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho^2 \frac{\partial R}{\partial \rho} \right) + \alpha_n^2 \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |E_n|} \frac{2\alpha_n}{\rho} - 1 \right) R - \left( \frac{4\alpha_n^2 l(l+1)}{\rho^2} \right) R = 0$$

Na deling door  $\lambda = \frac{e^2 \alpha_n}{8\pi\epsilon_0 |E_n|}$  en  $4\alpha_n^2$  krijgt men:

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho^2 \frac{\partial R}{\partial \rho} \right) + \left( \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R = 0 \quad (2.26)$$

In herschreven vorm kan men inzien dat deze vergelijking van de vorm van Whittaker's vergelijking is. De oplossingen van die vergelijking zijn functies waarvan de voorfactoren bestaan uit een exponentiële functie  $\exp\left(\frac{-\rho}{2}\right)$  en een macht van  $\rho$ . Hierdoor kan men vermoeden dat oplossingen van vergelijking (2.26) ook van deze vorm zullen zijn. Om de expliciete vorm van



Figuur 2.3: de eerste zes Geassocieerde Legendre functies, met  $x \in [-1, 1]$ .

de oplossingen te bekomen, zullen eerst de limietsituaties  $\rho \rightarrow \infty$  en  $\rho \rightarrow 0$  bekeken worden. In de limiet voor  $\rho \rightarrow \infty$  kan men de termen waar  $\rho$  in de noemer staat verwaarlozen en wordt vergelijking (2.26):

$$\frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} - \frac{R}{4} = 0$$

Deze heeft als oplossing  $R = \exp(\frac{\rho}{2}) + \exp(\frac{-\rho}{2})$ . Wegens de eis van normeerbaarheid (wat neerkomt op de eis van convergentie), moet de eerste term van het rechterlid geschrapt worden. Voor willekeurige  $\rho$  kan men onderstellen dat  $R = \exp(\frac{-\rho}{2})M(\rho)$ . Substitutie in vergelijking (2.26) levert:

$$\frac{\partial^2 M}{\partial \rho^2} - (1 - \frac{2}{\rho})\frac{\partial M}{\partial \rho} + (\frac{\lambda - 1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2})M(\rho) = 0 \quad (2.27)$$

De limiet van deze vergelijking voor  $\rho \rightarrow 0$  geeft:

$$\frac{\partial^2 M}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{\partial M}{\partial \rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}M = 0$$

Oplossingen van deze vergelijking zijn van de vorm  $\rho^s$ . Invullen in de vergelijking levert:

$$\begin{aligned} s(s-1)\rho^{s-2} + \frac{2}{\rho}s\rho^{s-1} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\rho^s &= 0 \\ \iff s(s-1) + 2s - s(s+1) &= 0 \\ \iff s &= l \end{aligned}$$

Men kan  $M(\rho)$  dus schrijven als  $\rho^l H(\rho)$ . Invullen in uitdrukking (2.27) geeft:

$$\frac{\partial^2 H}{\partial \rho^2} + (\frac{2l+2}{\rho} - 1)\frac{\partial H}{\partial \rho} + \frac{\lambda - 1 - l}{\rho}H = 0 \quad (2.28)$$

Door gebruik te maken van de methode Fröbenius kan men ook hier weer een recursierelatie vinden die het verband weergeeft tussen opeenvolgende termen in de somreeks van  $H(\rho)$ . Aangezien de methode al twee keer geïllustreerd is, wordt dit keer de uitwerking ervan niet weergegeven. Het resultaat dat men bekomt is:

$$a_{k+1} = \frac{k+l+1-\lambda}{(k+1)(k+2l+2)} a_k \quad (2.29)$$

In de limiet voor  $k \rightarrow \infty$  wordt de reeks gegeven door  $\sum_k \frac{\rho^k}{k!}$ . Deze uitdrukking divergeert voor  $k \rightarrow \infty$ , zodanig dat ook hier de reeks weer moet worden afgebroken bij een bepaalde  $k = q$ . Men heeft dat de teller van de recursierelatie nul wordt wanneer  $\lambda = q + l + 1$ . De bijhorende eigenfuncties die voldoen aan relatie (2.29) zijn de Geassocieerde veeltermen van Laguerre. In het algemeen wordt  $q$  vaak genoteerd als  $n$ , en de uiteindelijke uitdrukking voor  $R(\rho)$  is van de vorm:

$$R(\rho) \sim \rho^l \exp\left(\frac{-\rho}{2}\right) L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

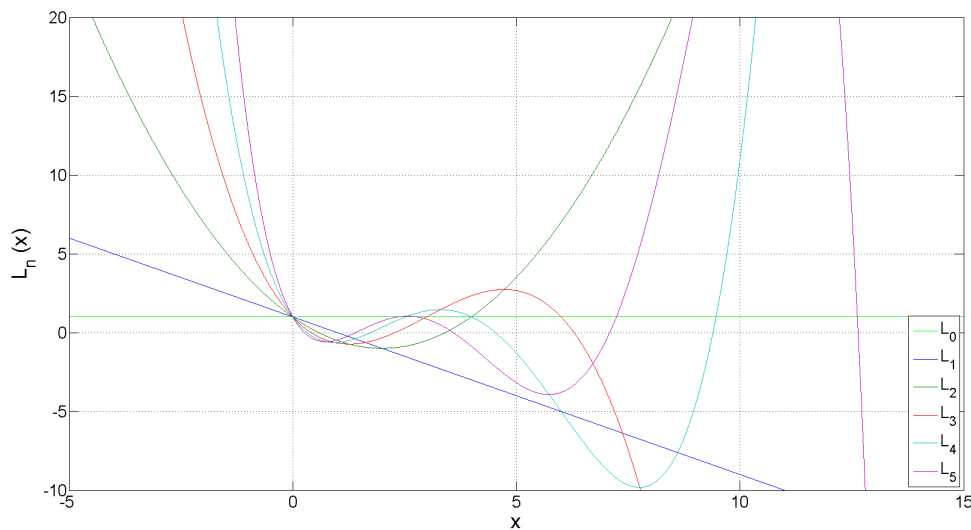
Wegens normalisatie moet er gelden dat:

$$\int_0^\infty dr r^2 |R_{n,l}(r)|^2 = 1$$

De normalisatieconstante kan ook hier weer bepaald worden door te berekenen waar  $\int_0^\infty dr r^2 |R_{n,l}(r)|^2$  aan gelijk is. Hiervoor wordt gebruik gemaakt van de generator functie van de Laguerre polynomen. De afleiding zelf zou ons te ver leiden, en de uitkomst van de integraal werd opgezocht [9], deze luidt  $\frac{2n[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!}$ . Na het omschrijven van  $\rho$  naar  $r$ , heeft men dat aan de normalisatie eis voldaan wordt indien:

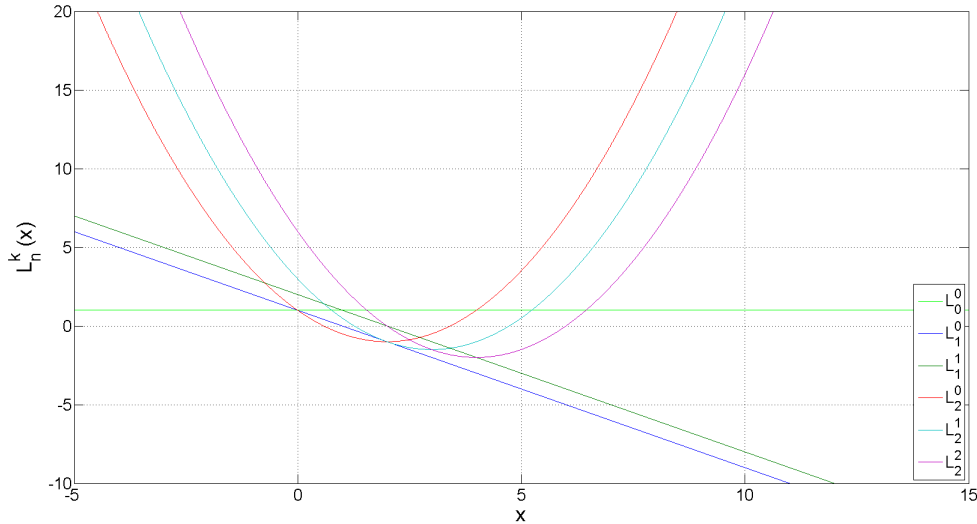
$$R_{n,l}(r) = \sqrt{(2\alpha_n)^3} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3}} (2\alpha_n r)^l \exp(-\alpha_n r) L_{n+l}^{2l+1}(2\alpha_n r) \quad (2.30)$$

Aangezien  $n = q + l + 1$  en  $q$  is positief geheel getal, heeft men dat  $n \geq l + 1$ .



Figuur 2.4: de eerste zes Laguerre polynomen.





Figuur 2.5: de eerste zes Geassocieerde Laguerre functies.

## 2.5 Energiespectrum, golffuncties en waarschijnlijkheden

We hadden  $\lambda$  door  $n$  vervangen, dus is  $n$  gedefinieerd als:

$$\begin{aligned}
 n &= \frac{e^2 \alpha_n}{8\pi\epsilon_0 |E_n|} \\
 &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 |E_n|} \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2 |E_n|}} \\
 \frac{\hbar^2 |E_n|}{2\mu} &= \frac{1}{n^2} \left( \frac{e}{8\pi\epsilon_0} \right)^2
 \end{aligned}$$

We beschouwen de situatie waar het elektron gebonden is aan het proton ( $E_n < 0$ ). Hierdoor heeft men dat  $|E_n| = -E_n$  zodat de uitdrukking voor de energie uiteindelijk volgende vorm aanneemt:

$$E_n = -\frac{2\mu}{\hbar^2 n^2} \left( \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \right)^2 \quad (2.31)$$

Aan de vorm van deze formule ziet men dat het energieverval tussen opeenvolgende niveaus evenredig is met  $\frac{1}{n^2}$ . De energieniveaus zijn dus niet equidistant. Men kan  $\alpha_1$  nog omschrijven:

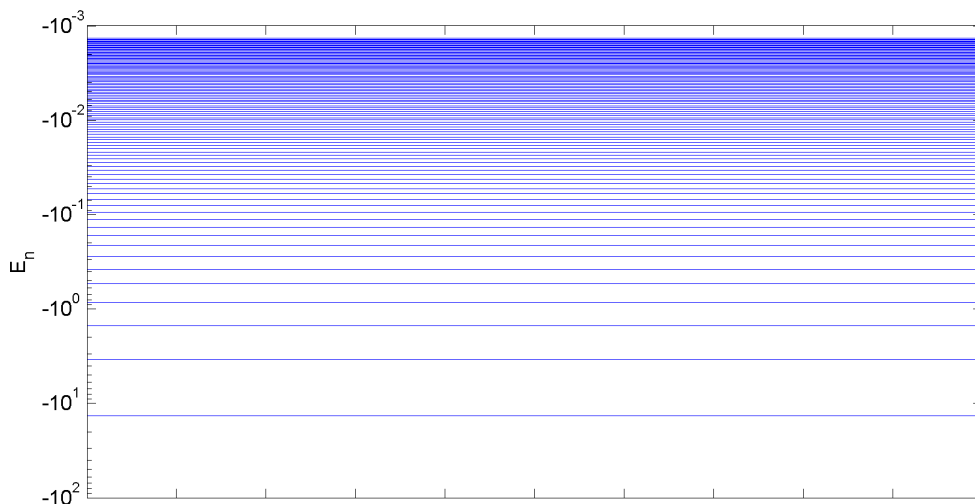
$$\begin{aligned}
 \alpha_1 &= \sqrt{\frac{2\mu |E_1|}{\hbar^2}} \\
 &= \frac{e^2 \mu}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \\
 &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \left( \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \right) \\
 &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \left( \frac{m_e + m_p}{m_e m_p} \right)^{-1} \\
 &= \frac{e^2 m}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \left( 1 + \frac{m_e}{M} \right)^{-1}
 \end{aligned}$$

De factor  $\left(\frac{e^2 m}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}\right)^{-1}$  heeft de dimensie van een afstand en dit wordt de Bohrstraal  $a_0$  genoemd, met  $a_0 = 0.529\text{\AA}$ . Men kan  $E_n$  nu herschrijven:

$$E_n = \frac{-1}{2n^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}\right) \left(1 + \frac{m_e}{M}\right)^{-1}$$

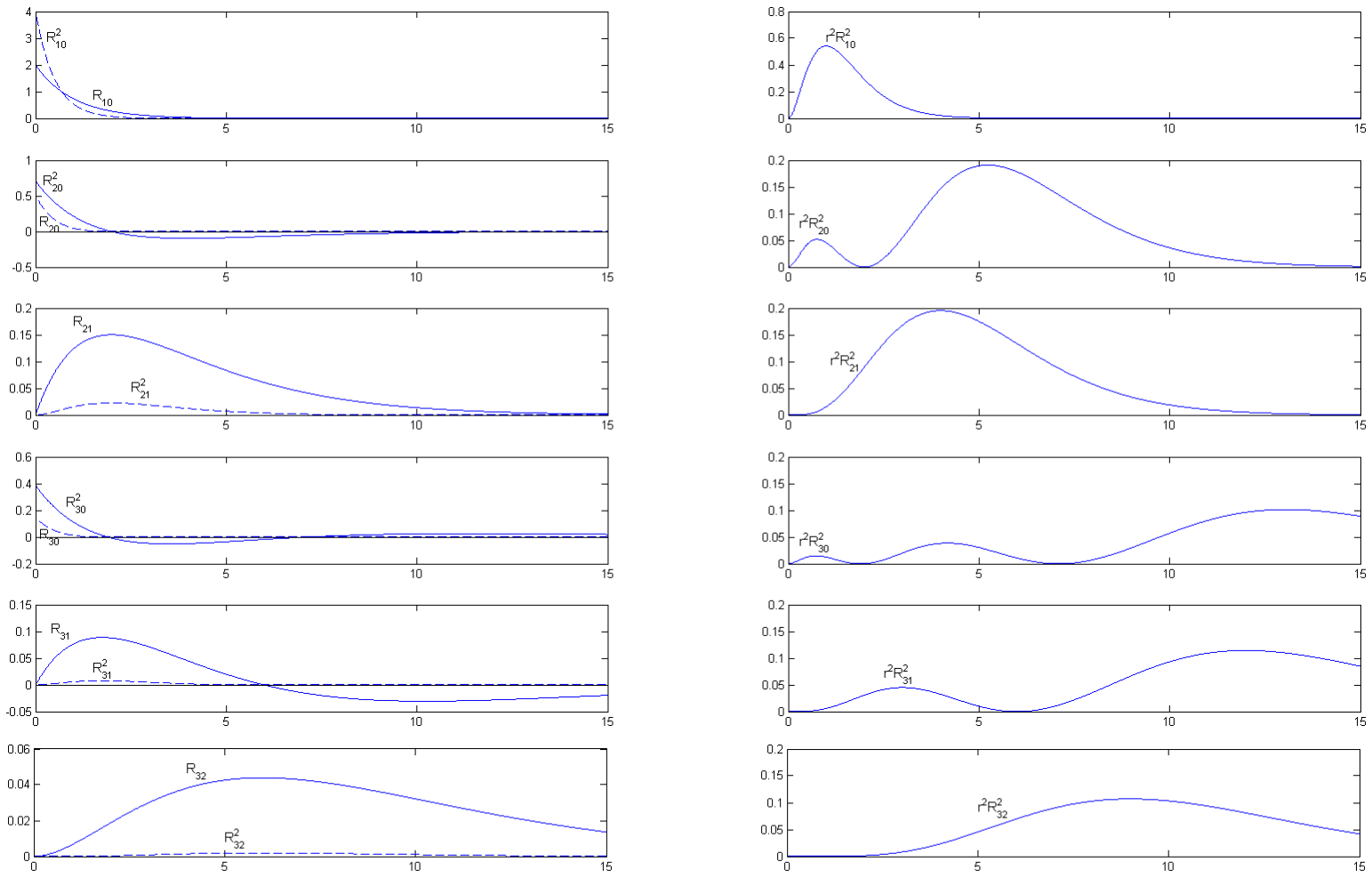
$$= -\frac{R_y}{n^2} \left(1 + \frac{m_e}{M}\right)^{-1}$$

$R_y$  is de energie van de grondtoestand van het atoom, en staat bekend als de Rydberg energie-eenheid. Alle waarden invullen geeft  $R_y = 13,6 \text{ eV}$ . Op figuur (2.4) ziet men dat de energieniveaus inderdaad als maar dichter bij elkaar komen te liggen voor stijgende  $n$ . Ook is het inderdaad zo dat de onderste lijn in de figuur, die correspondeert met de grondtoestandsenergie, op  $-13,6 \text{ eV}$  ligt.

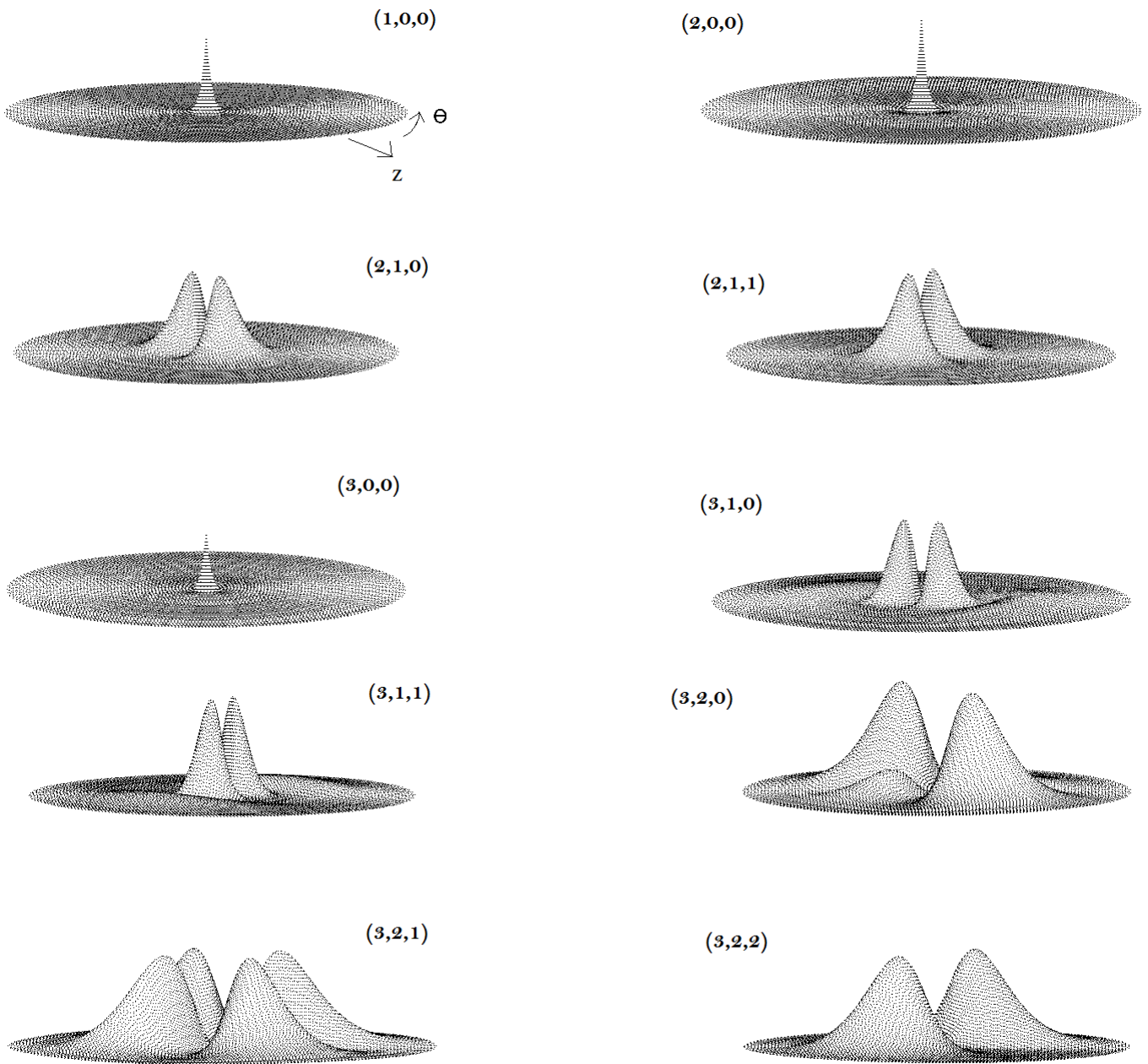


Figuur 2.6: energiespectrum van het 3D waterstofatoom op een log-schaal.

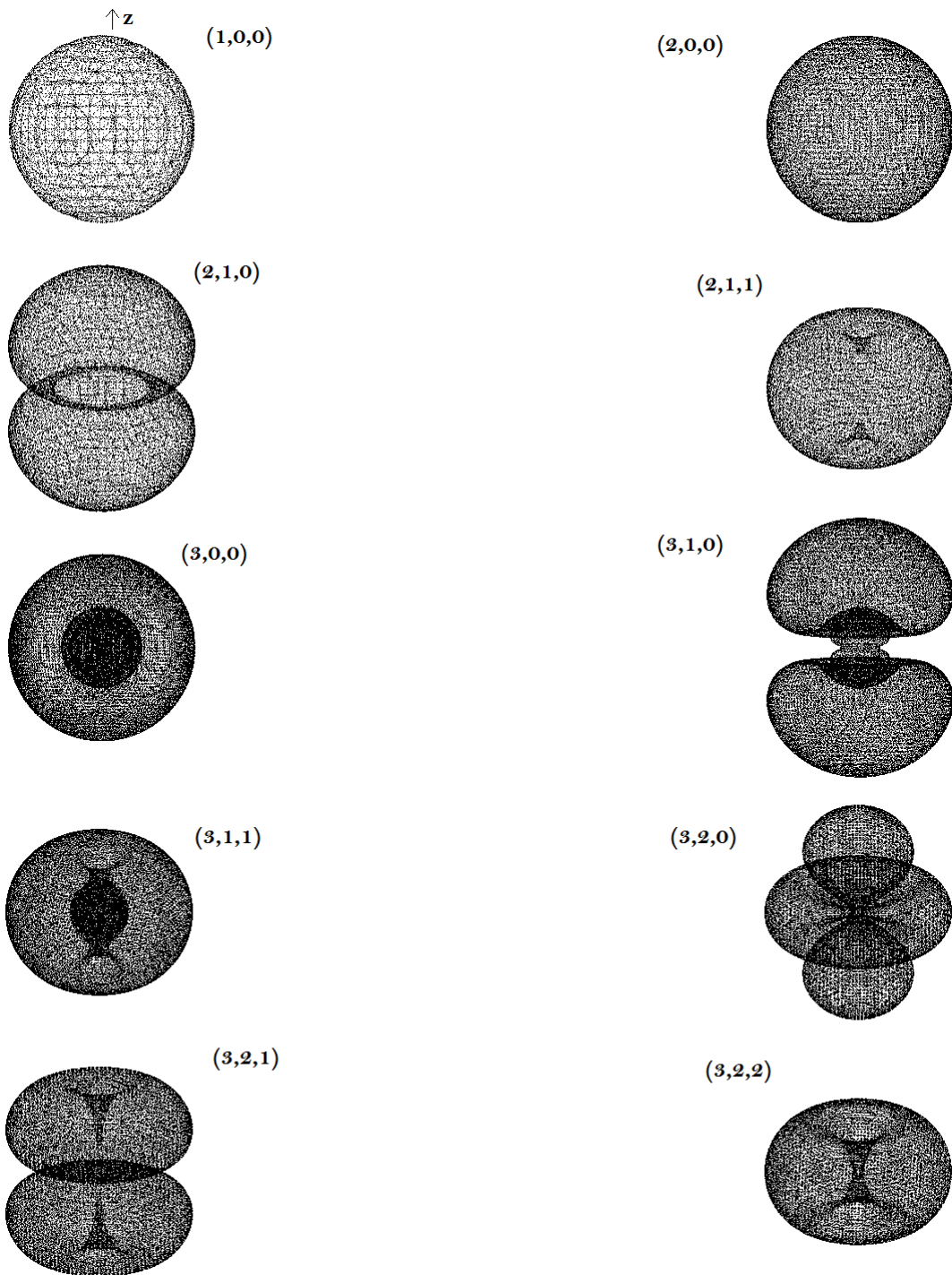
De bekomen vergelijkingen voor de radiale en hoekafhankelijke eigenfuncties kunnen grafisch weergegeven worden. Echter op zich brengen deze niet veel extra informatie met zich mee. Hetgeen ons interesseert zijn de waarschijnlijkheden die kunnen berekend worden uit golf functies, er kunnen verschillende waarschijnlijkheden onderscheiden worden. Het kwadraat van de radiale eigenfunctie  $R_{n,l}^2(r)$  staat in verband met de waarschijnlijkheid om langs de richting  $(\theta, \phi)$  het elektron te observeren in een volume-element rond  $(r, \theta, \phi)$ .  $r^2 R_{n,l}^2(r)$  staat dan weer in verband met de waarschijnlijkheid om het elektron te observeren in een sferische eenheidsschil met straal  $r$ . Wanneer de schil dikte  $dr$  heeft, wordt dit  $r^2 R_{n,l}^2(r) dr$ .  $|\Psi(r, \theta, \phi)|^2$  kan dan weer gebruikt worden om de waarschijnlijkheid dat een deeltje zich op positie  $\vec{r}$  in de ruimte bevindt te berekenen. Als laatste is er nog  $|\Psi(r, \theta, \phi)|^2 dV$ , dewelke de waarschijnlijkheid geeft om het elektron te observeren in het volume-element  $dV$  op de positie  $(r, \theta, \phi)$ . Waarbij geldt dat het volume-element in bolcoördinaten gegeven wordt door  $dV = r^2 dr d\cos(\theta) d\theta d\phi$ . In onderstaande figuren worden sommigen van deze waarschijnlijkheden voor de eerste toestanden getoond.



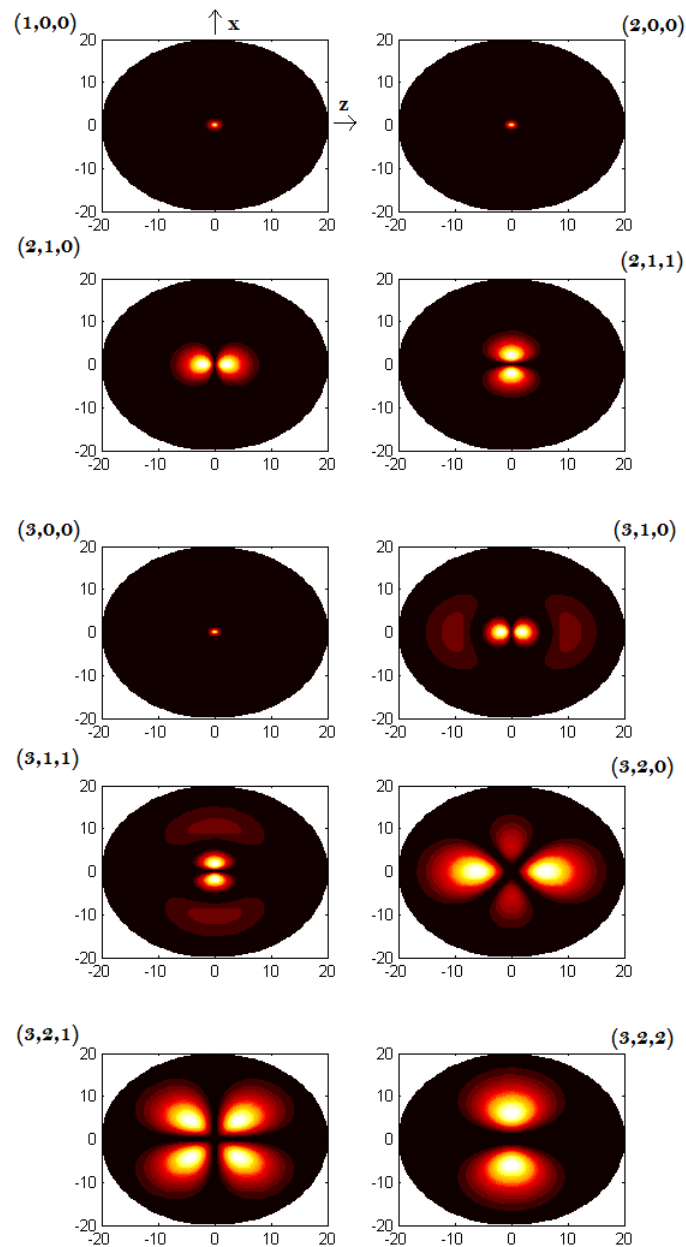
Figuur 2.7: in de linkerkolom worden de eerste zes radiale golffuncties alsook het kwadraat ervan weergegeven. In de rechterkolom zijn de eerste zes radiale waarschijnlijkheidsdichtheden geplott. De eenheid gebruikt op de x-as is de Bohrstraal.



Figuur 2.8: elke figuur geeft de respectievelijke waarschijnlijkheid  $|\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)|^2$  om het elektron in een punt  $(r, \theta, \phi)$  terug te vinden voor een welbepaalde toestand. De assen getekend bij de eerste figuur gelden voor alle figuren. De getallen bij de figuren geven telkens de waarde van  $(n,l,m)$ . Deze waarschijnlijkheden hangen enkel af van  $r$  en  $\theta$ .



Figuur 2.9: oppervlakken van constante waarschijnlijkheid  $|\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)|^2 = 1e-5$ . De as getekend bij de eerste figuur geldt voor alle figuren. De getallen bij de figuren geven telkens de waarde van  $(n,l,m)$ .



Figuur 2.10: contour plot van  $|\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)|^2$ . Dit kan ook gezien worden als doorsnede van de vorige figuren langs het  $(x,z)$ -vlak. De contourlijnen geven aan waar de waarschijnlijkheid gelijk is. Binnen de contour lijn stijgt en erbuiten daalt de waarschijnlijkheid. De assen getekend bij de eerste figuur gelden voor alle figuren. De getallen bij de figuren geven telkens de waarde van  $(n,l,m)$ .

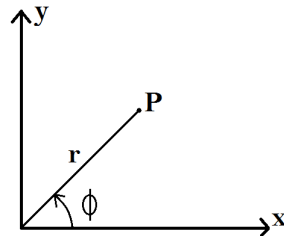
### 3 Het tweedimensionaal waterstofatoom

De oplossingsmethode van het tweedimensionaal waterstofatoom is zeer analoog aan dit in drie dimensies. Er zullen verschillende stappen ondernomen worden om het probleem te herschrijven (zodanig dat het exact oplosbaar wordt) die men al kent uit het voorgaande. Allereerst wordt er overgegaan op een nieuw coördinatenstelsel dat gebruik maakt van de symmetrie van het probleem, meer bepaald poolcoördinaten. Dit leidt ook hier tot een vergelijking die de beweging van het massacentrum en één die de beweging van het elektron rond de kern beschrijft. De interesse gaat weer uit naar het tweede probleem, de Schrödingervergelijking is hier van de vorm:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi(x, y) + V(x, y)\Psi(x, y) = E\Psi(x, y) \quad (3.1)$$

De metriek in poolcoördinaten is:

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & r^2 \end{bmatrix}$$



Figuur 3.1: poolcoördinaten.

Aan de hand van de algemene uitdrukking voor de Laplaciaan, gegeven in in vorig hoofdstuk, bekomt men:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

Vergelijking (3.1) wordt dan:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V) \Psi(r, \phi) = 0 \quad (3.2)$$

#### 3.1 Scheiden van veranderlijken

Het radiaal en hoekafhankelijk deel komen gescheiden voor in de vergelijking, men postuleert dat  $\Psi(r, \phi) = R(r)F(\phi)$ . Na substitutie in (3.2):

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r P \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{R}{r^2} \frac{\partial^2 P}{\partial \phi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V) R P = 0$$

Deling door  $\frac{RP}{r^2}$  geeft:

$$\frac{r}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{P} \frac{\partial^2 P}{\partial \phi^2} + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} (E - V) = 0$$

De som van deze termen is telkens nul, ongeacht ze onafhankelijk zijn van elkaar. Men bekomt twee vergelijkingen:

$$\frac{r}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} (E - V) = +A \quad (3.3)$$

$$\frac{1}{P} \frac{\partial^2 P}{\partial \phi^2} = -A \quad (3.4)$$

### 3.2 Het $\phi$ -gedeelte

Eigenwaardevergelijking (3.4) zijn we al eens tegengekomen in vorig hoofdstuk. P moest hier voldoen aan periodische randvoorwaarden. De oplossing wordt gegeven door:  $P(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\phi)$ , met  $m = \pm\sqrt{A}$  een geheel getal.

### 3.3 Het radiaal deel

Vergelijking (3.3) kan herschreven worden:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V) R - \frac{m^2}{r^2} R &= 0 \\ \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial R}{\partial r} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left( E - V - \frac{m^2}{r^2} \right) R &= 0 \end{aligned}$$

Door over te gaan op de eigenwaardevariabele  $\rho = \sqrt{\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}} r$  wordt de vergelijking:

$$\begin{aligned} \frac{8\mu|E|}{\hbar^2} \frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} + \frac{8\mu|E|}{\hbar^2 \rho} \frac{\partial R}{\partial \rho} + \left[ \frac{2\mu}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\rho} \sqrt{\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}} \right) - \frac{8\mu|E|}{\hbar^2} \frac{m^2}{\rho^2} \right] R &= 0 \\ \frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial R}{\partial \rho} + \frac{ER}{4|E|} + \frac{2\mu e^2}{4\pi\epsilon_0\rho\hbar^2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{8\mu|E|}} R - \frac{m^2}{\rho^2} R &= 0 \\ \frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial R}{\partial \rho} - \frac{R}{4} + \sqrt{\left( \frac{\mu e^4}{8(2\pi\epsilon_0)^2 \rho^2 |E| \hbar^2} \right)} R - \frac{m^2}{\rho^2} R &= 0 \end{aligned}$$

Stellen we  $\lambda = \sqrt{\left( \frac{\mu e^4}{8(2\pi\epsilon_0)^2 |E| \hbar^2} \right)}$ , dan krijgt men:

$$\frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial R}{\partial \rho} - \frac{R}{4} + \frac{\lambda}{\rho} R - \frac{m^2}{\rho^2} R = 0$$

Na herschikking bekomt men uiteindelijk:

$$\frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial R}{\partial \rho} + \left( \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{m^2}{\rho^2} \right) R = 0 \quad (3.5)$$

De radiale vergelijking kan ook in het tweedimensionale geval herschreven worden in de vorm van Whittaker's vergelijking. De bekomen vergelijking gaan we oplossen op de zelfde manier als in hoofdstuk 2. Om de uiteindelijke vorm van de oplossing te bepalen, kijken we dus eerst naar de limietgevallen. In de limiet  $\rho \rightarrow \infty$  wordt vergelijking (3.5):

$$\frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} - \frac{R}{4} = 0$$



De oplossing van deze differentiaalvergelijking luidt:  $R = \exp(\frac{\rho}{2}) + \exp(-\frac{\rho}{2})$ . Waarbij de eerste term moet wegvallen wegens de normalisatie eis. Voor willekeurige  $\rho$  heeft men dat  $R = \exp(-\frac{\rho}{2})M(\rho)$ . Substitutie in (3.5) levert:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} \exp(-\frac{\rho}{2})M - 2 \left( \frac{1}{2} \exp(-\frac{\rho}{2}) \frac{\partial M}{\partial \rho} \right) + \exp(-\frac{\rho}{2}) \frac{\partial^2 M}{\partial \rho^2} \\ & + \frac{1}{\rho} \left( \frac{-1}{2} \exp(-\frac{\rho}{2})M + \exp(-\frac{\rho}{2}) \frac{\partial M}{\partial \rho} \right) + \left( \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{m^2}{\rho^2} \right) \exp(-\frac{\rho}{2})M = 0 \end{aligned}$$

Hier kan in elke term  $\exp(-\frac{\rho}{2})$  geschrapt worden en na vereenvoudiging krijgt men:

$$\frac{\partial^2 M}{\partial \rho^2} - \frac{\partial M}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial M}{\partial \rho} + \left( \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{2\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} \right) M = 0 \quad (3.6)$$

Bovenstaande vergelijking wordt in de limiet  $\rho \rightarrow 0$ :

$$\frac{\partial^2 M}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial M}{\partial \rho} + \frac{m^2}{\rho^2} M = 0$$

Oplossingen van deze differentiaalvergelijking zijn van de vorm  $M(\rho) \sim \rho^s$ .

$$\begin{aligned} s(s-1)\rho^{s-2} + \frac{s\rho^{s-1}}{\rho} - \frac{m^2\rho^s}{\rho^2} &= 0 \\ \iff s(s-1) + s - m^2 &= 0 \\ \iff s^2 = m^2 & \\ \iff s = \pm m & \end{aligned}$$

Voor willekeurige  $\rho$  heeft men dat  $M(\rho) = \rho^m H(\rho)$ . Substitutie in (3.6) levert:

$$\begin{aligned} & \left[ m(m-1)\rho^{m-2} - m\rho^{m-1} + m\rho^{m-2} + \left( \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{2\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} \right) \rho^m \right] H(\rho) \\ & + [m\rho^{m-1} + m\rho^{m-1} - \rho^m + \rho^{m-1}] \frac{\partial H}{\partial \rho} + \rho^m \frac{\partial^2 H}{\partial \rho^2} = 0 \\ & \left[ (m(m-1) + m - m^2) \rho^{m-2} + \left( -m + \lambda - \frac{1}{2} \right) \rho^{m-1} \right] H(\rho) \\ & + [(2m+1)\rho^{m-1} - \rho^m] \frac{\partial H}{\partial \rho} + \rho^m \frac{\partial^2 H}{\partial \rho^2} = 0 \\ & \frac{\partial^2 H}{\partial \rho^2} + \left[ \frac{2m+1}{\rho} \right] \frac{\partial H}{\partial \rho} + \left[ \frac{-m + \lambda - \frac{1}{2}}{\rho} \right] H(\rho) = 0 \end{aligned}$$

Dit herschrijven levert:

$$\rho \frac{\partial^2 H}{\partial \rho^2} + [2m+1-\rho] \frac{\partial H}{\partial \rho} + \left[ -m + \lambda - \frac{1}{2} \right] H(\rho) = 0 \quad (3.7)$$

Deze is duidelijk van de vorm van de vergelijking van Laguerre. Fröbenius levert ook hier weer een recursierelatie. Hier moet weer afgebroken worden bij een bepaalde  $k = n$ . En opdat de teller nul zou worden moet  $n$  gelijk zijn aan  $m + \lambda - \frac{1}{2}$ . De oplossingen van de vergelijking zijn de Geassocieerde Laguerre polynomen. De oplossing van het radiaal deel is dan:

$$R(\rho) \sim \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) \rho^m L_{|m|+\lambda-\frac{1}{2}}^{2|m|}(\rho)$$

Hier eisen we dat  $\int_0^\infty dr r |R_{n,m}(r)|^2 = 1$ . Voor de berekening van de normalisatieconstante hier kan uitgegaan worden van de algemene uitdrukking in vorige hoofdstuk. Mits kleine aanpassingen bekomt men:

$$R(r) = \sqrt{\alpha_n \frac{(\lambda - \frac{1}{2} - |m|)!}{((|m| + \lambda - \frac{1}{2})!)^3 (2\lambda)}} \exp\left(\frac{\alpha_n r}{2}\right) (\alpha_n r)^m L_{|m|+\lambda-\frac{1}{2}}^{2|m|}(\alpha_n r) \quad (3.8)$$

$$\text{met } \lambda = 1/2, 3/2, \dots \text{ en } \alpha_n = \sqrt{\frac{8\mu|E_n|}{\hbar^2}}$$

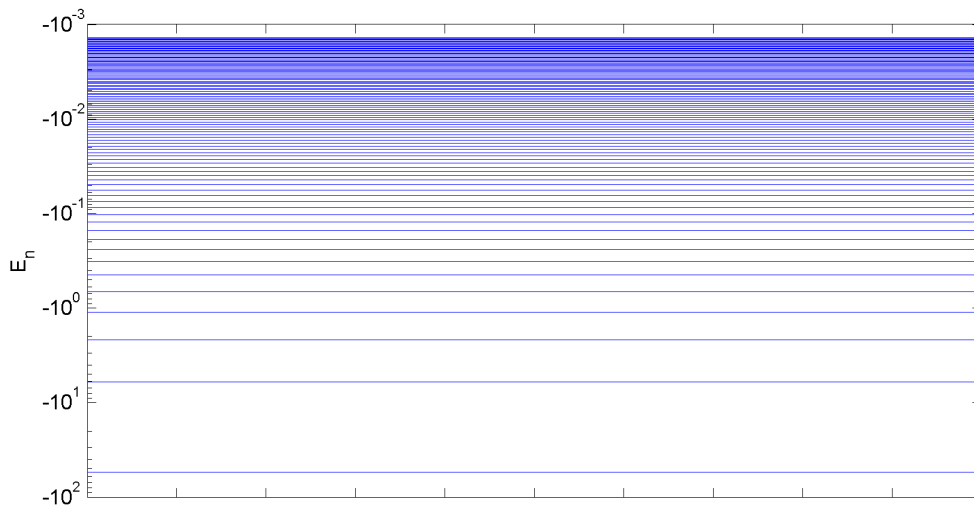
### 3.4 Golf functies en het energiespectrum

Om later een betere vergelijking met het driedimensionale waterstofatoom te kunnen maken, definieert men een nieuwe variabele  $n = \lambda + \frac{1}{2}$ . Hierdoor heeft men dat  $n$  een natuurlijk getal is verschillend van 0 en dat  $m$  een geheel getal is met  $|m| < n$ . De totale oplossing  $\Psi_{n,m}$  is dan van de vorm:

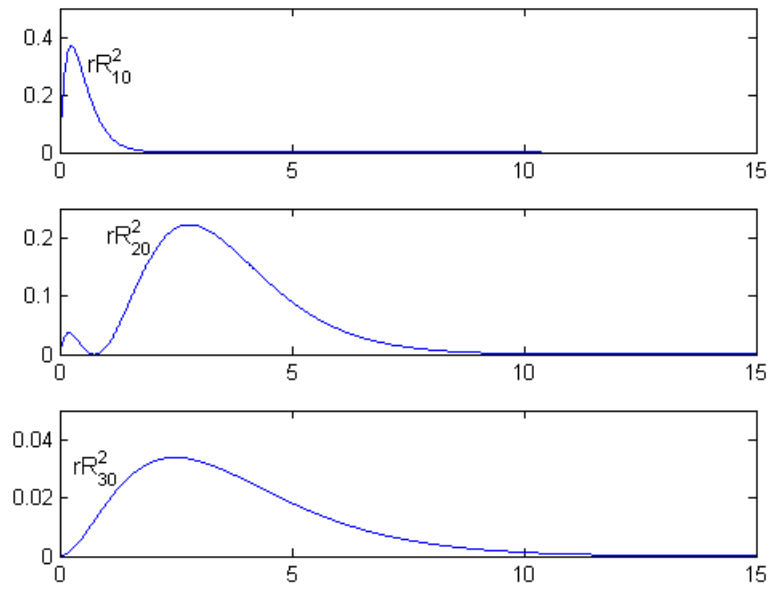
$$\Psi_{n,m}(r) = \sqrt{\frac{\alpha_n}{2\pi} \frac{(n-1-|m|)!}{((|m|+n-1)!)^3 (2n-1)}} \exp\left(-\frac{\alpha_n r}{2}\right) (\alpha_n r)^m L_{n+|m|-1}^{2|m|}(\alpha_n r) \exp(im\phi) \quad (3.9)$$

Het energiespectrum wordt gegeven door:

$$\begin{aligned} n - \frac{1}{2} = \lambda &= e^2 \sqrt{\frac{\mu}{8(2\pi\epsilon_0)^2 |E| \hbar^2}} \\ \iff \frac{8(2\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 (n - \frac{1}{2})^2}{e^4 \mu} &= \frac{1}{|E|} \\ \iff E_n &= \frac{-e^4 \mu}{8(2\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 (n - \frac{1}{2})^2} \end{aligned} \quad (3.10)$$



Figuur 3.2: energiespectrum van het 2D waterstofatoom op een log-schaal.



Figuur 3.3: radiale waarschijnlijkheden van het 2D waterstofatoom. De eenheid gebruikt op de x-as is de Bohrstraal.

## 4 Het ééndimensionaal waterstofatoom

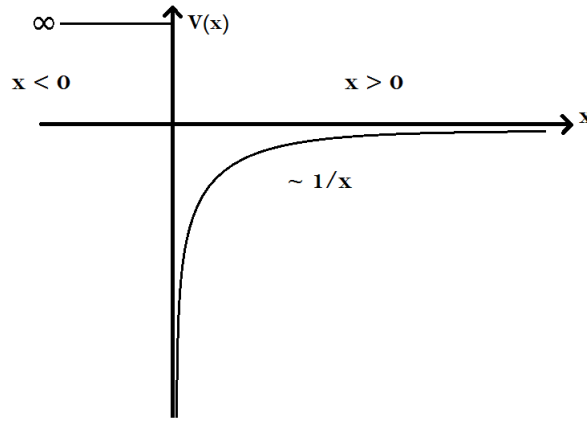
De Schrödingervergelijking voor het elektronprobleem in één dimensie luidt

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|x|} \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (4.1)$$

In dit geval hebben we nog steeds te maken met een Coulombpotentiaal, we gaan deze echter aanpassen. Het geval waar  $x > 0$  en  $x < 0$  scheidt geen moeilijkheid, de samenvoeging van deze twee oplossingen in  $x = 0$  is echter niet zo eenduidig. Immers, wanneer  $x \rightarrow 0$  heeft men dat  $E \rightarrow -\infty$  omdat  $\langle V \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e}{|x||\Psi|^2} = \infty$ . Wanneer men dit wel toelaat, is de bindingsenergie van de grondtoestand  $-\infty$ . De potentiaal wordt gedefinieerd als:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0|x|} & \text{als } x \text{ groter dan nul} \\ \infty & \text{als } x \text{ kleiner of gelijk aan nul} \end{cases}$$

Zodanig dat de golfunctie  $\Psi(x \leq 0) = 0$ .



Figuur 4.1: de aangepaste 1D potentiaal.

### 4.1 Oplossingsmethode

Rest ons nog het geval waar  $x > 0$ . Er wordt overgegaan op een nieuwe variabele  $z = \sqrt{\frac{8m|E|}{\hbar^2}}x$ . Hierdoor wordt vergelijking (4.1):

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{8m|E|}{\hbar^2} \frac{d^2\Psi}{dz^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|z|} \sqrt{\frac{8m|E|}{\hbar^2}} \Psi &= E\Psi \\ \frac{d^2\Psi}{dz^2} + \frac{E}{|E|} \frac{\Psi}{4} + \sqrt{\frac{e^4m}{8(2\pi\epsilon_0)^2\hbar^2|E|}} \frac{\Psi}{|z|} &= 0 \end{aligned}$$

Aangezien het elektron zich in een gebonden toestand bevindt is  $|E| = -E$  en introduceren we de parameter  $\gamma = \sqrt{\frac{e^4m}{8(2\pi\epsilon_0)^2\hbar^2|E|}}$ . Hierdoor wordt bovenstaande uitdrukking:

$$\frac{d^2\Psi}{dz^2} - \frac{\Psi}{4} + \gamma \frac{\Psi}{|z|} = 0 \quad (4.2)$$

Ook deze vergelijking is teruggebracht tot Whittaker's vorm. Deze keer gaat de oplossing van de vergelijking (4.2) echter op een andere manier bepaald worden dan voorheen. Nu wordt

er niet eerst op zoek gegaan naar de asymptotische vorm van de oplossing, maar zal er gebruik gemaakt worden van de algemene uitdrukking voor de vergelijking van Whittaker. Deze luidt:

$$\frac{d^2\Psi}{dz^2} + \left[ \frac{-1}{4} + \frac{\kappa}{z} + \frac{(\frac{1}{4} - \mu^2)}{z^2} \right] \Psi = 0 \quad (4.3)$$

Vergelijkt men de algemene vorm (4.3) met de gevonden vorm (4.2), dan ziet men dat  $\kappa = \gamma$  en dat  $(\frac{1}{4} - \mu^2) = 0 \iff \mu = \pm\frac{1}{2}$ . De oplossingen van de vergelijking van Whittaker zijn echter al bepaald, en worden 'de functies van Whittaker' genoemd. Deze oplossingen zijn opgelijst en kunnen opgezocht worden in wiskundige naslagwerken zoals [1]. Hier vindt men als oplossing:

$$W_{\kappa,\mu}(z) = \exp\left(\frac{-z}{2}\right) z^{(\frac{1}{2}+\mu)} U\left(\frac{1}{2} + \mu - \kappa, 1 + 2\mu, z\right)$$

Waar  $U(\frac{1}{2} + \mu - \kappa, 1 + 2\mu, z)$  bekend staat als de functie van Tricomi. In [1] vindt men echter ook een verband tussen de functie van Tricomi en de veralgemeende Laguerre polynomen. Namelijk:

$$U(-n, \alpha + 1, z) = (-1)^n n! L_n^{(\alpha)}(z)$$

Men heeft dat  $-n = \frac{1}{2} + \mu - \kappa$  en  $1 + 2\mu = \alpha + 1$ . Men bekomt:

$$W_{n+\mu+\frac{1}{2},\mu}(z) = \exp\left(\frac{-z}{2}\right) z^{(\frac{1}{2}+\mu)} (-1)^{(n)} n! L_n^{(2\mu)}(z)$$

Voor bovenstaande vergelijking (4.2) wordt dit:

$$W_{n+1,\frac{1}{2}}(z) = \exp\left(\frac{-z}{2}\right) z (-1)^{(n)} n! L_n^1(z)$$

Met  $n \geq 0$ .

## 4.2 Energiespectrum en golffuncties

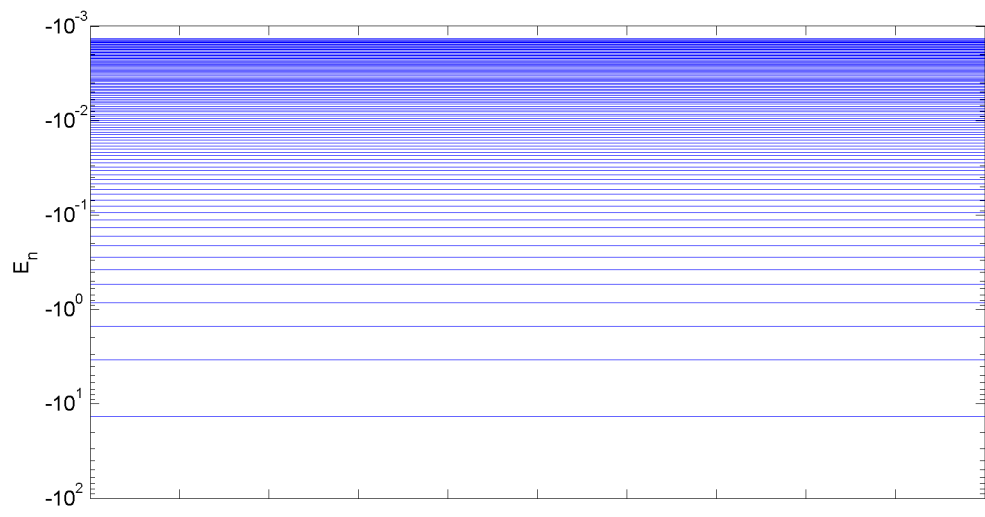
Wegens de eis van normalisatie,  $\int_0^\infty dz |\Psi(z)|^2 = 1$ , verandert echter de voorfactor nog. Kleine aanpassingen aan de driedimensionale normalisatieconstante geeft deze voor het ééndimensionale geval. Voor  $z > 0$ :

$$\Psi_{n+1,\frac{1}{2}}(z) = \sqrt{\sqrt{\frac{8m|E_n|}{\hbar^2}} \frac{(n-1)!}{2n(-1)^n(n!)^5}} \exp\left(\frac{-z}{2}\right) z L_n^1(z) \quad (4.4)$$

Waar  $n \geq 0$  en dus  $\gamma \geq 1$ . De uitdrukking voor de energie wordt dan:

$$\gamma = \sqrt{\frac{e^4 m}{8(2\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 |E|}}$$

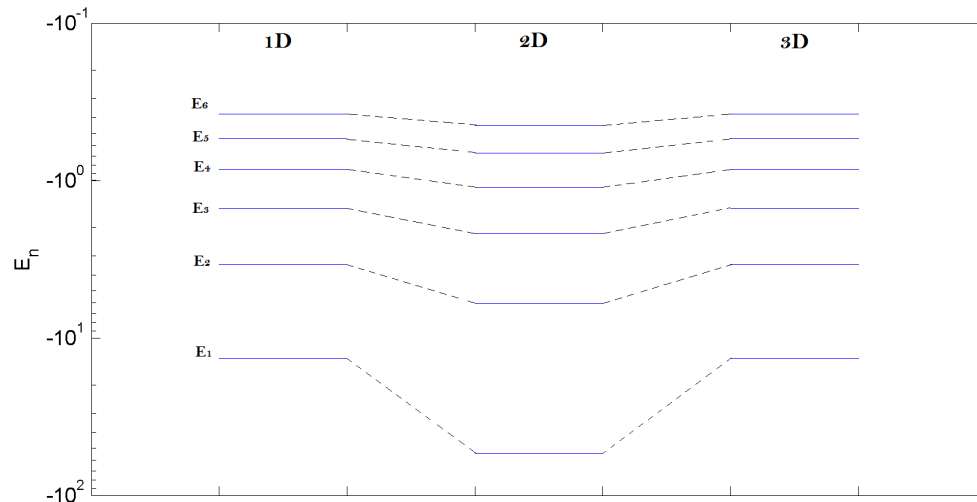
$$E_\gamma = \frac{-e^4 m}{8(2\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 \gamma^2}$$



Figuur 4.2: energiespectrum van het 1D watersotfatom op een log-schaal.

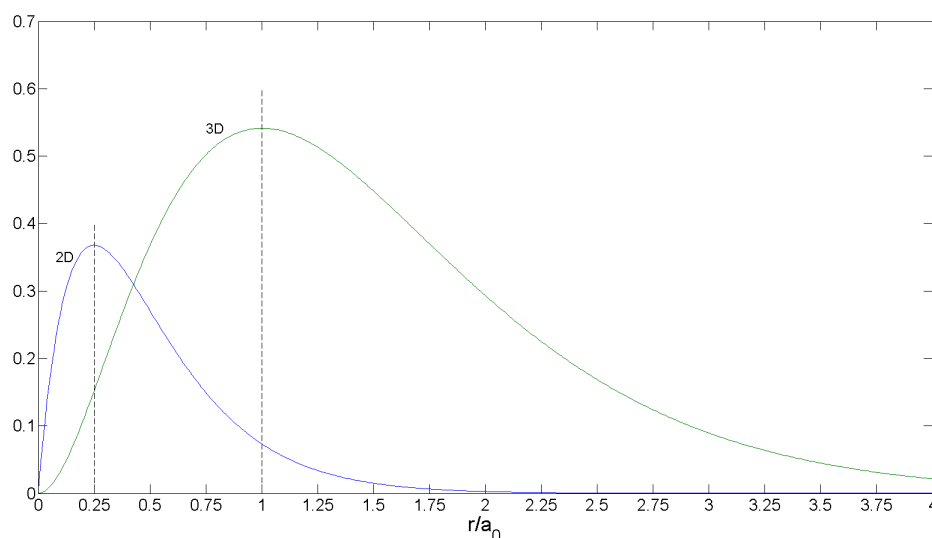
## 5 Oplossingen vergelijken en bespreken

Wanneer men de bekomen energiespectra met elkaar vergelijkt, valt op dat deze in het 3D en 1D geval identiek zijn. Wanneer men artikels raadpleegt, spreekt men echter in het 1D H-atoom over een bindingsenergie van  $-\infty$  voor het elektron in de grondtoestand. Het verschil in resultaat is te wijten aan de aanpassing die gemaakt werd bij de 1D-potentiaal. De potentiaalfunctie was daar oneindig in het punt  $x = 0$ , wat de reden is waarom de bindingsenergie in dat geval  $-\infty$  is. Ook ligt de 2D-nulpuntsenergie vier keer lager dan deze van het 3D waterstofatoom. Het elektron in de grondtoestand zal dus sterker gebonden zijn in het 2D geval.



Figuur 5.1: de energieniveaus van de grondtoestand en de eerste vijf geëxciteerde toestanden voor het 1D, 2D en 3D waterstofatoom. (log-schaal)

In grafiek (5.2) zijn de 2D -en 3D-radiale waarschijnlijkheidsdichtheden van de grondtoestand uitgezet. Deze functie piekt in het driedimensionale waterstofatoom bij de Bohrstraal, terwijl deze in het 2D-geval piekt bij  $\frac{1}{4}$  Bohrstraal. Anders gezegd, de dichtheid van de 2D-elektronwolk (die geassocieerd wordt met de waarschijnlijkheidsverdeling) is naar de kern toe verschoven.



Figuur 5.2: de radiale waarschijnlijkheidsdichtheden voor de grondtoestand voor het 2D en 3D waterstofatoom. De grafieken bereiken hun piekwaarde bij een verschillende straal.

## 6 Elektronen op een bulk vloeibaar helium

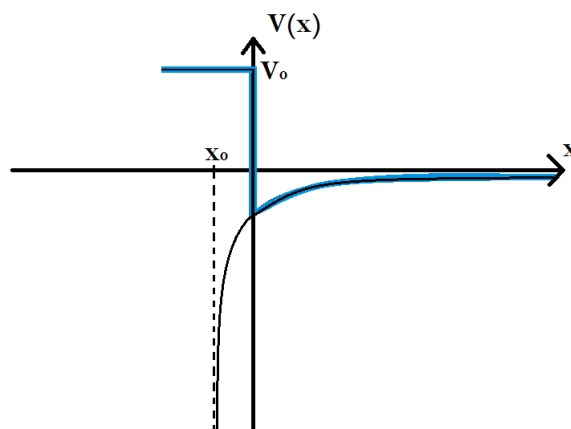
Wanneer elektronen boven vloeibaar helium gebracht worden, polariseren deze het medium. Hierdoor ontstaat een attractieve kracht. De potentiaal hiervoor verantwoordelijk kan bepaald worden door gebruik te maken van de methode van de beeldlading. De polarisatie veroorzaakt door een elektron op een afstand  $x$  van het medium, is mathematisch analoog aan de polarisatie veroorzaakt door een positieve lading in het medium. Deze beeldlading brengt een elektrostatistische potentiaal tot stand, i.e. een Coulomb potentiaal. Deze heeft als grootte  $V(x) = \frac{\delta e}{x+x_0}$ , met  $\delta = \frac{(\epsilon_{He}-\epsilon_0)}{4(\epsilon_{He}+\epsilon_0)}$ . Waar  $\epsilon_0$  en  $\epsilon_{He}$  respectievelijk de diëlektrische constante van vacuüm ( $\simeq 1$ ) en van helium ( $\simeq 1.0572$ ) voorstellen.  $x_0$  is de positie van de beeldlading in het medium. Door de attractieve kracht bewegen de elektronen naar het medium toe. Aangezien echter helium een edelgas is, zal een repulsieve kracht ontstaan ten gevolge van het Pauli exclusieprincipe. Een extra elektron zou namelijk een toename in energie voor het atoom betekenen. Op deze manier een wisselwerking tussen twee krachten. De repulsieve kracht is veel sterker dan de attractieve, maar heeft een korte dracht. Voor  $x \leq 0$  kan men dus stellen dat het elektron enkel de potentiaal ten gevolge van het Pauli exclusieprincipe ondervindt. Een goede benadering voor de potentiaalfunctie wordt gegeven door:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{als } x \text{ kleiner of gelijk aan nul} \\ \frac{\delta e}{x} & \text{als } x \text{ groter is dan nul} \end{cases} \quad (6.1)$$

Dit probleem is equivalent aan dit van een ééndimensionale waterstofaatom waarvan de kernlading gereduceerd is. Er zijn echter kleine verschillen tussen de experimenteel en theoretische bepaalde resultaten. Oorzaken hiervan zijn onder meer een niet perfect glad helium oppervlak en een niet oneindige potentiaal voor  $x \leq 0$ . Om te corrigeren voor deze effecten werden er verscheidene andere potentialen voorgesteld i.p.v.(6.1). Onder meer:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{als } x \text{ kleiner of gelijk aan nul} \\ \frac{\delta e}{x+x_0} & \text{als } x \text{ groter is dan nul} \end{cases} \quad (6.2)$$

Waar de potentiaal  $V_0$  experimenteel bepaald is als 1.04 eV, en waar het effectieve heliumoppervlak een afstand  $x_0$  in het helium ligt.



Figuur 6.1: de potentiaal  $V(x)$  (blauw), samengesteld uit de potentiaal voor  $x \leq 0$  en  $x > 0$ .



## 6.1 Uitwerking

Voor  $x \leq 0$  is de Schrödingervergelijking voor een elektron van de vorm:

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - eV_0 \Psi &= E\Psi \\ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + (E + eV_0)\Psi &= 0 \end{aligned} \quad (6.3)$$

Stellen we  $E' = E + 1eV$ . En brengt men de tweede term over naar het rechterlid, dan bekomt men onderstaande differentiaalvergelijking:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{-2mE'}{\hbar^2} \Psi$$

Met als algemene oplossing:  $\Psi(x) = C \exp(-\kappa x) + D \exp(\kappa x)$ . Waar  $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E')}$ . Omdat de golf functie eindig moet blijven voor  $x \rightarrow \infty$ , eisen we dat  $D = 0$ . De oplossing wordt dan:

$$\Psi(x) = C \exp(-\kappa x) \quad (6.4)$$

Voor  $x > 0$  luidt de uitdrukking voor de Schrödingervergelijking:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\delta e^2}{x + x_0} \Psi = E\Psi \quad (6.5)$$

Substitutie  $z = \alpha_n(x + x_0)$  levert:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} - \frac{\Psi}{4} + \frac{\gamma}{z} \Psi = 0$$

Met  $\gamma = \sqrt{\frac{m(\delta e^2)^2}{2|E|\hbar^2}}$  en  $\alpha_n = \sqrt{\frac{8m|E|}{\hbar^2}}$ . Deze vergelijking heeft als algemene oplossing [1]:

$$\Psi(z) = Bz \exp\left(\frac{-z}{2}\right) U(1 - \gamma, 2, z) \quad (6.6)$$

Waar  $U$  één van de twee confluerende hypergeometrische functies is. Het is deze die behouden blijft wegens de convergentie eis op oneindig. De energie-eigenwaardevergelijking wordt nu bekomen door de eis dat  $\Psi$  en  $\Psi'$  continu moeten zijn in  $x = 0$ .

Voor  $x < 0$  heeft men:

$$\Psi(0) = C \quad (6.7)$$

$$\Psi'(0) = -\kappa C \quad (6.8)$$

Voor  $x > 0$  heeft men:

$$\Psi(0) = B\alpha x_0 \exp\left(\frac{-\alpha x_0}{2}\right) U(1 - \gamma, 2, \alpha x_0) \quad (6.9)$$

$$\Psi'(0) = B\alpha x_0 \exp\left(\frac{-\alpha x_0}{2}\right) \left[ \left(1 - \frac{\alpha x_0}{2}\right) U(1 - \gamma, 2, \alpha x_0) + x_0(\gamma - 1) U(2 - \gamma, 3, \alpha x_0) \right] \quad (6.10)$$

Waarbij de laatste term in uitdrukking (6.10) bekomen werd door gebruik te maken van de uitdrukking (13.4.21) voor de afgeleide van U in [1]. Men kan de vier vergelijkingen nu combineren:

$$\begin{aligned} \frac{(6.8)}{(6.7)} &= \frac{(6.10)}{(6.9)} \\ -\kappa &= \left(1 - \frac{\alpha x_0}{2}\right) + \frac{U(2 - \gamma, 3, \alpha x_0)}{U(1 - \gamma, 2, \alpha x_0)} \\ F(E) &= \kappa + \left(1 - \frac{\alpha x_0}{2}\right) + x_0(\gamma - 1) \frac{U(2 - \gamma, 3, \alpha x_0)}{U(1 - \gamma, 2, \alpha x_0)} \end{aligned} \quad (6.11)$$

De nulpunten van de functie F(E) zijn de energie-eigenwaarden. Deze functie kan echter herschreven worden door opnieuw gebruik te maken van de relatie tussen U en de Laguerre polynomen[1]. Men bekomt:

$$\begin{aligned} F(E) &= \kappa + \left(1 - \frac{\alpha x_0}{2}\right) + x_0(\gamma - 1) \frac{(-1)^{\gamma-2}(\gamma - 2)!L_{\gamma-2}^{(2)}(\alpha x_0)}{(-1)^{\gamma-1}(\gamma - 1)!L_{\gamma-1}^{(1)}(\alpha x_0)} \\ F(E) &= \kappa + \left(1 - \frac{\alpha x_0}{2}\right) - x_0 \frac{L_{\gamma-2}^{(2)}(\alpha x_0)}{L_{\gamma-1}^{(1)}(\alpha x_0)} \end{aligned} \quad (6.12)$$

## 6.2 Resultaten

Wanneer (6.12) geplot zou worden, verkrijgt men een oscillerende functie. De nulpunten van deze functie leveren de discrete energieniveaus. Het plotten van deze functie bleek echter niet triviaal, waardoor de oplossingen niet meer bekomen zijn binnen het opgelegde tijds kader. Hierdoor kan er geen vergelijking worden gemaakt tussen dit energiespectrum en het energiespectrum gevonden bij het ééndimensionale waterstofatoom.

## 7 Besluit

De analytisch bekomen golffuncties en energiespectra, zijn met elkaar vergeleken in hoofdstuk 5. Door de aangepaste 1D-potentiaal is het 1D-energiespectrum gelijk aan dit van het 3D-atoom. Uit het energiespectrum van het 2D-atoom concludeert men dat het elektron sterker gebonden is aan de kern. Als men de radiale waarschijnlijkheden grafisch weergeeft wordt dit bevestigd, de grafiek piekt in het 2D dicht bij de oorsprong. Dit wijst op een verschuiving van de elektronenwolk naar de kern toe. Als laatste werd getracht een systeem van elektronen gebracht op een bulk vloeibaar helium op een analoge wijze als voorheen, te beschrijven. Het energiespectrum van dit systeem, gebruikmakend van potentiaal (6.1), is gelijk aan dit van het 1D-atoom met een gereduceerde kernlading. Experimenteel zijn er echter verschillen opgemerkt, waardoor andere potentialen, waaronder (6.2) werden voorgesteld. Het is dan ook deze potentiaal waarvan uit gegaan werd in de berekeningen. De golffunctie en zijn afgeleide zijn continu, wat in rekening werd gebracht wanneer de oplossing voor  $x > 0$  en  $x < 0$  werden samengebracht. Men verkrijgt twee vergelijkingen die kunnen samengevoegd worden tot één, en men bekomt de energiefunctie. Deze energiefunctie is een oscillerende functie, waarvan de nulpunten de discrete energiewaarden van het gebonden systeem bevat. Er werd een uitdrukking bekomen voor deze functie, de nodes bepalen bleek echter niet triviaal. De vergelijking met het 1D-atoom kon hierdoor binnen het opgelegde tijds kader niet meer worden gemaakt.

# Bibliografie

- [1] M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs, and Mathematical tables*, (1972), p. 505,510.
- [2] Siegmund Brandt / Hans Dieter Dahmen, *The picture book of quantum mechanics*, second edition, (1995) p.221 - 252.
- [3] F. Peeters, *Inleiding kwantummechanica*, cursus UA, p. 85-102.
- [4] P. Scheunders, *Klassieke veldentheorie*, cursus UA, p. 23-31.
- [5] B. Zaslav and Melvin E. Zandler, *Two-Dimensional Analog to the Hydrogen Atom*, American Journal of Physics, (December 1967), Volume 35, Issue 12, pp. 1118.
- [6] R. Loudon, *One-Dimensional Hydrogen Atom*, American Journal of Physics, (December 1959), Volume 27, Issue 9, pp. 649.
- [7] O. Hipólito and J.R.D de Felício, *Electron Bound States On Liquid Helium*, Solid State Communications, Vol. 28, pp. 365-368.
- [8] J.T. Devreese and F.M. Peeters, North Atlantic Treaty Organization, Scientific Affairs Division, *The Physics of the Two-Dimensional Electron Gas*, Plenum Press, (1987), p. 394-396.
- [9] Linus Pauling and E. Bright Wilson, *Introduction Quantum Mechanics With Applications to Chemistry*, international student edition, p. 448-452.

