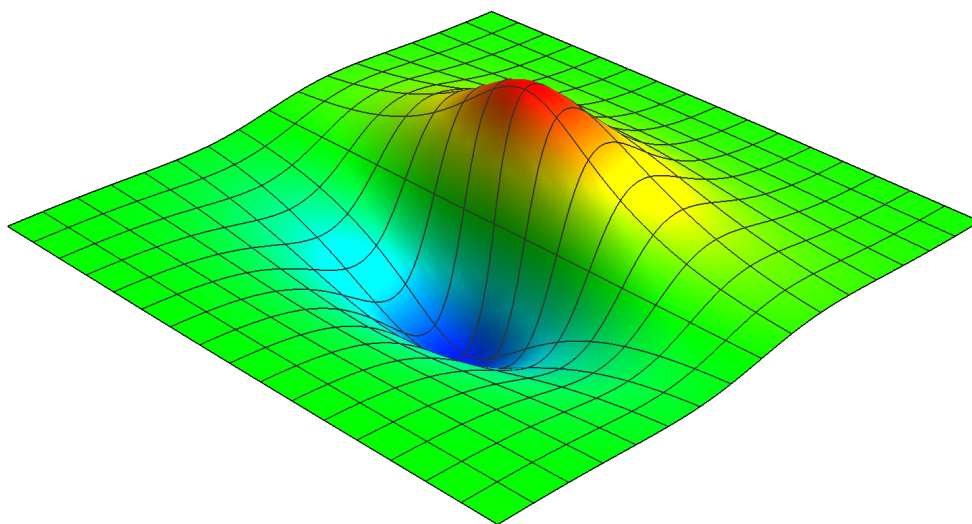


Bachelorproef

Anisotroop waterstofatoom in twee dimensies



Auteur:

Thomas Rey
Thomas.rey@student.uantwerpen.be

Promotor:

Prof. Dr. Peeters

Begeleiders:

Robbe Van Pottelberge
Dr. Ben Van Duppen

Abstract

In de fysica was het bestuderen van twee dimensionale structuren voor een lange tijd geheel academisch. Grafeen, een 2 dimensionaal materiaal opgebouwd uit koolstof, werd al voor de laatste 70 jaar bestudeerd. In deze periode werd er op basis van thermodynamische theorieën geargumenteerd dat een structuur als grafeen niet stabiel kan zijn. In 2005 kreeg de Nederlandse wetenschapper André Geim de Nobelprijs voor zijn studie naar grafeen. De puur academische studie krijgt nu plots zeer reële toepassingen [1]. Sindsdien is de interesse vanuit de wetenschappelijke wereld exponentieel toegenomen. Er zijn echter ook andere 2 dimensionale materialen. Deze andere materialen kunnen sterk verschillende eigenschappen hebben, afhankelijk van hun structuur. Er wordt volop gezocht naar nieuwe technologische toepassingen. Het kunnen manipuleren en begrijpen van verschillende materiaaleigenschappen is hiervoor essentieel. In specifieke materialen kan de anisotropie in effectieve massa gemanipuleerd worden[2]. In deze thesis zal het effect van een anisotropie in de effectieve massa onderzocht worden. Specifieker zal het effect van de effectieve massa's m_x en m_y op de binding van een positief geladen onzuiverheid en een elektron onderzocht worden.

Er zal vertrokken worden van het isotrope waterstofatoom, dit probleem is volledig analytisch oplosbaar. Daarna zal het anisotrope probleem met drie verschillende technieken opgelost worden: het variatie principe, storingstheorie en numeriek exact.

1 Inleiding

In deze thesis zal het anisotrope waterstofatoom in 2 dimensies opgelost worden. Dit is een twee deeltjes probleem met een Coulomb interactie tussen de twee deeltjes. De positie van de deeltje wordt benoemd met de vectoren $\mathbf{r}_1$ en $\mathbf{r}_2$ met respectievelijke impulsen $\mathbf{p}_1$ en $\mathbf{p}_2$ met massa's m_1 en m_2 .

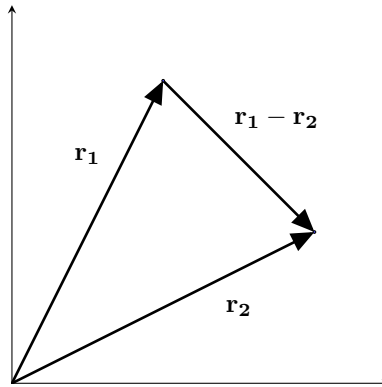


Figure 1: Schematische voorstelling van de plaatsvectoren van de twee deeltjes

Het anisotrope 2D waterstofatoom kan teruggevonden worden in verschillende situaties. Wanneer er in een anisotroop 2D materiaal (zoals fosforeen) een positief geladen onzuiverheid zit kan er een elektron worden gebonden aan deze onzuiverheid. Dit paar gedraagt zich dan zoals het anisotrope waterstofatoom. Andere voorbeelden zijn excitonen in een anisotroop 2D materiaal. Een exciton is een gebonden elektron-gat paar. Een specifiek elektron-gat paar kan nooit lang bestaan, het elektron zal uiteindelijk het gat opvullen.

Een eerste stap is het oplossen van het isotrope waterstofatoom, dit probleem heeft de volgende hamiltoniaan

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|),$$

met

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}.$$

Door over te gaan naar massacentrum coördinaten wordt het probleem opgesplitst in twee problemen met 1 deeltje: een vrij deeltje en een deeltje in een Coulomb potentiaal

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}) \right].$$

De hamiltoniaan is gesplitst in een hamiltoniaan voor het massacentrum en een hamiltoniaan voor de relatieve posities van de deeltjes. Deze problemen zijn beiden analytisch oplosbaar. Voor de relatieve hamiltoniaan zullen enkel gebonden toestanden onderzocht worden, dit wil zeggen dat de energie negatief moet zijn.

De hamiltoniaan van het massacentrum geeft als oplossing

$$\begin{aligned}\Psi_{CM}(\mathbf{R}) &= Ae^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}, \\ E &= \frac{\hbar^2 \mathbf{K}^2}{2M},\end{aligned}$$

met A een normeringsfactor. De hamiltoniaan van het relatieve probleem geeft

$$\begin{aligned}E_n &= -\frac{1}{2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{1}{(n-1/2)^2}, \\ \psi_{n,m}(r, \phi) &= C_{n,m} e^{im\phi} * e^{-\alpha_n r} * (2\alpha r)^{|m|} * L_{n-|m|-1}^{2|m|}(2\alpha_n r), \\ \alpha_n &= \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{1}{n - \frac{1}{2}}, \\ n &= 1, 2, 3, \dots \\ m &= -n + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, n - 1\end{aligned}$$

met $C_{n,m}$ een normeringsfactor en $L_{n-|m|-1}^{2|m|}(\rho)$ de geassocieerde veelterm van Laguerre.

De totale oplossing kan bekomen worden door de energieën van de twee afzonderlijke problemen op te tellen en de golf functies te vermenigvuldigen met elkaar.

Het anisotrope probleem met

$$H = \frac{p_{1,x}^2}{2m_{1,x}} + \frac{p_{1,y}^2}{2m_{1,y}} + \frac{p_{2,x}^2}{2m_{2,x}} + \frac{p_{2,y}^2}{2m_{2,y}} + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$$

is niet meer analytisch oplosbaar. Ook dit probleem kan opgesplitst worden door het kiezen van een goed coördinatenstelsel. De totale hamiltoniaan wordt gereduceerd naar een hamiltoniaan voor een anisotroop vrij deeltje en een anisotrope hamiltoniaan met een Coulomb potentiaal

$$H = \frac{P_x^2}{2M_x} + \frac{P_y^2}{2M_y} + \left[\frac{p_x^2}{2m_x} + \frac{p_y^2}{2m_y} + V(r) \right].$$

In de thesis zal er vooral aandacht besteed worden aan het probleem met de Coulomb potentiaal. Dit probleem zal benaderend opgelost worden met behulp van het variatieprincipe, storingstheorie en numerieke methoden.

In het isotrope probleem wordt er gewerkt met de gereduceerde massa μ , deze wordt opgesplitst in de x- en y-richting voor het anisotrope probleem. De gereduceerde massa's m_x en m_y van het anisotroop probleem moeten in verband gebracht worden met de gereduceerde massa μ van het isotroop probleem. Dit is belangrijk omdat het anders niet mogelijk is de energie van het isotroop probleem te vergelijken

met de energie van het anisotroop probleem. In deze thesis wordt er gekozen om $\mu = \sqrt{m_x m_y}$ te gebruiken.

Het relatieve deel van de hamiltoniaan geeft ellipsen voor constante kinetische energieën (zie figuur (2)), het is daarom nuttig een parameter te introduceren die deze ellips beschrijft.

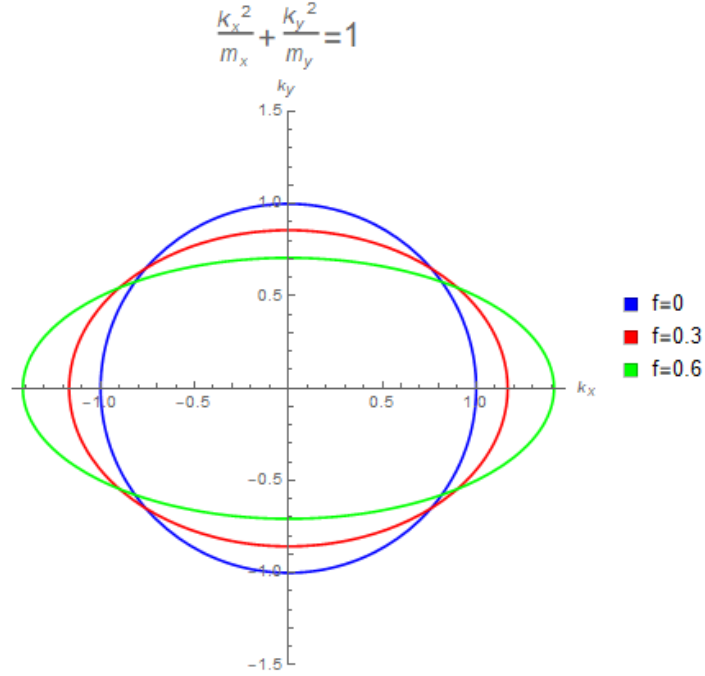


Figure 2: Verloop van k_x en k_y voor constante kinetische energie.

Er wordt gekozen om te werken met de *flattening* (afplatting) f [3]. Om de symmetrie te behouden wordt er gewerkt met de derde flattening. Deze derde flattening wordt meestal genoteerd als n of (f''). Beide opties zouden verwarring veroorzaken doorheen de thesis. Er wordt daarom geopteerd om te werken met het symbool f met als definitie

$$f = \frac{a - b}{a + b},$$

met a de halve lange as en b de halve korte as van een ellips. De parameter f beschrijft hoe hard een ellips wordt samengedrukt. In de context van de thesis zal a vervangen worden door m_x en b door m_y

$$f = \frac{m_x - m_y}{m_x + m_y}.$$

In figuur (3) wordt het verloop van m_x en m_y getoond in functie van f . Voor sommige berekeningen zal er gewerkt worden met m_x en m_y omdat dit intuïtiever is. Alle resultaten zullen wel geschreven worden in functie van f .

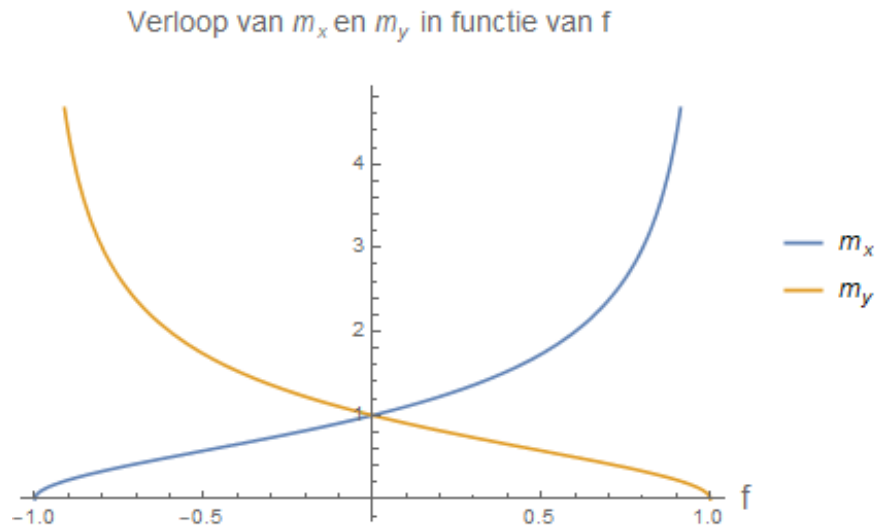


Figure 3: Het verloop van m_x en m_y in functie van f .

De thesis zal zich vooral beperken tot de grondtoestand en de eerst geëxciteerde toestanden. In het onderdeel van de numerieke berekeningen zullen hogere ordes wel kort aan bod komen.

2 Isotroop waterstofatoom in 2D

2.1 Afleiding

2.1.1 Algemene hamiltoniaan en oplossing massacentrum

De afleiding vertrekt met de algemene hamiltoniaan voor twee deeltjes:

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|).$$

Deze hamiltoniaan wordt omgevormd naar een nieuwe hamiltoniaan die eenvoudiger is om op te lossen:

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}) \right], \quad (1)$$

met

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \\ \mathbf{p} &= \frac{m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2}{m_1 + m_2} = \mu \left(\frac{\mathbf{p}_1}{m_1} - \frac{\mathbf{p}_2}{m_2} \right), \\ \mathbf{R} &= \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} = \mu \left(\frac{\mathbf{r}_1}{m_2} + \frac{\mathbf{r}_2}{m_1} \right), \\ \mathbf{P} &= \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \\ \mu &= \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}, \\ M &= m_1 + m_2. \end{aligned} \quad (2)$$

De hamiltoniaan van vergelijking (1) kan geïnterpreteerd worden als de som van twee verschillende hamiltonianen. Deze opsplitsing maakt het mogelijk de golfvergelijking te schrijven als een product van twee golfvergelijkingen: een golfvergelijking voor het massacentrum en een golfvergelijking voor de relatieve beweging van de twee deeltjes. De vergelijking voor het deel met het massa centrum komt overeen met de vergelijking voor een vrij deeltje. Deze oplossingen zijn gekend:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= \psi_{CM}(\mathbf{R}) * \psi_{rel}(\mathbf{r}), \\ \psi_{CM}(\mathbf{R}) &= A e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}}, \\ E &= \frac{\hbar^2 \mathbf{K}^2}{2M}. \end{aligned}$$

2.1.2 Relatieve coördinaten

Voor notationale eenvoud wordt $\psi_{rel}(\mathbf{r})$ vervangen door $\psi(\mathbf{r})$. De tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking geeft

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}).$$

De laplaciaan wordt uitgeschreven in poolcoördinaten

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

De golfvergelijking wordt opgesplitst in een radiaal en hoek gedeelte, om zo scheiding van veranderlijke toe te passen

$$\psi(r, \phi) = R(r) \Phi(\phi),$$

$$\frac{\partial^2 \Phi(\phi)}{\partial \phi^2} \frac{1}{\Phi(\phi)} = -c, \quad (3)$$

$$\frac{1}{R(r)} \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + r^2 \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) \right] = c. \quad (4)$$

Vergelijking (3) wordt als eerste opgelost omdat dit een eenvoudige oplossing heeft. Voor de oplossing wordt gebruik gemaakt van periodieke randvoorwaarden. De golf functie die bekomen wordt is gedefinieerd op een constante factor na. Deze factor wordt voorlopig weggelaten en zal later meegenomen worden in de normeringsfactor.

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \Phi(\phi)}{\partial \phi^2} &= -c \Phi(\phi) \\ \Phi(\phi) &= e^{\pm i \sqrt{c} \phi} \\ \Phi(\phi) &= \Phi(\phi + 2\pi) \\ \sqrt{c} &= m, m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots\end{aligned}$$

Vervolgens zal vergelijking (4) opgelost worden

$$\frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) R(r) + r \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial R}{\partial r} \right) = c * R(r). \quad (5)$$

Voor de potentiaal wordt de Coulomb potentiaal gebruikt: $V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$, met e de elementaire lading, Z het aantal ladingen in de kern en ϵ_0 de permittiviteit. Verder worden onderstaande substituties gebruikt om de differentiaalvergelijking eenvoudiger te maken

Dimensieloze parameter $\rho = 2\alpha r = \frac{\sqrt{8\mu|E|}}{\hbar} r$,

Energie $E = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu}$,

$\lambda = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|E|} \frac{\alpha}{2} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mu}{\alpha \hbar^2}$.

Na het doorvoeren van de substituties krijgt men volgende differentiaalvergelijking

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

De vergelijking $R(\rho) = e^{-\rho/2} * \rho^{|m|} * H(\rho)$ wordt voorgesteld als oplossing. De differentiaalvergelijking moet nu opgelost worden naar $H(\rho)$.

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

De differentiaalvergelijking zal opgelost worden met de methode van Frobenius, $H(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$. De differentiaalvergelijking voldoet aan Fuchs' theorema, en is dus op te lossen met behulp van deze methode.

$$\begin{aligned}0 &= \rho H(\rho)'' + [1 + 2|m| - \rho] H(\rho)' + \left(\lambda - \frac{1}{2} - |m| \right) H(\rho) \\ H(\rho) &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \\ 0 &= \sum_{k=0}^{\infty} [a_k k(k-1) \rho^{k-1} + a_k k(1 + 2|m|) \rho^{k-1} - k a_k \rho^k + a_k \left(\lambda - \frac{1}{2} - |m| \right) \rho^k] \\ 0 &= \sum_{k=0}^{\infty} [(k+1)(k+1+2|m|) a_{k+1} + \left(\lambda - \frac{1}{2} - |m| - k \right) a_k] \rho^k \\ \Rightarrow a_{k+1} &= \frac{\lambda - \frac{1}{2} - |m| - k}{(k+1)(k+1+2|m|)} a_k\end{aligned}$$

Voor grote waarden van k zal deze reeks convergeren naar een exponentiële functie. Dit is geen fysische oplossing, een golf functie moet altijd normeerbaar zijn. Hieruit wordt afgeleid dat λ slechts enkele discrete waarden kan aannemen zodat de reeks op een bepaalde waarde van k wordt afgebroken

$$\begin{aligned}\lambda &= k + |m| + \frac{1}{2}, \\ \lambda &= n' + \frac{1}{2} = n - \frac{1}{2},\end{aligned}$$

met

$$\begin{aligned} n &\in N_0, n = n' + 1, n - 1 \geq |m| \\ \Rightarrow n &= 1, 2, 3, .. \end{aligned} \quad (6)$$

$$m = -n + 1, .., -1, 0, 1, ..., n - 1. \quad (7)$$

Aangezien er een verband bestaat tussen λ en de energie neemt ook de energie enkel bepaalde discrete waarden aan

$$E_n = -\frac{1}{2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{1}{(n - \frac{1}{2})^2}, \quad (8)$$

$$\alpha_n = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{1}{n - \frac{1}{2}}. \quad (9)$$

De reeks die verkregen werd door deze methode is gelijk aan de geassocieerde veelterm van Laguerre

$$H(\rho) = L_{n-|m|-1}^{2|m|}(\rho). \quad (10)$$

n	m	$L_{n- m -1}^{2 m }(\rho)$
1	0	1
2	0	$-\rho+1$
2	± 1	1
3	0	$\frac{1}{2}\rho^2 - 2\rho + 1$
3	± 1	$-\rho+3$
3	± 2	1
4	0	$-\frac{1}{6}(-\rho^3 + 9\rho^2 - 18\rho + 6)$
4	± 1	$\frac{1}{2}\rho^2 - 4\rho + 6$
4	± 2	$-\rho+5$
4	± 3	1

Table 1: Waarden van de geassocieerde Laguerre veeltermen voor verschillenden waarden van n en m

Nu de golfvergelijking van het radiale deel bepaald is, is het volledige probleem opgelost

$$\psi_{n,m}(\rho, \phi) = C_\rho e^{im\phi} * e^{-\rho/2} * \rho^{|m|} L_{n-|m|-1}^{2|m|}(\rho) \quad (11)$$

of

$$\psi_{n,m}(r, \phi) = C_r e^{im\phi} * e^{-\alpha_n r} * (2\alpha r)^{|m|} * L_{n-|m|-1}^{2|m|}(2\alpha_n r). \quad (12)$$

In vergelijking (11) en (12) staat nog een integratieconstante die bepaald kan worden door te normeren.

n	m	C_r	C_ρ
1	0	$\alpha_1 \sqrt{\frac{2}{\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
2	0	$\alpha_2 \sqrt{\frac{2}{3\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{6\pi}}$
2	1	$\alpha_2 \sqrt{\frac{1}{3\pi}}$	$\frac{1}{2\sqrt{3\pi}}$
3	0	$\alpha_3 \sqrt{\frac{2}{5\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{10\pi}}$
3	1	$\alpha_3 \sqrt{\frac{1}{15\pi}}$	$\frac{1}{2\sqrt{15\pi}}$
3	2	$\frac{\alpha_3}{2} \sqrt{\frac{1}{15\pi}}$	$\frac{1}{4\sqrt{15\pi}}$

Table 2: Enkele normeringsconstanten voor vergelijkingen (11) en (12).

2.2 Resultaten 2D

Het isotrope probleem is volledig opgelost op een analytische manier. De verschillende energieniveaus werden bekomen door een restrictie op te leggen in de methode van Frobenius. Deze restrictie is noodzakelijk om fysische oplossingen te bekomen in de reeksontwikkeling. De eis voor fysische oplossingen geeft de discretisatie van de energieniveaus

$$E_n = -\frac{1}{2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{1}{(n - 1/2)^2},$$

$$\alpha_n = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{1}{n - \frac{1}{2}}.$$

De golffunctie werd bekomen met behulp van scheiding van veranderlijken om het radiale probleem en het hoek probleem apart op te lossen. De twee differentiaalvergelijkingen werden daarna opgelost waarbij er voor het radiale probleem gebruik werd gemaakt van een reeksontwikkeling. De algemene oplossing is het product tussen de twee afzonderlijke oplossingen. Ter herinnering wordt nog vermeld dat $\rho = 2\alpha_n r$

$$\psi_{n,m}(\rho, \phi) = C_\rho e^{im\phi} * e^{-\rho/2} * \rho^{|m|} L_{n-|m|-1}^{2|m|}(\rho). \quad (13)$$

In figuur (4) wordt telkens het reële deel van de golffunctie geplot. De golffuncties met negatieve m waarden werden niet geplot. Deze oplossingen verschillen niet in de reële ruimte, in de imaginaire ruimte geeft een tekenwissel in m een vermenigvuldiging met -1

$$\begin{aligned} e^{-im\phi} &= \cos -m\phi + i \sin m\phi, \\ &= \cos m\phi - i \sin m\phi, \\ &= \mathcal{R}(e^{im\phi}) - i \mathcal{I}(e^{im\phi}). \end{aligned}$$

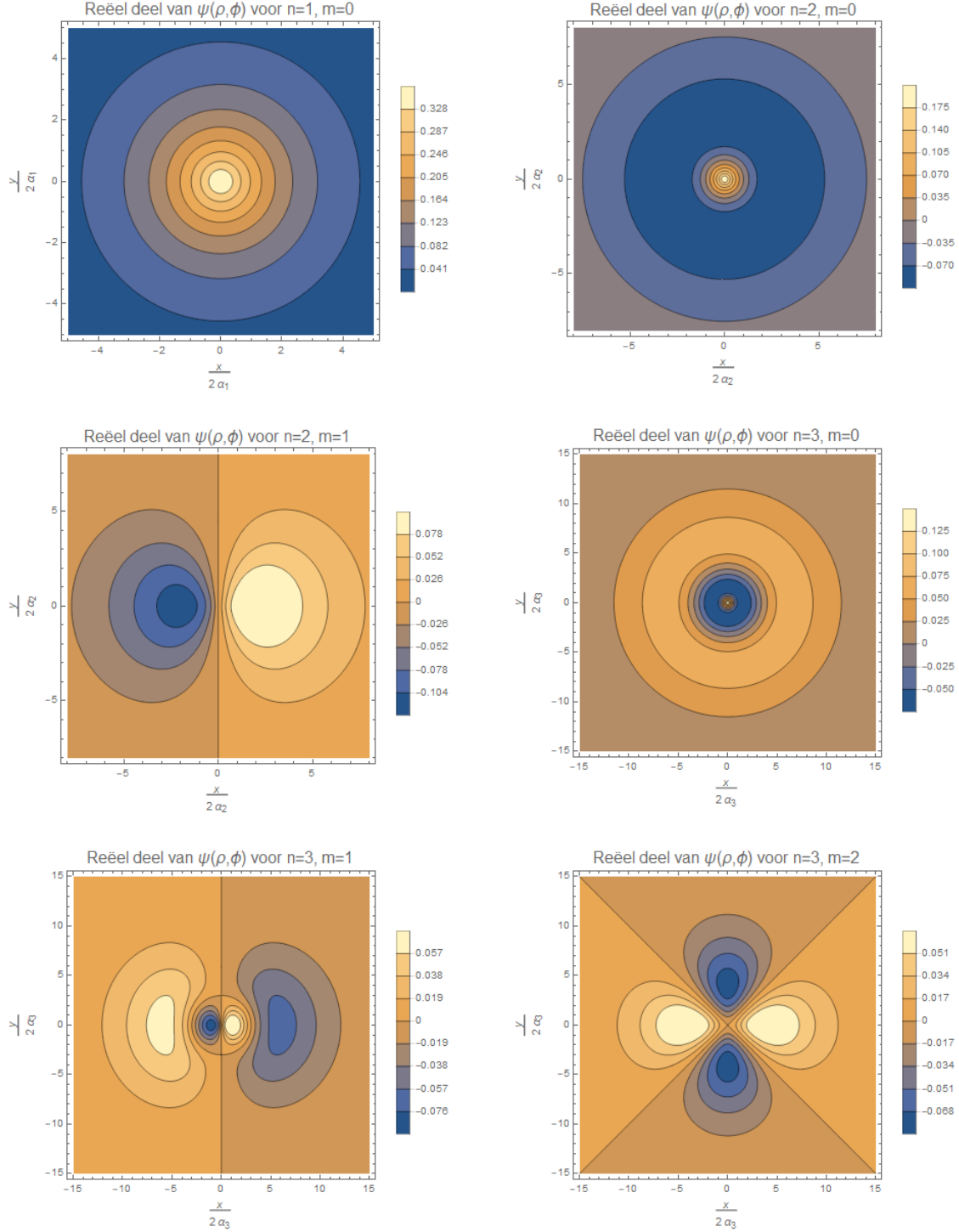


Figure 4: Reëel deel van de golffunctie tot aan $n=3$, negatieve m -waarden werden niet geplot. Een tekenwissel van m verandert niets aan het reëel deel van de golffunctie.

2.3 Vergelijking 3D-2D

Het 3D waterstofatoom is op zeer analoge manier oplosbaar. In dit deel zullen de verschillen tussen de twee oplossingen besproken worden.

Een eerste triviale verschil is een extra dimensie. Het 3D waterstofatoom heeft een extra θ afhankelijkheid. Dit verschil zal niet verder besproken worden.

Het 3D waterstofatoom kan opgelost worden met behulp van scheiding van variabelen. Dit is nuttig

voor de vergelijking, zo is het mogelijk om het radiale deel en hoek deel apart te vergelijken. De oplossing voor het 3D waterstofatoom werd overgenomen van de cursus inleiding kwantummechanica[7]. Hierbij stelt de functie $P_n^m(x)$ de geassocieerde Legendre polynoom voor.

$$\psi_{n,m,l}^{3D}(r, \theta, \phi) = R(r)\Phi(\phi)\Theta(\theta) \quad (14)$$

$$\psi_{n,m,l}^{3D}(r, \theta, \phi) = c_{n,l,m} e^{im\phi} * e^{-\rho/2} * \rho^l * L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) P_l^{|m|}(\cos \theta) \quad (15)$$

met

$$\begin{aligned} c_{n,l,m} & \text{ een normeringsfactor} \\ \rho &= 2\alpha_n r \\ \alpha_n &= \frac{1}{n} \frac{\mu Z e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \\ E_n &= -\frac{1}{2} \left(\frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} \end{aligned} \quad (16)$$

De drie kwantumgetallen hebben volgende grenzen:

$$\begin{aligned} n &\in N_0 \\ l &= 0, 1, \dots, n-1 \\ m &= -l, -l+1, \dots, l-1, l \end{aligned}$$

Bij het vergelijken van de energiewaarden is het al duidelijk dat de energiewaarden niet hetzelfde zijn voor de twee situaties. Dit verschil is vooral groot voor kleine n (zie figuur (5)). De energiewaarden voor het 2D probleem zijn groter in absolute waarde. Het elektron is dus sterker gebonden in het 2D probleem vergeleken met het 3D probleem. Beide energieën convergeren naar nul voor stijgende n waarden. Bijgevolg kan het verschil tussen de energieniveaus van het 2D en 3D probleem willekeurig klein gemaakt worden. Deze opmerking heeft echter minder fysisch belang, de belangrijkste energieniveaus zijn degene met de laagste energie.

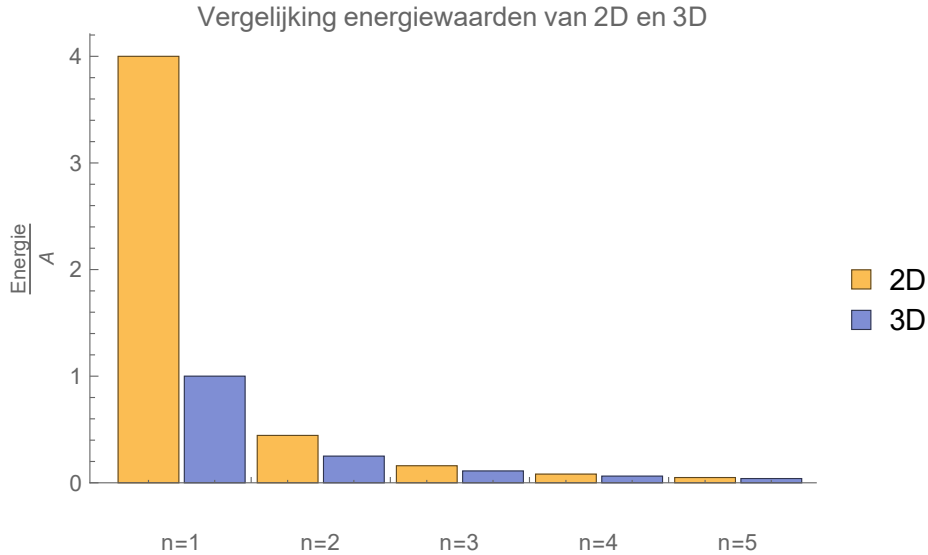


Figure 5: Vergelijking van de energiewaarden tussen het 2D en 3D probleem. De energie is geschaald met $A = -\frac{1}{2} \left(\frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu}{\hbar^2}$

Zoals eerder gezegd zal de θ afhankelijkheid niet besproken worden, bovendien hebben beiden golf-functies dezelfde ϕ golf-functie. Er is wel een verschil in het radiale deel van de golf-functies. Het is

ook belangrijk om op te merken dat zowel de drie dimensionale als de twee dimensionale golffunctie geschreven werd in functie van ρ . Deze ρ is niet hetzelfde voor de twee situaties

$$\rho_{2D} = 2 * \frac{\mu Z e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{n - \frac{1}{2}} r,$$

$$\rho_{3D} = 2 * \frac{\mu Z e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{n} r.$$

In figuur (6) worden er enkele radiale waarschijnlijkheidsdichtheden geplot voor verschillende kwantumgetallen.

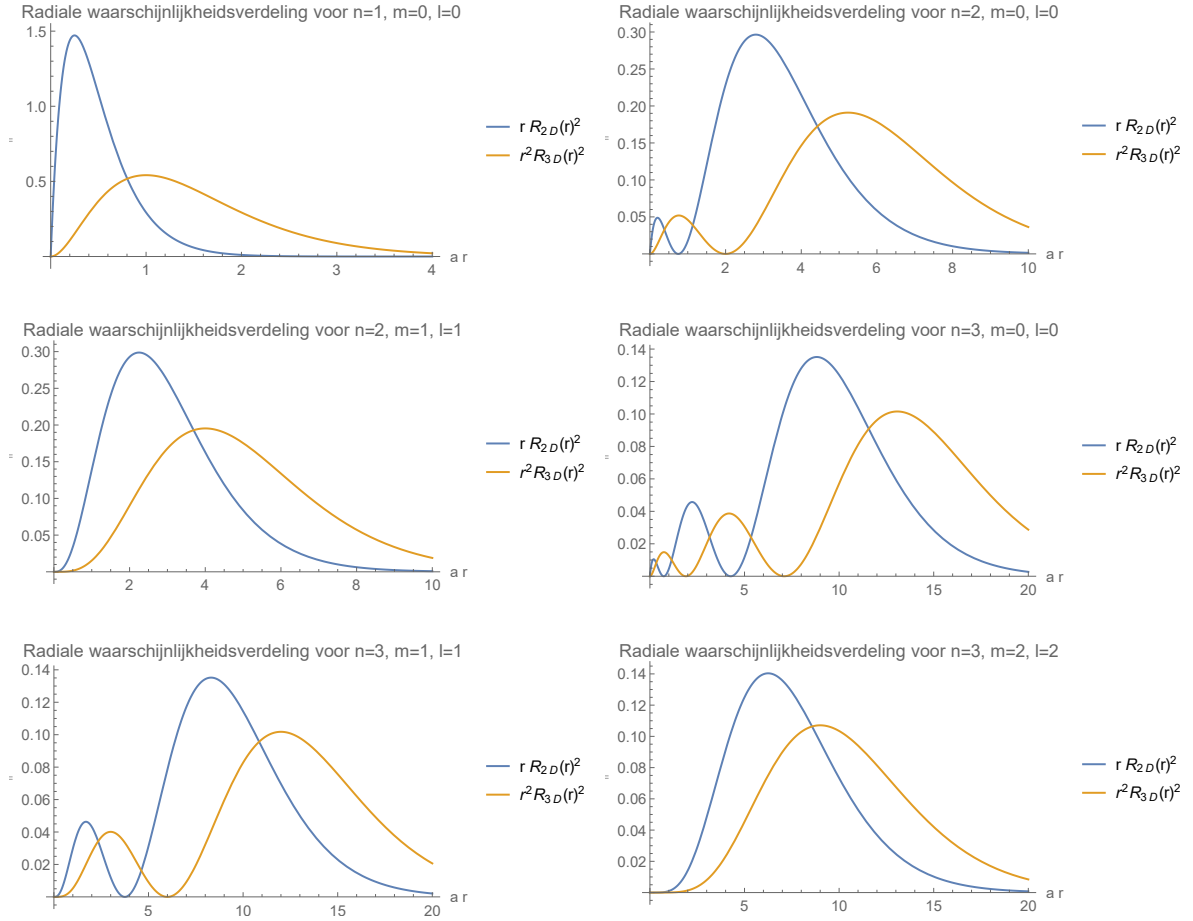


Figure 6: Vergelijking van de waarschijnlijkheidsverdeling voor de radiale golffuncties van het 2D en 3D probleem. Met a gelijk aan $\frac{\mu Z e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}$.

Wanneer de waarschijnlijkheidsverdelingen vergeleken worden valt het op dat de breedte van de pieken in het 2D geval kleiner zijn dan in het 3D geval. De pieken liggen ook altijd op lagere waarden voor r in het 2D geval. Dit laatste maakt het interessant om de verwachtingswaarden van de radiale positie te berekenen. In figuur (7) wordt de verhouding tussen de verwachtingswaarden in het 2D en 3D geval geplot. Voor kleine waarden van n is de verhouding relatief laag terwijl de verhouding wel convergeert naar 1 indien n stijgt. Deze observatie valt sterk samen met de energieniveaus. Voor kleine waarden van n was het elektron in het 2D geval sterker gebonden, dat verschil verminderde voor grotere waarden van n . Hier wordt geïllustreerd dat het elektron dichtbij de kern zit indien het sterker gebonden is, of omgekeerd.

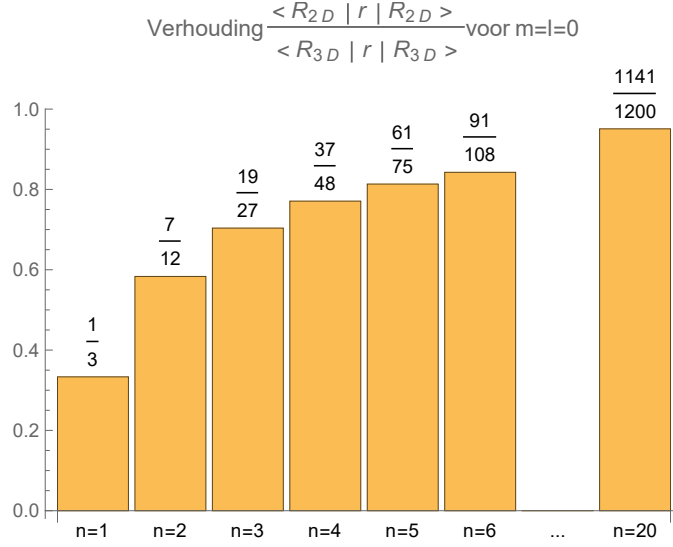


Figure 7: Verhouding tussen de verwachtingswaarden van de radiale positie van de 2D en 3D golf-functies voor de ns-toestanden.

Met behulp van het programma Mathematica werd er een genererende functie gevonden voor deze reeks van verhoudingen. De reeks werd niet rigoureus wiskundig aangetoond. Er werd een reeks gezocht voor de eerste 6 termen en er werd dan gecontroleerd of de 20ste term dit patroon bleef volgen. De correctheid van de reeks is dus niet exact bewezen. Een functie is een genererende functie voor een reeks indien de n^{de} reeksterm gelijk is aan a_n met de functie geschreven als $\sum a_n x^n$ [8]. De genererende functie voor deze reeks is

$$f(z) = \frac{\text{Li}_2(z)}{3z} + \frac{1}{1-z} + \frac{\log(1-z)}{z},$$

met $\text{Li}_2(z)$ het dilogaritme[9]

$$\text{Li}_2(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^2}.$$

De reeks kan ook op een klassiekere manier geschreven worden

$$a_n = 1 - \frac{1}{n} + \frac{1}{3n^2},$$

met a_n de n^{de} term in de reeks. Met deze representatie is het eenvoudig in te zien dat de reeks inderdaad naar 1 zal convergeren voor grote n .

3 Anisotroop waterstofatoom in 2D

3.1 Inleiding

Nu het isotroop probleem volledig is opgelost, is de basis gelegd om te beginnen aan het anisotrope probleem. In dit probleem zal de kinetische energieterm opgesplitst worden in een x deel en een y deel

$$H = \frac{p_{x,1}^2}{2m_{x,1}} + \frac{p_{y,1}^2}{2m_{y,1}} + \frac{p_{x,2}^2}{2m_{x,2}} + \frac{p_{y,2}^2}{2m_{y,2}} + V(|r_1 - r_2|).$$

Deze hamiltoniaan kan omgevormd worden door over te gaan naar massacentrum coördinaten

$$\begin{aligned} H &= \frac{P_x^2}{2(m_{x,1} + m_{x,2})} + \frac{P_y^2}{2(m_{y,1} + m_{y,2})} + \left[\frac{p_x^2(m_{x,1} + m_{x,2})}{2m_{x,1}m_{x,2}} + \frac{p_y^2(m_{y,1} + m_{y,2})}{2m_{y,1}m_{y,2}} + V(r) \right], \\ H &= \frac{P_x^2}{2M_x} + \frac{P_y^2}{2M_y} + \left[\frac{p_x^2}{2m_x} + \frac{p_y^2}{2m_y} + V(r) \right], \\ \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \\ p_{x/y} &= \frac{m_{x/y,2}p_{x/y,1} - m_{x/y,1}p_{x/y,2}}{m_{x/y,1} + m_{x/y,2}}, \\ P_{x/y} &= p_{x/y,1} + p_{x/y,2}. \end{aligned}$$

In deze thesis zal het relatieve probleem verder onderzocht worden. De Schrödinger vergelijking die uit de hamiltoniaan van het relatieve probleem volgt is niet analytisch op te lossen. Het probleem zal op drie verschillende manieren opgelost worden, via het variatie principe, storingsrekening en met behulp van numerieke berekeningen. In deze thesis wordt er gewerkt tot aan de n=2 toestanden, al zullen de energieniveaus van hogere toestanden ook bekeken worden in de numerieke berekeningen. De berekeningen van het isotrope probleem gaan in het anisotrope probleem nog van pas komen, vaak gaan ze dienen als uitgangspunt voor de nieuwe uitkomsten. In het isotrope probleem was er één niet ontaarde toestand, de grondtoestand. De niet ontaarde toestanden zijn altijd eenvoudiger op te lossen dan de ontaarde toestanden. Er wordt daarom geopteerd eerst de niet ontaarde toestand te berekenen, zowel variationeel als met behulp van storingstheorie. Daarna zal de drievoudig ontaarde n=2 toestand bekomen worden met deze twee methoden. Na deze twee manieren wordt het probleem ook numeriek opgelost, hier maakt het geen verschil of de ongestoorde toestanden al dan niet ontaard zijn.

3.2 Grondtoestand

3.2.1 Uitwerking variatie principe

De niet ontaarde grondtoestand zal eerst opgelost worden met behulp van het variatie principe. Het variatie principe maakt gebruik van de volgende formule

$$E_{gs} \leq \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (17)$$

met H de hamiltoniaan van het op te lossen probleem en ψ een test functie. Een willekeurige testfunctie is opgebouwd uit een lineaire combinatie van eigenfuncties $\psi = c_n \psi_n$. De ongelijkheid is als volgt

eenvoudig aan te tonen

$$\begin{aligned}
\langle \psi | H | \psi \rangle &= \sum_n \sum_m c_m^* c_n \langle \psi_m | H | \psi_n \rangle \\
\langle \psi | H | \psi \rangle &= \sum_n \sum_m c_m^* c_n E_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle \\
\langle \psi | H | \psi \rangle &= \sum_n |c_n|^2 E_n, \\
\langle \psi | H | \psi \rangle &\geq E_{gs} \sum_n |c_n|^2, \\
\langle \psi | H | \psi \rangle &\geq E_{gs} \langle \psi | \psi \rangle.
\end{aligned}$$

De test functie ψ mag in principe willekeurig gekozen worden, vergelijking (17) gaat altijd blijven gelden. Het goed kiezen van een test functie is echter wel essentieel voor het vinden van een goede afchatting. Stel dat de gekozen test functie loodrecht staat op de exacte grondtoestand, de best mogelijke schatter is nu de energie van de eerste geëxciteerde toestand.

De kracht van dit principe kan eenvoudig over het hoofd gezien worden indien men enkel vergelijking (17) heeft. Hierin staat enkel de test functie ψ . Wat men eigenlijk doet is een test functie voorstellen met één of meerdere vooraf onbepaalde parameters. Nu is het mogelijk de rechterkant van vergelijking (17) te minimaliseren naar deze onbepaalde parameters. Deze minimalisatie kan numeriek uitgevoerd worden voor complexere systemen. De beste schatter voor de grondtoestand en de energie kan men bekomen door de gevonden waarden van de parameters terug in te vullen.

Er bestaat geen stappenplan voor het vinden van een goede test functie, hier moet men met fysisch inzicht van het probleem een logische functie proberen te zoeken. In de hamiltoniaan die opgelost moet worden is er een anisotropie aangebracht in de kinetische energie. Het is niet geheel onlogisch dat deze anisotropie doorgevoerd zal worden naar de golf functies. Met deze redenering werd de test functie opgesteld. Er werd vertrokken van de exacte oplossing van het symmetrische probleem van de grondtoestand en er werden twee variationele parameters ingevoerd, A en B

$$\psi_v(x, y) = c * e^{-\alpha_1 \sqrt{A^2 x^2 + B^2 y^2}}. \quad (18)$$

Deze twee parameters stellen respectievelijk de herschaling van de x en y as voor. De mate van herschaling is vooraf niet gekend. Een goede test voor de berekeningen is dat A=B=1 moet zijn indien m_x gelijk is aan m_y .

Na het kiezen van een test functie is de volgende stap het uitwerken van vergelijking (17).

$$\begin{aligned}
\langle \psi_v | \psi_v \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} c^2 * e^{-2\alpha_1 \sqrt{A^2 x^2 + B^2 y^2}} dx dy \\
&= c^2 \frac{\pi}{2AB\alpha_1^2} \\
\langle \psi_v | H | \psi_v \rangle &= -\langle \psi_v | \frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} | \psi_v \rangle - \langle \psi_v | \frac{\hbar^2}{2m_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} | \psi_v \rangle - \langle \psi_v | \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{x^2 + y^2}} | \psi_v \rangle \\
&= c^2 \frac{A\pi\hbar^2}{8Bm_x} + c^2 \frac{B\pi\hbar^2}{8Am_y} - c^2 \frac{e^2 Z}{4\pi\alpha_1 \epsilon_0} \left(\frac{K((1 - \frac{A^2}{B^2})^2)}{B} + \frac{K((1 - \frac{B^2}{A^2})^2)}{A} \right)
\end{aligned}$$

Met K(k) de volledige elliptische integraal van de eerste soort[4]

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1 - k \sin^2 \theta}} d\theta.$$

$$\frac{\langle \psi_v | H | \psi_v \rangle}{\langle \psi_v | \psi_v \rangle} = \left(\frac{A^2}{m_x} + \frac{B^2}{m_y} \right) \frac{\alpha_1^2 \hbar^2}{4} - \frac{e^2 Z \alpha_1}{2\pi^2 \epsilon_0} AB \left(\frac{K((1 - \frac{A^2}{B^2})^2)}{B} + \frac{K((1 - \frac{B^2}{A^2})^2)}{A} \right) \quad (19)$$

De volgende stap is vergelijking (19) te minimaliseren naar de parameters A en B. Voordat er op wordt verder gewerkt wordt er eerst een test uitgevoerd op de uitdrukking. Zoals hierboven al vermeld moet de minimale waarde liggen bij $A=B=1$ indien $m_x = m_y$. Indien $m_x = m_y$ wordt de uitdrukking volledig symmetrisch ten opzichte van A en B. Door deze symmetrie kan men zeggen dat er een minimale waarde zal zijn op $A=B$, dit geeft

$$\frac{\langle \psi_v | H | \psi_v \rangle}{\langle \psi_v | \psi_v \rangle} = A^2 \frac{\alpha_1^2 \hbar^2}{2m} - \frac{e^2 Z \alpha_1}{\pi^2 \epsilon_0} A K(0).$$

Gebruik makende van $K(0) = \frac{\pi}{2}$ bekomt men

$$A_{min} = \frac{e^2 Z}{2\pi \epsilon_0} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{\alpha_1}.$$

A_{min} is de waarde van A die de energie minimaliseert. Aangezien $\mu = \sqrt{m_x m_y}$ is $\mu = m$ in dit geval. Dit zorgt er voor dat $A_{min} = B_{min} = 1$. Deze test geeft geen uitsluitel over de correctheid van de uitwerking maar het had wel een waarschuwing geweest moest de test falen.

In het algemene geval is m_x niet gelijk aan m_y , de vergelijking moet dan geminimaliseerd worden naar de twee variabelen A en B. De minimale waarde van uitdrukking (19) komt overeen met de afschatting voor de energie van het anisotroop probleem. Deze minimalisatie wordt numeriek uitgevoerd met het programma Mathematica. De waarden A en B waarvoor uitdrukking (19) minimaal is worden ingevuld in vergelijking (18). Dit is nu de gevonden golffunctie voor de gekozen m_x en m_y .

3.2.2 Resultaten variatie principe

De golffunctie en energie kan berekend worden voor verschillende waarden van f. Voor elke nieuwe waarde van f moet vergelijking (19) geminimaliseerd worden.

In figuur (8) worden verschillende oplossingen van het variationeel probleem getoond. Als m_x toeneemt wordt de grondtoestand uitgetrokken in de y-richting, dit is ook omgekeerd het geval. Deze oplossing voelt intuïtief als correct aan. Als de massa hoger is in de x-richting heeft het elektron meer energie nodig om weg te bewegen van het centrum in de x richting.

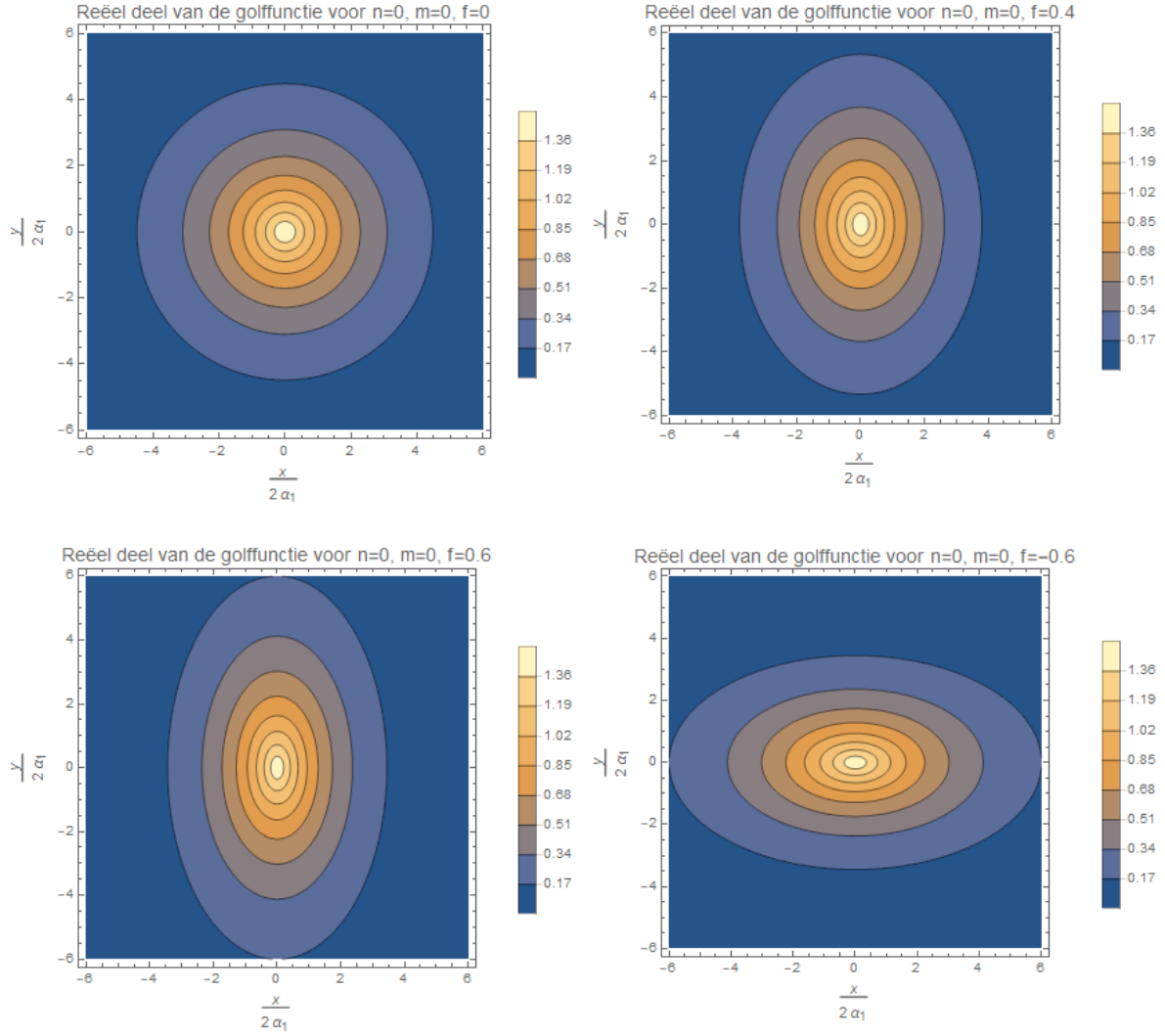


Figure 8: Reëel deel van de gestoorde grondtoestand, de grondtoestand heeft geen imaginaire component. Berekend met variationele methode

In figuur (9) wordt het verloop getoond van de variatie parameters die de energie minimaliseren in functie van f . Beide variatieparameters zijn even sterk afhankelijk van f , indien er wordt uitgerokken in de x -as wordt de y -as samengedrukt en omgekeerd.

Verloop van variatieparameters A en B

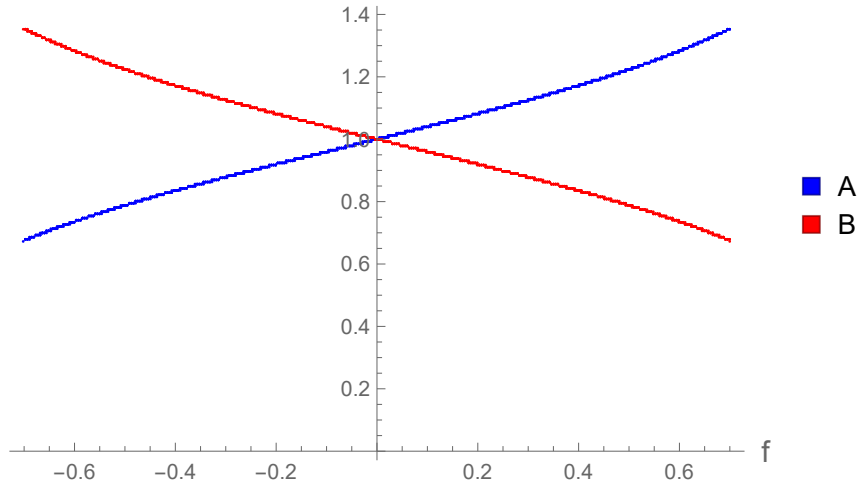


Figure 9: Verloop van de variatieparameters in functie van $f = \frac{m_x - m_y}{m_x + m_y}$

In figuur (10) wordt de relatieve energie geplot. Uit de data is het duidelijk dat de energie daalt in absolute waarde indien de absolute waarde van f toeneemt. Als f toeneemt wordt de normale cirkelvormige golf functie uitgetrokken tot een ellips. Dit zorgt er voor dat het elektron minder sterk is gebonden. De symmetrie in het probleem zorgt er voor dat de curve volledig symmetrisch is over de y as.

Er werd een kwadratische functie gefit aan de waarden van de energie voor $f \in [-0.7, 0.7]$. Als het domein groter werd gekozen was een kwadratische fit onvoldoende om de functie goed te kunnen benaderen. De beste fit werd bekomen voor $f=1+a$ met $a \approx -0.1296$.

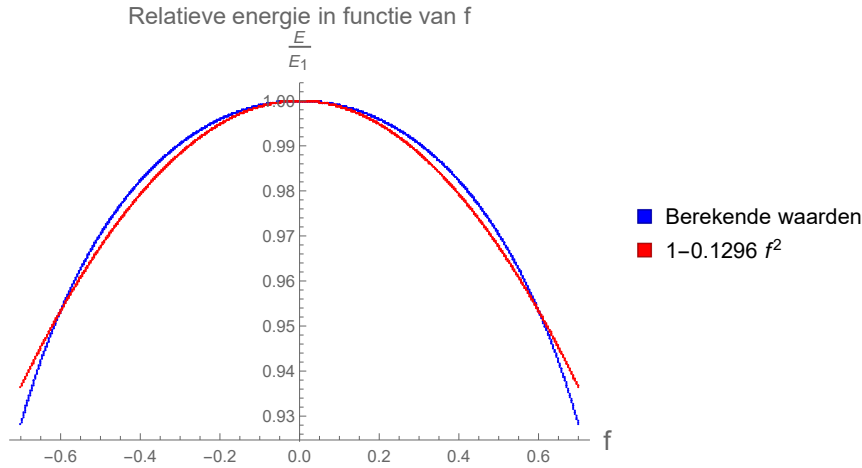


Figure 10: Relatieve energie van de gestoorde grondtoestand en gefitte functie in functie van $f = \frac{m_x - m_y}{m_x + m_y}$, berekend met variationele methode. $E_1 = -2 \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{\mu}{\hbar^2}$, de energie van de ongestoorde toestand.

3.2.3 Uitwerking storingstheorie

Naast de variationele methode zal ook storingstheorie gebruikt worden om de gestoorde grondtoestand te bepalen. Bij storingstheorie moet de hamiltoniaan geschreven worden als een exact oplosbare hamiltoniaan plus kleine storingstermen hier op. De hamiltoniaan moet als volgt te schrijven zijn

$$H = H_0 + \lambda H_1 + \lambda^2 H_2 + \dots,$$

met λ een kleine waarde. Indien de hamiltoniaan geschreven kan worden op deze manier kan men formules uit de storingsrekening gebruiken. Net zoals de hamiltoniaan wordt ook de energie en de golffunctie geschreven als een reeks

$$E(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n E^n,$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n |\psi^{(n)}\rangle.$$

De reeksen worden ingevuld in de Schrödinger vergelijking

$$(H_0 + \lambda H_1 + \lambda^2 H_2 + \dots) \left(|\psi^{(0)}\rangle + \lambda |\psi^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi^{(2)}\rangle + \dots \right) =$$

$$(E_1^{(0)} + \lambda E_1^{(1)} + \lambda^2 E_1^{(2)} + \dots) \left(|\psi^{(0)}\rangle + \lambda |\psi^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi^{(2)}\rangle + \dots \right).$$

De formules voor storingsrekenen kunnen afgeleid worden uit de Schrödinger vergelijking. De uitwerking wordt natuurlijk ook beschreven in bestaande literatuur zoals Modern Quantum Mechanics[5]. De gestoorde golffuncties zijn niet automatisch genormeerd na het toepassen van deze formules. De gevonden golffuncties moeten daarom nog eens genormeerd worden.

Nulde orde correctie:

$$H_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n |\psi_n^{(0)}\rangle. \quad (20)$$

Eerste orde correctie:

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | H_1 | \psi_n^{(0)} \rangle, \quad (21)$$

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | H_1 | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^{(0)}\rangle. \quad (22)$$

Tweede orde correctie:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | H_1 | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \langle \psi_n^{(0)} | H_2 | \psi_n^{(0)} \rangle, \quad (23)$$

$$|\psi_n^{(2)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | H_2 | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^{(0)}\rangle + \sum_{m \neq n} \sum_{l \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | H_1 | \psi_l^{(0)} \rangle \langle \psi_l^{(0)} | H_1 | \psi_n^{(0)} \rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} |\psi_m^{(0)}\rangle$$

$$- \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n^{(0)} | H_1 | \psi_n^{(0)} \rangle \langle \psi_m^{(0)} | H_1 | \psi_n^{(0)} \rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2} |\psi_m^{(0)}\rangle \quad (24)$$

Met behulp van de bovenstaande formules kan het energiespectrum en de gestoorde golffuncties berekend worden van een exacte hamiltoniaan plus een kleine storing. Deze methoden mogen enkel gebruikt worden voor niet ontaalde toestanden. Het toepassen van deze formules op ontaalde toestanden zou al snel divergenties geven. Het is duidelijk dat er andere methodes nodig zijn in dit geval.

Een eerste stap naar het oplossen met behulp van storingstheorie is het omvormen van de hamiltoniaan naar de juiste vorm: $H_0 + \lambda H_1 + \lambda^2 H_2 \dots$ met H_0 exact oplosbaar. De hamiltoniaan

$$H = \frac{p_x^2}{2m_x} + \frac{p_y^2}{2m_y} + V(r)$$

staat duidelijk nog niet in de correcte vorm. Momenteel is de kinetische energie niet symmetrisch maar de potentiële energie wel. Het doel is om de kinetische energie symmetrisch te maken, dit heeft tot gevolg dat de potentiële energie dan weer asymmetrisch wordt.

$$\begin{aligned}
H &= -\frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{x^2 + y^2}} \\
x &\rightarrow \sqrt{\frac{\mu}{m_x}} \tilde{x} \\
y &\rightarrow \sqrt{\frac{\mu}{m_y}} \tilde{y} \\
H &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{\frac{\mu}{m_x} \tilde{x}^2 + \frac{\mu}{m_y} \tilde{y}^2}}
\end{aligned}$$

Voordat er verder wordt gewerkt, worden m_x en m_y geschreven in functie van de parameter f

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{(\frac{1-f}{1+f})^{\frac{1}{2}} \tilde{x}^2 + (\frac{1+f}{1-f})^{\frac{1}{2}} \tilde{y}^2}}.$$

Deze hamiltoniaan kan nu benaderd worden met een Taylorreeks rond $f=0$. Om de notatie niet te verzwaren worden de tildes weggelaten,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}} - f * \frac{(y^2 - x^2)}{2(x^2 + y^2)^{3/2}} + f^2 * \frac{(x^4 - 10x^2y^2 + y^4)}{8(x^2 + y^2)^{5/2}} + \dots \right)$$

De hamiltoniaan staat nu in de juiste vorm om de formules van storingsrekenen toe te passen. In enkele formules (22,23 en 24) is het nodig een som te nemen over alle toestanden. De som werd hier afgebroken vanaf $n=9$, hogere termen gaven weinig tot geen verandering meer aan de uitkomst.

3.2.4 Resultaten storingstheorie

De resultaten van de storingstheorie worden hieronder getoond. Zoals eerder vermeld werd de som over alle toestanden afgebroken vanaf $n=9$. Voor de vermelde resultaten werd de som al afgebroken vanaf $n=5$. Dit om er voor te zorgen dat de uitkomsten handelbaar waren. In de plots van figuur (11) werd er gewerkt met een som die pas werd afgebroken vanaf $n=9$.

$$E_1^{(1)} = 0 \quad (25)$$

$$E_1^{(2)} = \left(\frac{1}{64} - 5.88 * 10^{-6}\right) \frac{e^4 Z^2 \mu}{\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \quad (26)$$

$$|\psi_1^{(1)}\rangle = 0 \quad (27)$$

$$\begin{aligned}
|\psi_1^{(2)}\rangle &= \frac{1}{384} \left(-6 \sum_{m=-1}^1 |\psi_{2,m}\rangle - 2 \sum_{m=-2}^2 |\psi_{3,m}\rangle - 1 \sum_{m=-3}^3 |\psi_{4,m}\rangle \right) \\
&+ \frac{(-4419433122912\sqrt{3} |\psi_{2,0}\rangle + 3125(196184025\sqrt{5} |\psi_{3,0}\rangle + 162918896\sqrt{7} |\psi_{4,0}\rangle))}{34828517376000000}
\end{aligned} \quad (28)$$

De eerste orde storingsterm valt voor zowel de energie als de golffunctie weg. Voor de energie is dit logisch, de energie moet volledig onafhankelijk zijn voor het teken van f . De energie mag niet afhankelijk zijn van de richting van de anisotropie. De eerste storingsterm moet vermenigvuldigd worden met de storing λ (f in dit geval). Als de energie onafhankelijk is van het teken van f moet volgende gelijkheid gelden

$$f E_1^{(1)} = -f E_1^{(1)}.$$

Dit kan enkel kloppen indien $E_1^{(1)}$ gelijk is aan 0.

In figuur (11) worden enkele golf functies getoond voor verschillende waarden van f . Deze golf functies komen erg overeen met wat er gevonden werd bij de berekeningen van het variatie principe.

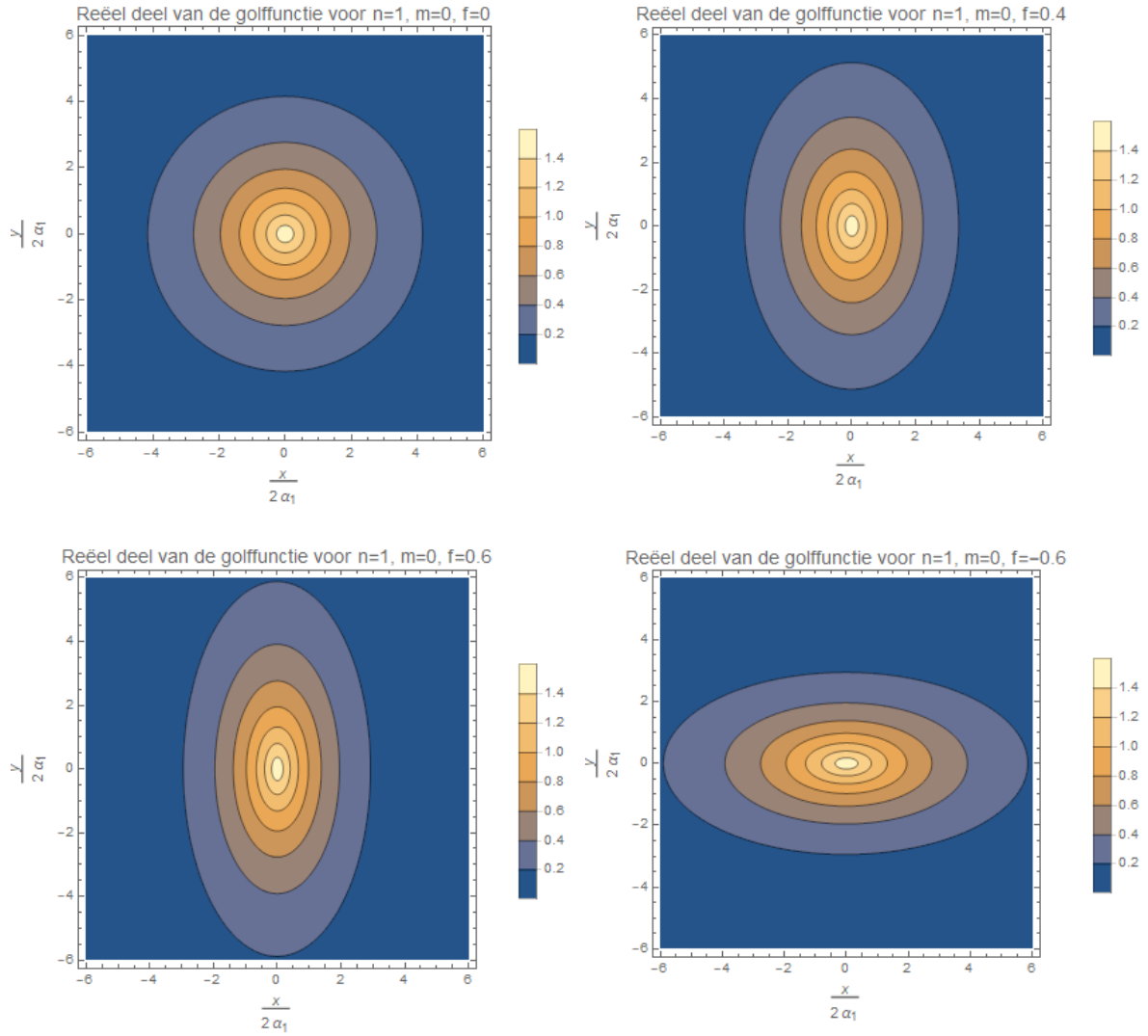


Figure 11: Reëel deel van de gestoorde grondtoestand, berekend met storingstheorie.

De gevonden energie wordt getoond in figuur (12). De gevonden energie is zoals te verwachten volledig symmetrisch rondom de y -as. Wanneer f stijgt in absolute waarde zal het elektron minder sterk gebonden zijn aan de kern.

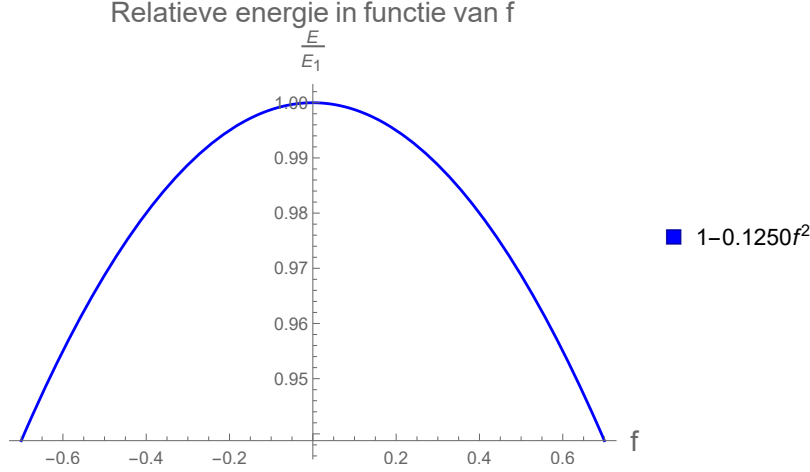


Figure 12: Relatieve energie van de gestoorde grondtoestand in functie van $f = \frac{m_x - m_y}{m_x + m_y}$, $E_1 = -2 \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{\mu}{\hbar^2}$ berekend met storings rekenen.

3.3 Eerste geëxciteerde toestand

Zoals eerder al vermeld werd mogen de methodes van het variatie principe en de storingstheorie niet zomaar gebruikt worden op ontaarde toestanden. De gebruikte golf functies moeten de gestoorde hamiltoniaan diagonaliseren, het is a priori niet zeker dat de ongestoorde golf functies dit doen. Stel $|\psi_k^{(0)}\rangle$ een set eigenfuncties van een N-voudig ontaard energieniveau. Deze eigenfuncties vormen samen een deelruimte D in de Hilbertruimte. Elke lineaire combinatie van deze $|\psi_k^{(0)}\rangle$ blijft in D zitten. Deze eigenschap kan gebruikt worden om een nieuwe set eigenvectoren $|\chi_k^{(0)}\rangle$ te kiezen die zowel een lineaire combinatie zijn van $|\psi_k^{(0)}\rangle$ als de gestoorde Hamiltoniaan diagonaliseren.

Nadat de eigenfuncties $|\chi_k^{(0)}\rangle$ gevonden zijn kan men terug de methodes gebruiken uit de niet ontaarde storingsrekening maar dan toegepast op deze nieuwe eigenfuncties.

In deze thesis zullen de methodes toegepast worden op de eerste geëxciteerde toestand, $n=2$. Deze toestand is drievoudig ontaard: $m = 0$ en $m = \pm 1$.

3.3.1 Nieuwe set eigenfuncties

De eerste stap in het ontaarde storingsrekenen is het zoeken van een set eigenfuncties $|\chi_k^{(0)}\rangle$ die de gestoorde hamiltoniaan diagonaliseren. Deze eigenfuncties worden gevormd door een lineaire combinatie van de ongestoorde toestanden $|\psi_k^{(0)}\rangle$. Op deze manier is het zeker dat de toestanden $|\chi_k^{(0)}\rangle$ ook oplossingen zijn van de Schrödinger vergelijking voor het niet gestoorde probleem.

Het zoeken van deze $|\psi_k^{(0)}\rangle$ kan opgelost worden door de volgende matrix te diagonaliseren

$$\langle \psi_i^{(0)} | H' | \psi_j^{(0)} \rangle.$$

In deze matrix staat H' voor de gestoorde hamiltoniaan. De gestoorde hamiltoniaan H' kan opnieuw geschreven worden als

$$H' = H_0 + \lambda H_1 + \lambda^2 H_2.$$

Aangezien alle toestanden $|\psi_k^{(0)}\rangle$ eigenfuncties zijn van H_0 is het voldoende om de volgende matrix te diagonaliseren

$$\langle \psi_i^{(0)} | (H_1 + H_2) | \psi_j^{(0)} \rangle. \quad (29)$$

De storingsparameter λ werd hier weggelaten, de parameter heeft enkel effect op de eigenwaarden niet op de eigenvectoren. De uitgewerkte matrix in situatie n=2 geeft

$$\begin{pmatrix} \frac{e^4 \mu Z^2}{576 \pi^2 \epsilon^2 \hbar^2} & 0 & -\frac{e^4 \mu Z^2}{144 \pi^2 \epsilon^2 \hbar^2} \\ 0 & \frac{e^4 \mu Z^2}{576 \pi^2 \epsilon^2 \hbar^2} & 0 \\ -\frac{e^4 \mu Z^2}{144 \pi^2 \epsilon^2 \hbar^2} & 0 & \frac{e^4 \mu Z^2}{576 \pi^2 \epsilon^2 \hbar^2} \end{pmatrix}.$$

Er wordt nu een nieuwe notatie ingevoerd, met $\psi_{2D}(n, m)$ de ongestoorde toestanden. De gevonden eigenvectoren die de gestoorde hamiltoniaan diagonaliseren zijn

$$\begin{aligned} |2, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{2D}(2, 1) + \psi_{2D}(2, -1)), \\ |2, 0\rangle &= \psi_{2D}(2, 0), \\ |2, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\psi_{2D}(2, 1) + \psi_{2D}(2, -1)). \end{aligned}$$

Deze nieuwe toestanden kunnen op een eenvoudige manier genoteerd worden

$$\begin{aligned} |2, 1\rangle &= 2\sqrt{\frac{2}{3\pi}}\alpha_2^2 r e^{-\alpha_2 r} \cos(\phi), \\ |2, 0\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3\pi}}\alpha_2 e^{-\alpha_2 r} (1 - 2\alpha_2 r), \\ |2, -1\rangle &= 2i\sqrt{\frac{2}{3\pi}}\alpha_2^2 r e^{-\alpha r} \sin(\phi). \end{aligned}$$

In figuur (13) worden de toestanden $|2, 1\rangle$ en $|2, -1\rangle$ geplot. Deze toestanden zijn respectievelijk zuiver reëel en zuiver imaginair. Als de waarschijnlijkheidsdichtheid geplot wordt is het duidelijk dat deze waarschijnlijkheidsdichtheid geen cirkelsymmetrie meer vertoont. Deze symmetrie was wel aanwezig in het normale 2D waterstofatoom. De toestand $|2, 0\rangle$ wordt niet getoond, deze toestand komt exact overeen met de ongestoorde n=2, m=0 toestand.

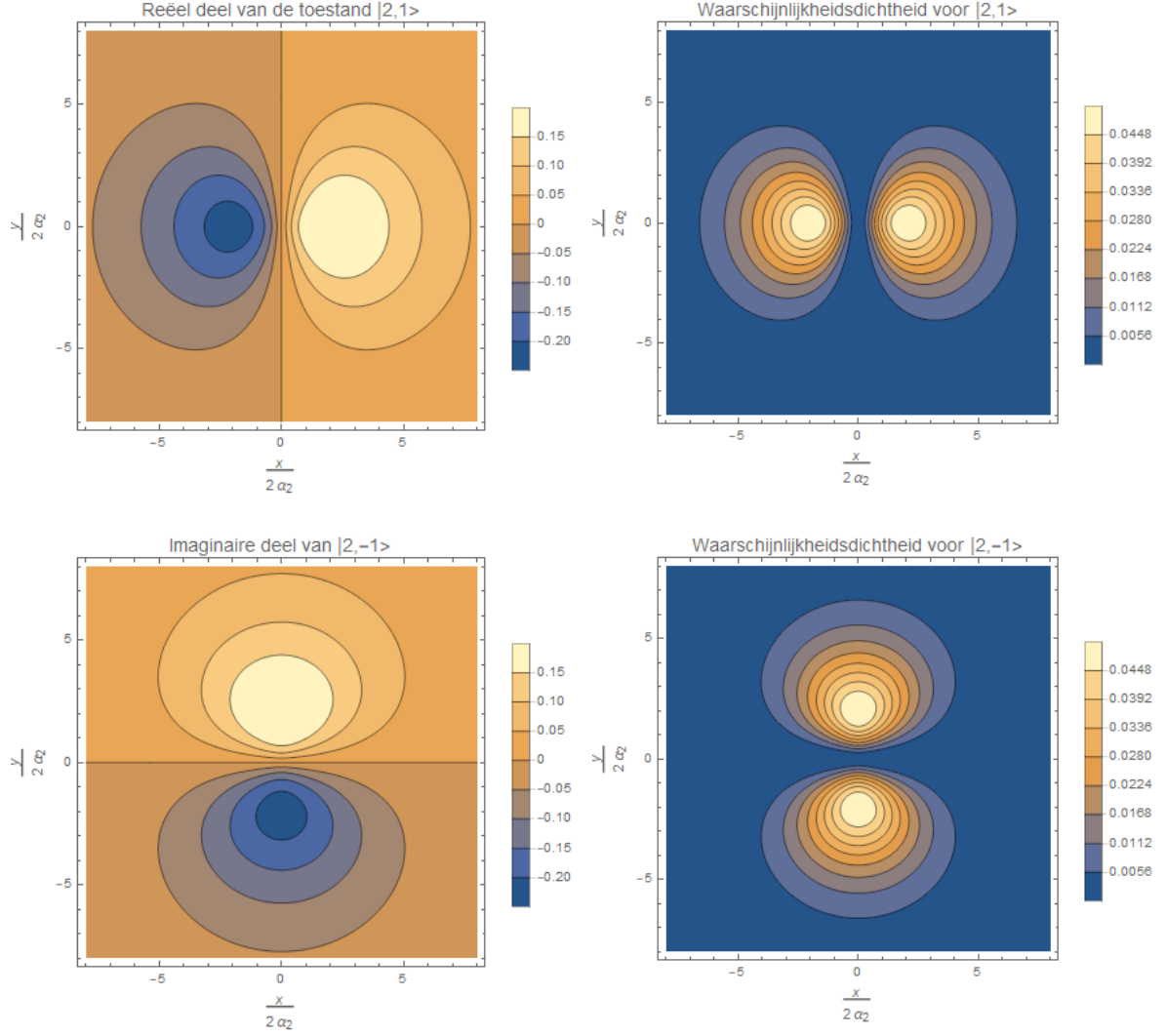


Figure 13: Plots voor de toestanden $|2,1\rangle$ en $|2,-1\rangle$. Deze toestanden hebben geen cirkelsymmetrie in de waarschijnlijkheidsdichtheid meer, dit is wel het geval in het ongestoorde 2D waterstofatoom.

De nieuwe toestanden kunnen nu gebruikt worden om dezelfde berekeningen uit te voeren als bij de grondtoestand. Eerst zal het variatie principe toegepast worden en daarna storingsrekening.

3.3.2 Uitwerking variatie principe

De berekeningen voor het variatie principe verlopen zeer analoog met het niet ontaalde probleem. In dit geval worden de test functies niet meer geconstrueerd op basis van de ongestoorde 2D golf functies maar op basis van de $|2,1\rangle, |2,0\rangle$ en $|2,-1\rangle$ toestanden. Er wordt wederom een verschillend gewicht A, B gehangen aan de respectievelijke x en y as. De toestanden worden ditmaal direct genormeerd

$$\begin{aligned}
 |2,1\rangle &= 2\sqrt{\frac{2}{3\pi}}\sqrt{A^3B}\alpha_2^2 e^{(-\alpha_2\sqrt{A^2x^2+B^2y^2})}x, \\
 |2,0\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3\pi}}\sqrt{AB}\alpha_2 e^{(-\alpha_2\sqrt{A^2x^2+B^2y^2})} \left(1 - 2\alpha_2\sqrt{A^2x^2+B^2y^2}\right), \\
 |2,-1\rangle &= 2i\sqrt{\frac{2}{3\pi}}\sqrt{AB^3}\alpha_2^2 e^{(-\alpha_2\sqrt{A^2x^2+B^2y^2})}y.
 \end{aligned}$$

Voor elk van deze golffuncties moet de verwachte waarde van de hamiltoniaan uitgerekend en geminimaliseerd worden. De verwachte waarden zijn

$$\begin{aligned}\langle 2,1|H|2,1\rangle &= \frac{3\alpha_2^2 A^2 \hbar^2}{8m_x} + \frac{\alpha_2^2 B^2 \hbar^2}{8m_y} - \frac{\alpha_2 A^3 B e^2 Z \left(\frac{K\left(1-\frac{B^2}{A^2}\right) - E\left(1-\frac{B^2}{A^2}\right)}{A(A^2-B^2)} + \frac{A^2 K\left(1-\frac{A^2}{B^2}\right) - B^2 E\left(1-\frac{A^2}{B^2}\right)}{B(A^4-A^2 B^2)} \right)}{3\pi^2 \epsilon_0}, \\ \langle 2,0|H|2,0\rangle &= \frac{\alpha_2^2 A^2 \hbar^2}{4m_x} + \frac{\alpha_2^2 B^2 \hbar^2}{4m_y} - \frac{\alpha_2 A B e^2 Z \left(\frac{K\left(1-\frac{A^2}{B^2}\right)}{B} + \frac{K\left(1-\frac{B^2}{A^2}\right)}{A} \right)}{6\pi^2 \epsilon_0}, \\ \langle 2,-1|H|2,-1\rangle &= \frac{\alpha_2^2 A^2 \hbar^2}{8m_x} + \frac{3\alpha_2^2 B^2 \hbar^2}{8m_y} - \frac{\alpha_2 A B^3 e^2 Z \left(\frac{K\left(1-\frac{B^2}{A^2}\right) - E\left(1-\frac{A^2}{B^2}\right)}{B(B^2-A^2)} + \frac{B^2 K\left(1-\frac{B^2}{A^2}\right) - A^2 E\left(1-\frac{B^2}{A^2}\right)}{A(B^4-A^2 B^2)} \right)}{3\pi^2 \epsilon_0}.\end{aligned}$$

Met $E(k)$ de volledige elliptische integraal van de tweede soort [4]

$$E(k) = \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - k \sin^2 \theta} d\theta$$

Deze verwachtings waarden worden numeriek geminimaliseerd naar A en B.

3.3.3 Resultaten variatie principe

De verwachte waarden van de hamiltoniaan worden geminimaliseerd voor de drie verschillende toestanden, dit levert de geschatte energie op. Deze energie wordt getoond in figuur (14). Voor elke toestand werd er ook een lineaire functie gefit voor $f \in [-0.5, 0.5]$.

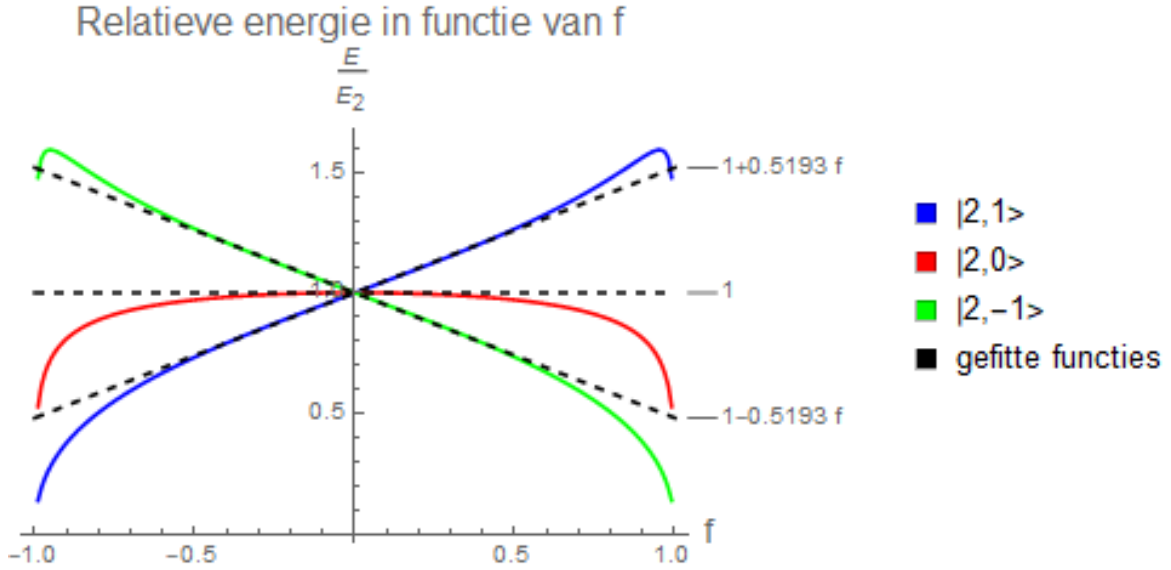


Figure 14: Relatieve energie in functie van $f = \frac{m_x - m_y}{m_x + m_y}$ voor toestanden met $n=2$, berekend met variatie principe, $E_2 = \frac{-2}{9} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu}{\hbar^2}$.

In figuur (15) wordt het verloop van de variatieparameters A en B getoond in functie van f. In de $|2,1\rangle$ en $|2,-1\rangle$ toestand valt het op dat er telkens één parameter sterk afhankelijk is van f en één parameter minder sterk. In de $|2,0\rangle$ toestand zijn beide parameters even sterk afhankelijk van f. Dit kan verklaard worden door de vorm van de golffuncties. De $|2,1\rangle$ toestand ligt parallel met de x-richting, hierdoor zal deze toestand vooral vervormd worden in de x-richting. Hetzelfde argument kan gemaakt worden voor de $|2,-1\rangle$ toestand maar dan met de y-richting. De $|2,0\rangle$ toestand is cirkelvormig en zal daardoor even sterk vervormd kunnen worden in elke richting.

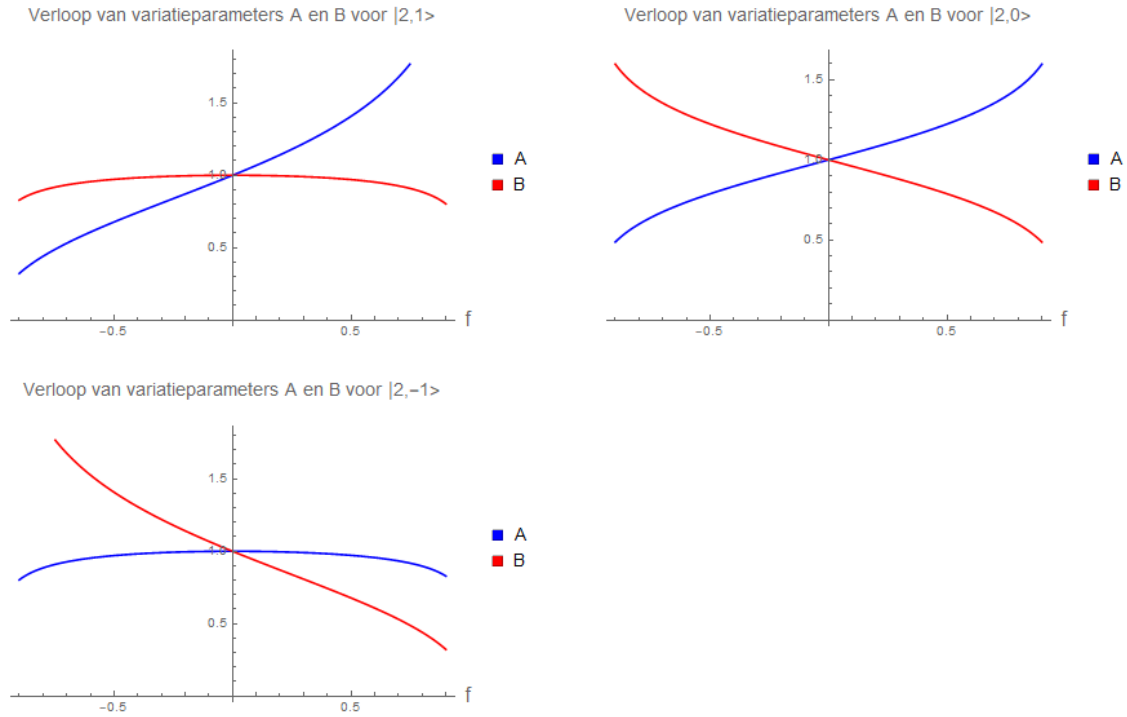


Figure 15: Verloop van de variatieparameters A en B in functie van $f = \frac{m_x - m_y}{m_x + m_y}$ voor de verschillende toestanden.

In figuur (16) worden enkele golffuncties getoond voor verschillende waarden van f . Als de golffuncties vergeleken worden met de energiewaarden is het mogelijk af te leiden welke toestand energetisch het beste is. De toestand $|2,0>$ is altijd de toestand met de middelste energie, deze toestand heeft een cirkelvormige symmetrie. De toestanden $|2,1>$ zijn gedraaid ten op zichten van elkaar met een hoek van 90 graden. Dit zorgt er voor dat één toestand maximaal voordeel haalt uit de anisotropie terwijl de andere toestand net maximaal daalt in energieniveau. Indien m_x groter is dan m_y dan is de toestand die ligt volgens de x as het sterkst gebonden.

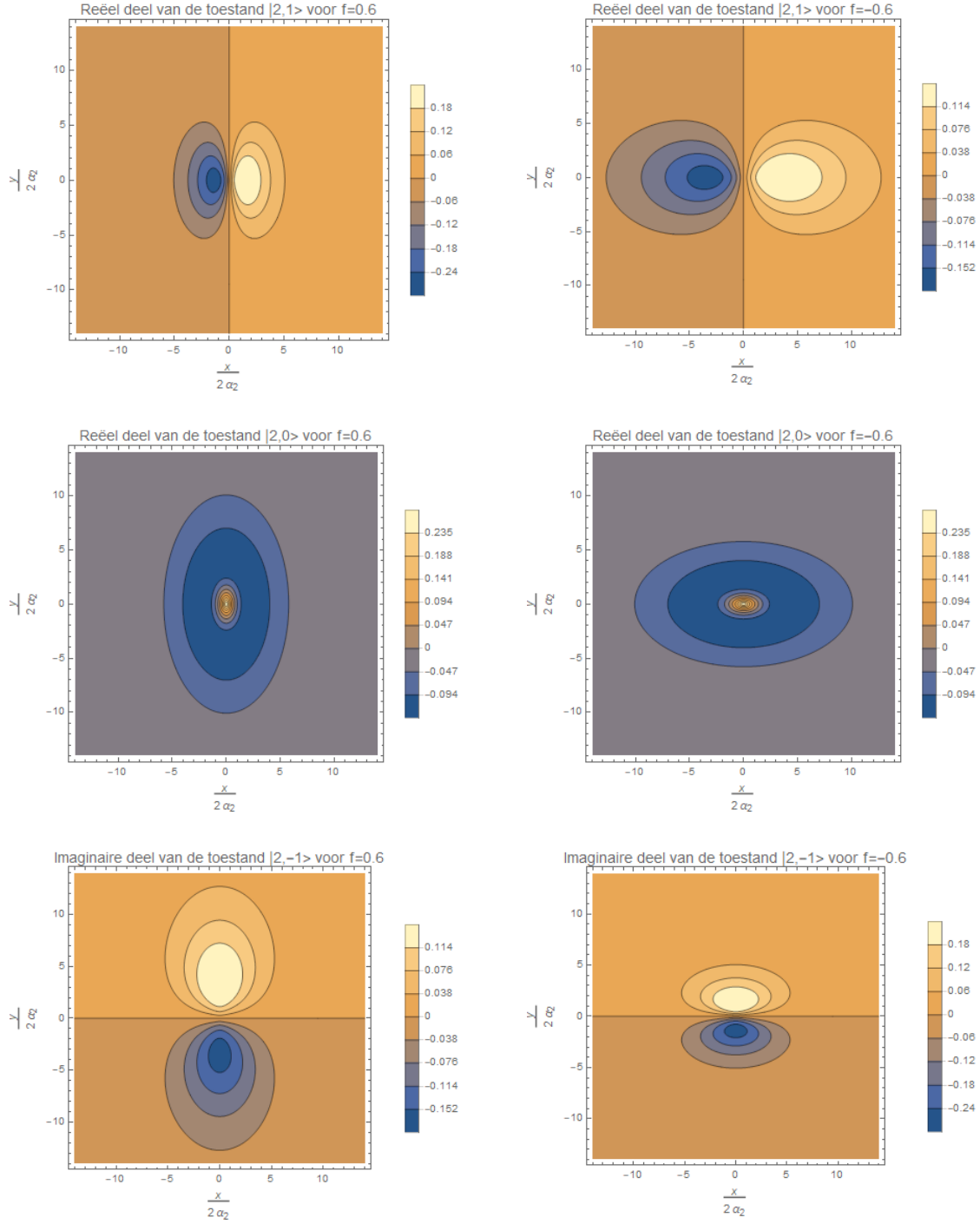


Figure 16: Golf functies voor verschillende waarden van f , berekend met variatie principe.

3.3.4 Uitwerking storingstheorie

Het grootste deel van de uitwerking is al gedaan. De nieuwe eigentoestanden zijn gevonden. Deze eigentoestanden worden nu gebruikt om de formules van de niet ontaarde storingsrekening op te lossen. De golf functies werden ditmaal slechts uitgewerkt tot eerste orde. De gebruikte formules in

termen van de nieuwe toestanden $|\chi_k\rangle$ zijn

$$\begin{aligned}
E_k^{(1)} &= \langle \chi_k^{(0)} | H_1 | \chi_k^{(0)} \rangle, \\
|\chi_k^{(1)}\rangle &= \sum_{n \notin \mathcal{D}} \frac{\langle \psi_n^{(0)} | H_1 | \chi_k^{(0)} \rangle}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} (|\psi_n^{(0)}\rangle) + \sum_{j \neq k} \frac{\langle \chi_j^{(0)} | H_1 | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_k^{(1)} - E_j^{(1)}} |\chi_j^{(0)}\rangle, \\
E_k^{(2)} &= \sum_{n \notin \mathcal{D}} \frac{|\langle \chi_k^{(0)} | H_1 | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} + \langle \chi_k^{(0)} | H_2 | \chi_k^{(0)} \rangle.
\end{aligned}$$

3.3.5 Resultaten storingstheorie

Voor de plots in figuur (18) werd de som over alle toestanden afgebroken aan $n=9$. Om het overzichtelijk te houden worden enkel de termen tot $n=4$ getoond in onderstaande resultaten. De eerste orde storing valt weg voor de $|2, 0\rangle$ toestand. Dit komt omdat de energie symmetrisch moet zijn over f .
Toestand $|2, 1\rangle$

$$E^{(1)} = \frac{-e^4 Z^2 \mu}{144 \pi^2 \epsilon_2^2 \hbar^2}$$

$$E^{(2)} \approx 1.27876 * 10^{-4} \frac{-e^4 Z^2 \mu}{\pi^2 \epsilon_2^2 \hbar^2}$$

$$|\chi^{(1)}\rangle \approx \frac{27 (1953125 \sqrt{10} (|\psi_{3,1}\rangle + |\psi_{3,-1}\rangle) + 50176 \sqrt{7} (3 \sqrt{15} (|\psi_{4,3}\rangle + |\psi_{4,-3}\rangle) + 20 (|\psi_{4,1}\rangle + |\psi_{4,-1}\rangle)))}{1280000000}$$

Toestand $|2, 0\rangle$

$$E^{(1)} = 0$$

$$E^{(2)} = -3.08112 * 10^{-5} \frac{-e^4 Z^2 \mu}{\pi^2 \epsilon_2^2 \hbar^2}$$

$$|\chi^{(1)}\rangle = -\frac{27 (4296875 (|\psi_{3,2}\rangle + |\psi_{3,-2}\rangle) + 691712 \sqrt{7} (|\psi_{4,2} + \psi_{4,-2}\rangle))}{128000000 \sqrt{10}}$$

Toestand $|2, -1\rangle$

$$E^{(1)} = \frac{-e^4 Z^2 \mu}{144 \pi^2 \epsilon_2^2 \hbar^2}$$

$$E^{(2)} \approx 1.27876 * 10^{-4} \frac{-e^4 Z^2 \mu}{\pi^2 \epsilon_2^2 \hbar^2}$$

$$|\chi^{(1)}\rangle \approx \frac{27 (1953125 \sqrt{10} (-|\psi_{3,1}\rangle + |\psi_{3,-1}\rangle) + 50176 \sqrt{7} (3 \sqrt{15} (-|\psi_{4,3}\rangle + |\psi_{4,-3}\rangle) + 20 (-|\psi_{4,1}\rangle + |\psi_{4,-1}\rangle)))}{1280000000}$$

De berekeningen voor de energie werden uitgevoerd tot op tweede orde. De resultaten van deze berekeningen worden getoond in figuur (17). Het verloop van de energieniveaus in functie van f is heel analoog met de energieniveaus die berekend werden met het variatie principe. In een later hoofdstuk zullen de energieniveaus verder vergeleken worden

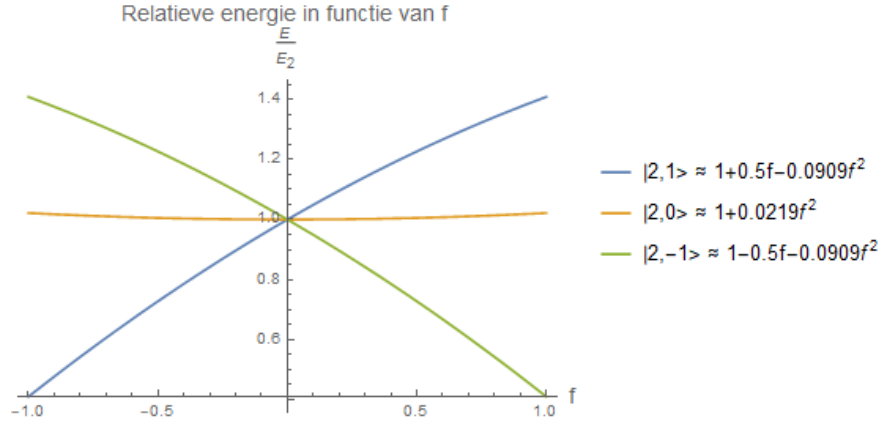


Figure 17: Relatieve energie in functie van $f = \frac{m_x - m_y}{m_x + m_y}$ voor de $n=2$ toestanden, $E_2 = \frac{-2}{9} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu}{\hbar^2}$, berekend met storingsrekening.

In figuur (18) worden de golffuncties getoond voor verschillende waarden van f . De toestanden lijken sterk op de gevonden toestanden van bij het variatie principe. Wat wel opvalt is de rare structuur in de $|2,1\rangle$ toestand. Deze structuur is niet te zien in de $|2,-1\rangle$ toestand terwijl er wel enige symmetrie moet zijn tussen de toestanden. Verder ziet de $|2,0\rangle$ toestand er ook anders uit vergeleken met het variatie principe.

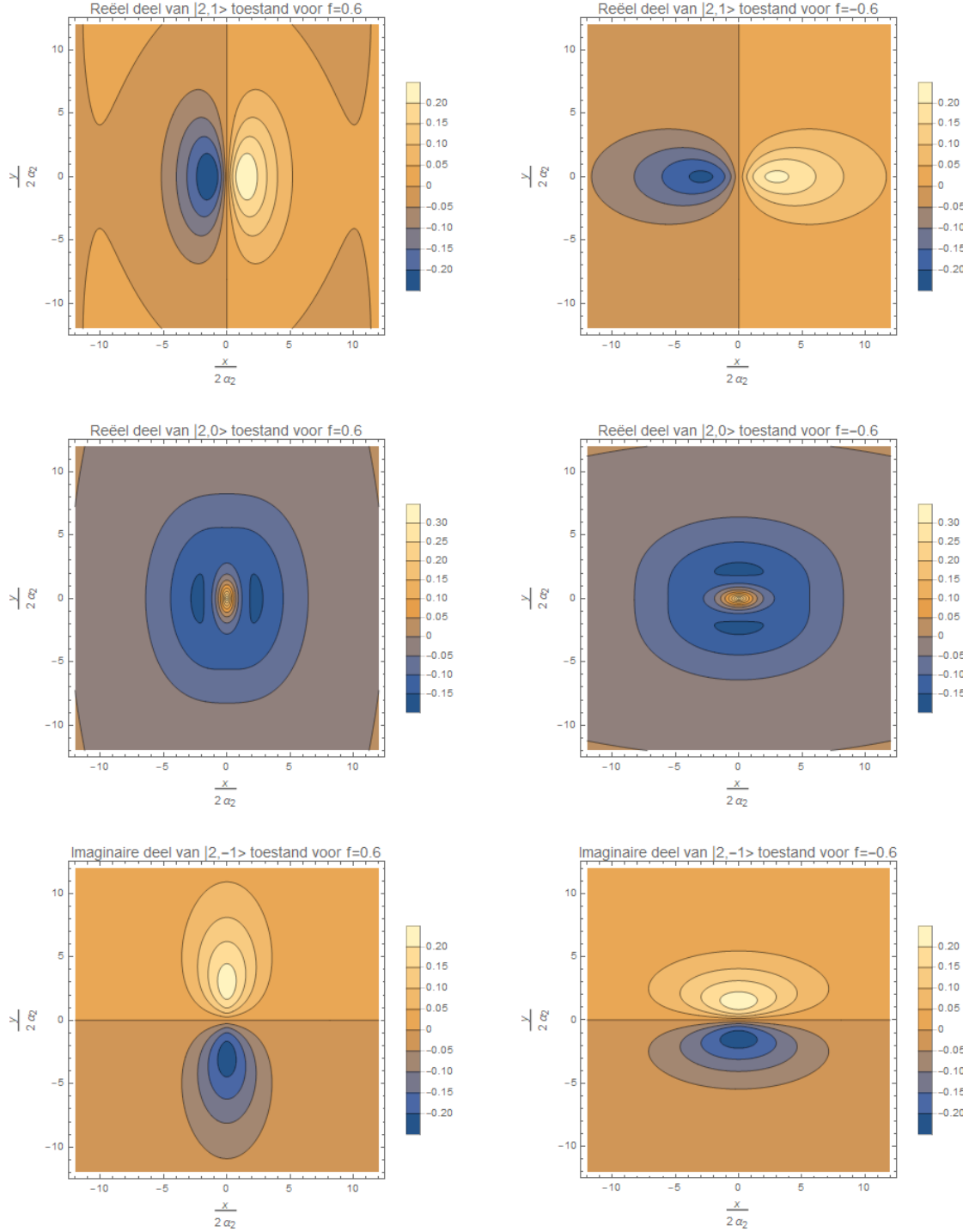


Figure 18: Eerste orde correctie op de golf functies voor $n=2$, berekend met storingsrekening.

3.4 Numerieke Oplossing

3.4.1 Inleiding

Een derde en laatste manier waarmee het probleem wordt opgelost is met behulp van numerieke berekeningen. De berekeningen worden uitgevoerd met behulp van het programma Matlab. De code was voor een groot deel geschreven in functie van een taak voor het vak Numeric Methods. Deze taak telde mee voor mijn eindtotaal van dit vak. In de opdracht lag de focus heel sterk op de oploss-

ingsmethode en werd er weinig aandacht besteed aan de onderliggende fysica. In deze thesis zal de code hergebruikt worden maar zullen de resultaten besproken worden op een fysische manier. Naast de extra bespreking werd de code ook lichtelijk aangepast om andere berekeningen te doen (zoals figuur (19)).

Voordat de resultaten besproken worden zal er toch enige aandacht gaan naar de manier van oplossen. Er werd eerst een 2 dimensionaal rooster gemaakt. Dit rooster stelt de ruimte voor met bepaalde afmetingen. Vervolgens werd deze ruimte gediscretiseerd, de afstand tussen punten in de x richting en de y richting wordt genoteerd als h . De exacte hamiltoniaan moet ook gediscretiseerd worden. De discretisatie van de potentiële energie is eenvoudig, toch moet er enige aandacht gaan naar het punt $(0,0)$. In dit punt divergeert de potentiële energie. In plaats van de standaard $V(r) \propto \frac{1}{r}$ wordt de potentiaal $V(r) \propto \frac{1}{r+\epsilon}$ gebruikt, met epsilon het kleinste getal waar Matlab mee kan werken. De afgeleiden in de kinetische energie werden benaderd met de eindig differentie methode. De uiteindelijke Schrödinger vergelijking zag er als volgt uit

$$-\frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j} - 2\psi_{i,j}}{h^2} - \frac{\hbar^2}{2m_y} \frac{\psi_{i,j+1} + \psi_{i,j-1} - 2\psi_{i,j}}{h^2} + V(x_i, y_j)\psi_{i,j} = E\psi_{i,j}. \quad (30)$$

Vervolgens werden er numerieke waarden gegeven aan enkele fysische constanten, $\hbar, e, Z, 4\pi\epsilon_0 = 1$. Verschillende van deze constante staan niet expliciet in vergelijking (30) maar staan in de potentiaal V . Voor V werd de Coulomb potentiaal gebruikt.

Vervolgens was er nog een transformatie nodig zodat de twee dimensionale matrix $\psi_{i,j}$ geschreven kon worden als een vector. Na deze stap is het oplossen van de 2 dimensionale Schrödinger vergelijking een normaal eigenwaarde probleem dat met de functionaliteiten van Matlab kan worden opgelost.

3.4.2 Berekeningen

Met de code zullen enkele verschillende dingen onderzocht worden. Eerst zullen de berekeningen herhaald worden voor verschillende waarden van f . De parameter f zal over het bereik -0.9 tot 0.9 gescand worden met stapgrootte 0.005 . Per berekening zullen de 9 laagste energie waarden opgeslagen worden.

Uit de resultaten zal blijken dat er een interessant gebied is voor bepaalde waarden van f . In dit gebied zullen de berekeningen herhaald worden met kleinere stappen voor f .

Naast enkel de energieniveaus zullen ook de golf functies berekend worden voor enkele waarden van f .

3.4.3 Resultaten

In figuur (19) worden verschillende gevonden energiewaarden weergegeven voor verschillende waarden van f . In de berekeningen liep de parameter f van -0.9 tot 0.9 , in de figuur worden enkel de waarden geplot voor f van 0 tot 0.9 . Dit omdat de energieniveaus symmetrisch zijn rond f , er zit dus geen extra info in het negatieve deel van f . De gevonden energiewaarden werden gedeeld door de energiewaarde van de ongestoorde grondtoestand.

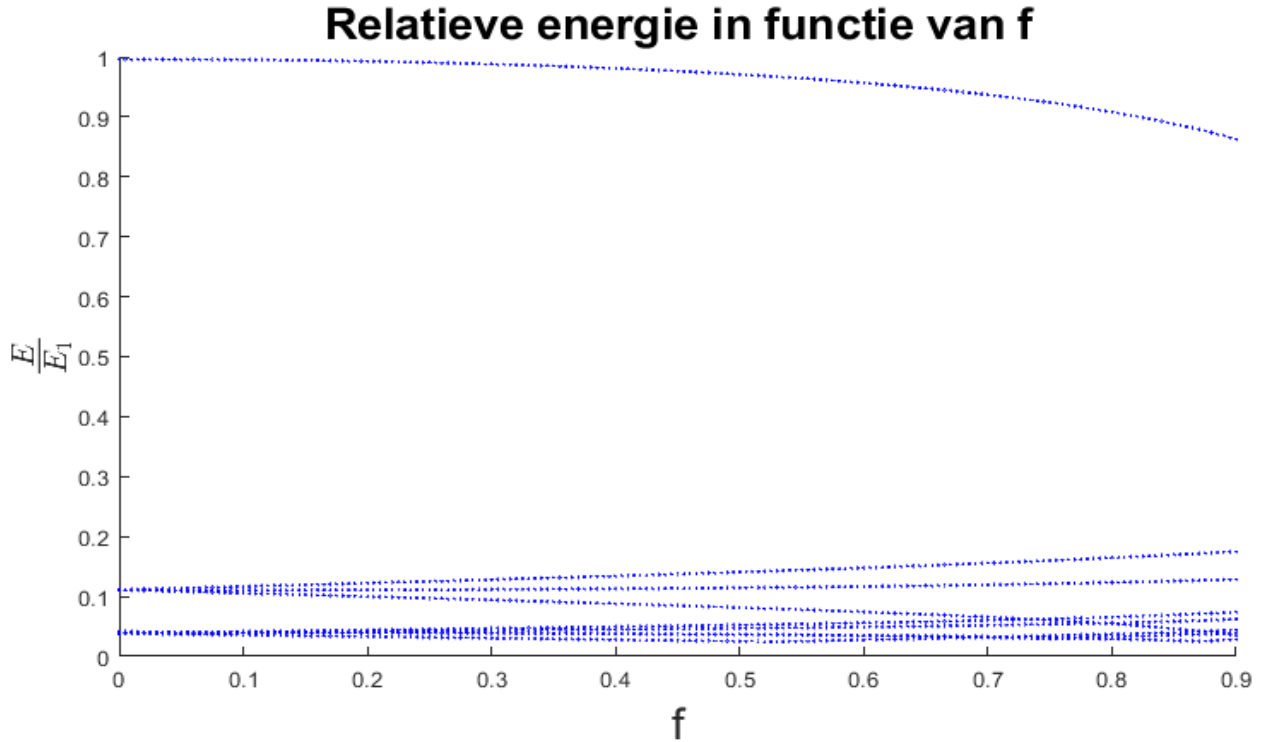


Figure 19: Energie gedeeld door de energie van de ongestoorde grondtoestand in functie van de storingsparameter $f = \frac{m_x - m_y}{m_x + m_y}$ met $E_1 = -2 \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{\mu}{\hbar^2}$. Enkel positieve waarden van f werden geplott, de energieniveaus zijn volledig symmetrisch rond f .

In figuur (20) wordt de relatieve energie getoond voor toestanden $n=2$ en $n=3$. In deze figuur zijn er drie rare punten die omcirkelt zijn. In deze punten wordt de energie van een hogere toestand lager dan de $n=3$ toestand. Dat is de reden waarom de curve op die punten een knik vertoont.

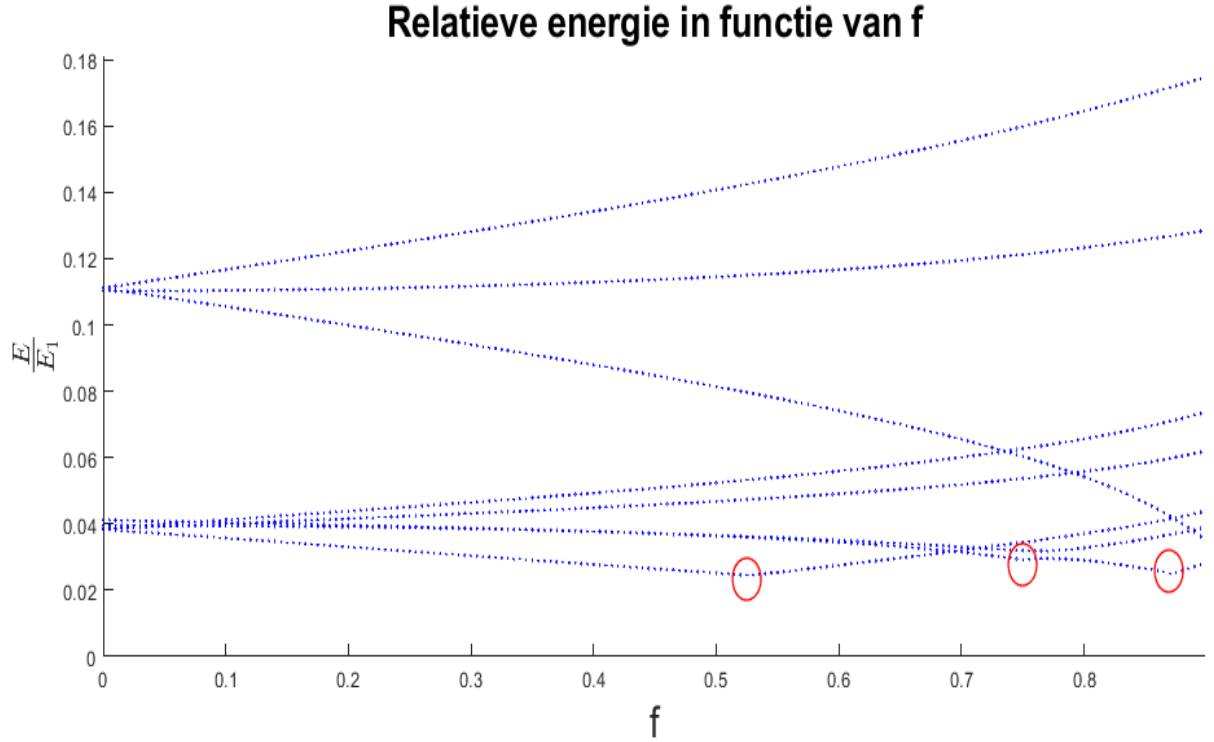


Figure 20: De relatieve energie zonder de energie van de grondtoestand in functie van $f = \frac{m_x - m_y}{m_x + m_y}$ met $E_1 = -2 \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{\mu}{\hbar^2}$. De rode cirkels geven aan waar energieniveaus van hogere ordes een lagere energie krijgen.

In figuur (19) lijkt het dat er meerdere kruisingen zijn van energieniveaus. De eerste vindt plaats rond $f=0.75$ ($m_x \approx 2.65, m_y \approx 0.38$). A priori is het echter niet duidelijk of de energieniveaus effectief kruisen. Om dit met zekerheid te kunnen zeggen moet er ook gekeken worden naar de gevonden eigenfuncties voor en na $f=0.75$. De eerst mogelijke kruising van energieniveaus zal verder onderzocht worden.

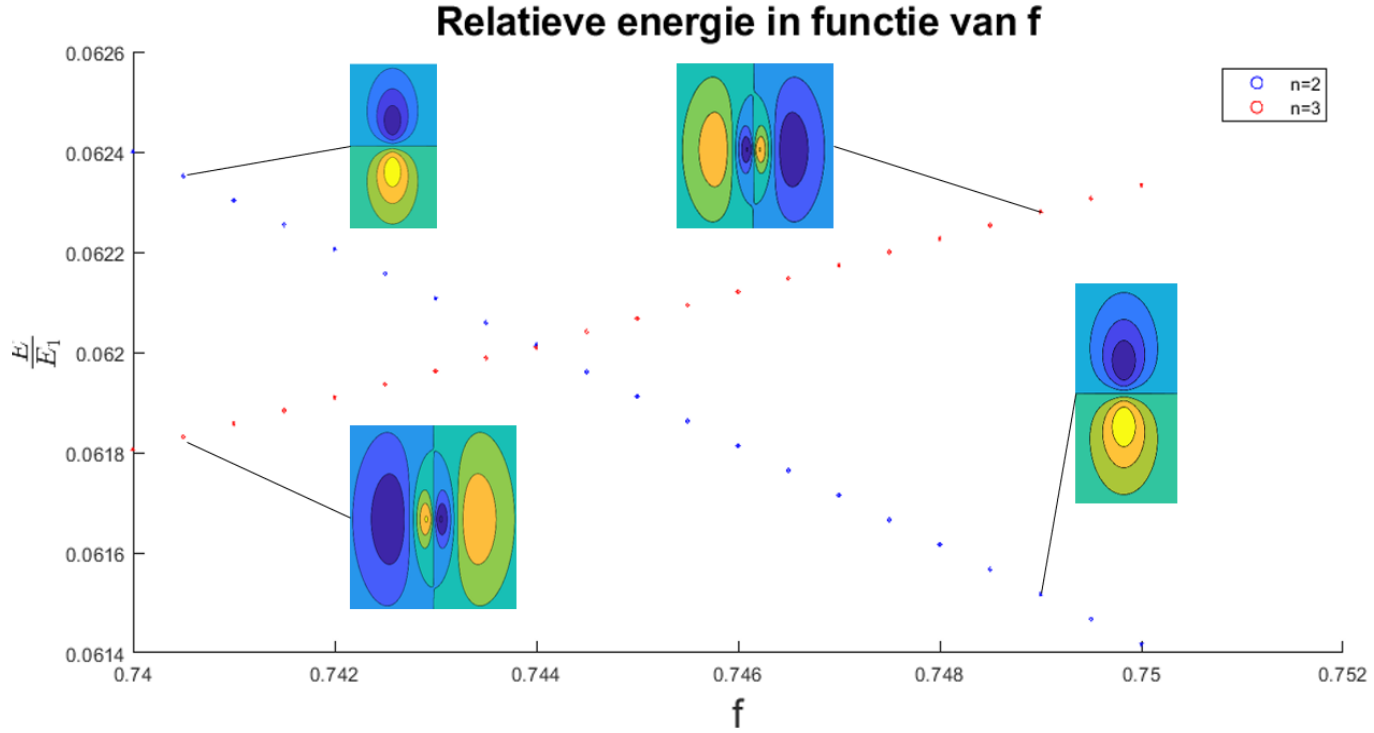
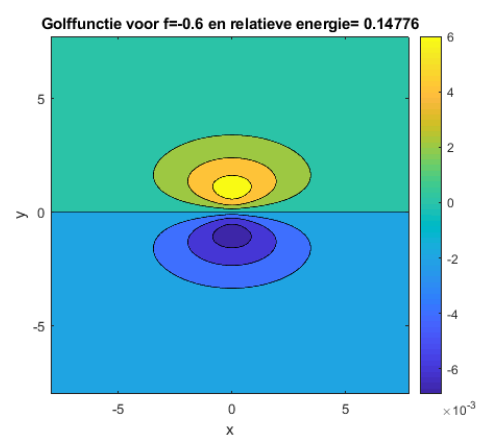
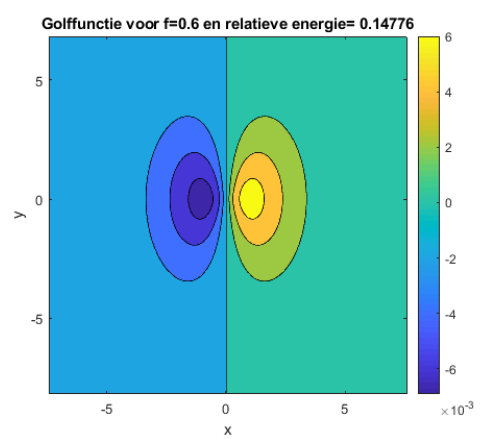
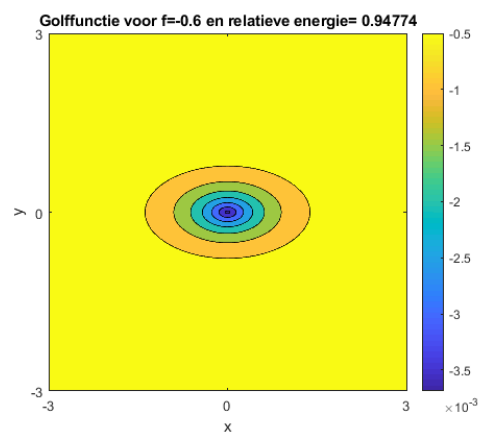
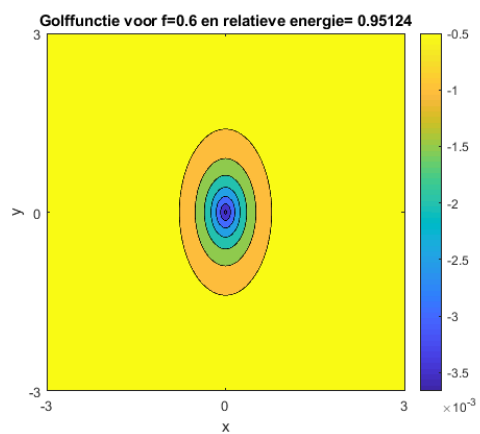


Figure 21: Energieverloop van de laagste $n=2$ toestand en de hoogste $n=3$ toestand.

In figuur (21) wordt de regio getoond waar de eerste twee energieniveaus kruisen. De golffuncties van enkele punten werden mee in de figuur gezet. Het is op deze manier duidelijk te zien dat de energieniveaus wel degelijk kruisen rond $f=0.744$.

In figuur (22) worden 4 verschillende golffuncties getoond met de hoogste relatieve energie voor $f=0.6$ en $f=-0.6$. Voor $f=0.6$ is de volgorde van hoog naar laag in relatieve energie: $|1, 0\rangle$, $|2, 1\rangle$, $|2, 0\rangle$ en $|2, -1\rangle$. Voor $f=-0.6$ is de volgorde: $|1, 0\rangle$, $|2, -1\rangle$, $|2, 0\rangle$ en $|2, 1\rangle$. De energie werd telkens geschaald met $E_1 = -2 \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{\mu}{\hbar^2}$. Er is een kleine afwijking te zien in de energiewaarden van de grondtoestand. De energie moet volledig symmetrisch zijn rond f , dit is hier niet het geval.



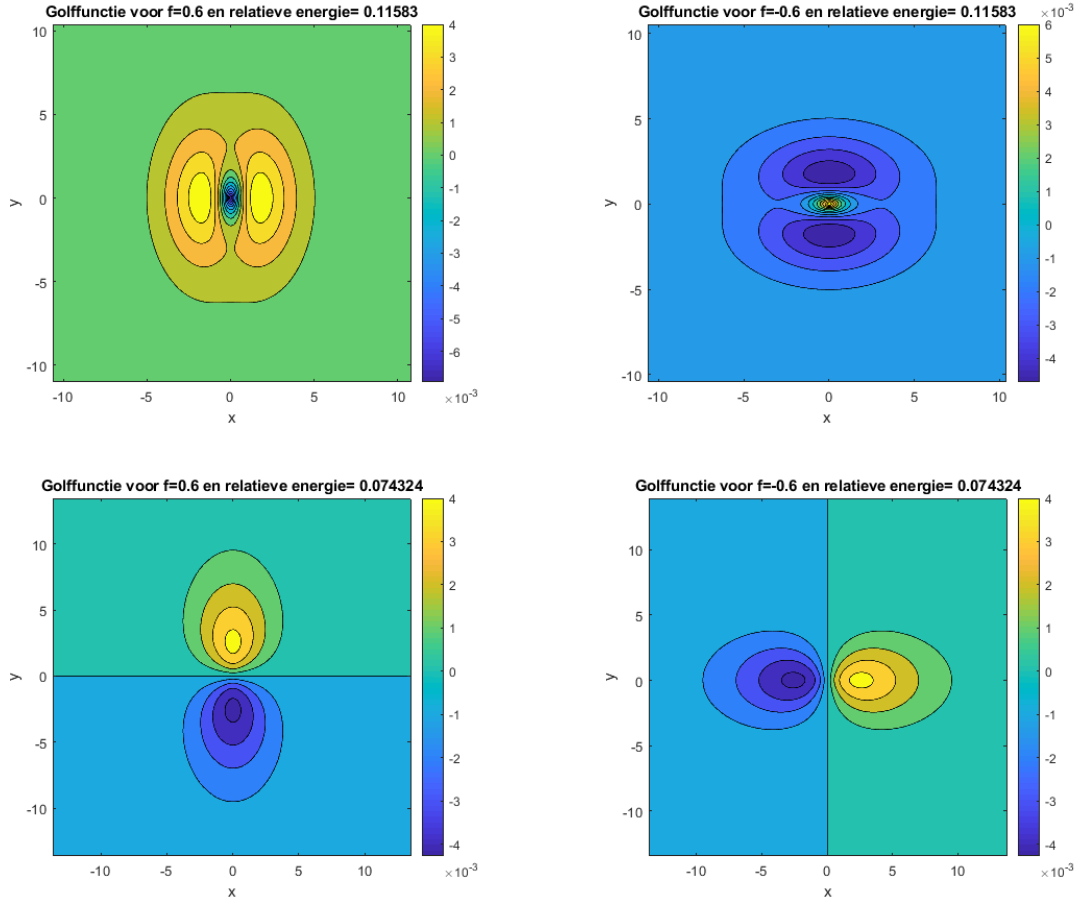


Figure 22: Verschillende golffuncties met verschillende waarden van f . De lengte eenheid is $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ met m_e de massa van het elektron. De energie werd geschaald met $E_1 = -2 \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{\mu}{\hbar^2}$.

3.5 Vergelijking resultaten

In dit onderdeel zullen de drie verschillende resultaten met elkaar vergeleken worden. Dit zal eerst gebeuren voor de energie van de 4 verschillende toestanden. Daarna zullen de verschillen en gelijkenissen in de golffuncties besproken worden. Voor elk energieniveau worden enkel positieve waarden van f geplotted. In de vorige hoofdstukken was het duidelijk dat de energieniveaus altijd symmetrisch waren rond f .

3.5.1 Energie

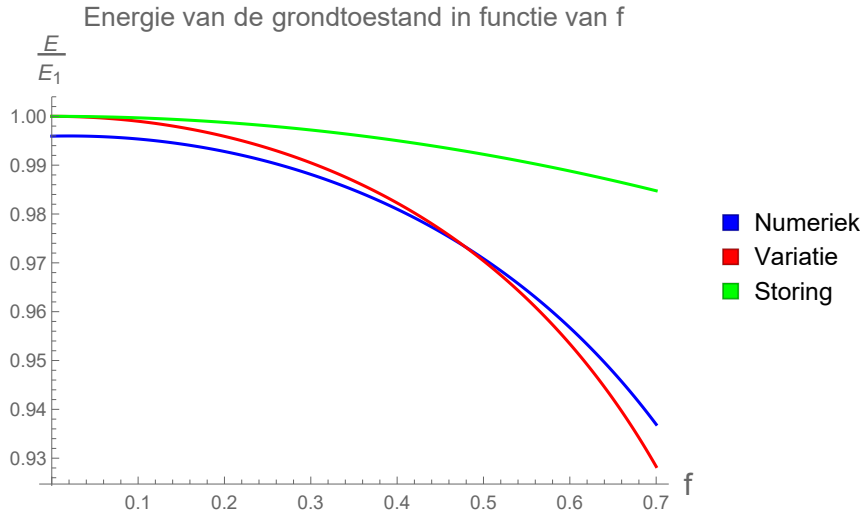


Figure 23: Energie van de grondtoestand. $E_1 = -2 \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{\mu}{\hbar^2}$

In figuur (23) wordt het verloop de energie van de grondtoestand getoond. De numerieke waarden wijken licht af van de isotrope waarde. Deze afwijking is ongeveer 0.5 %.

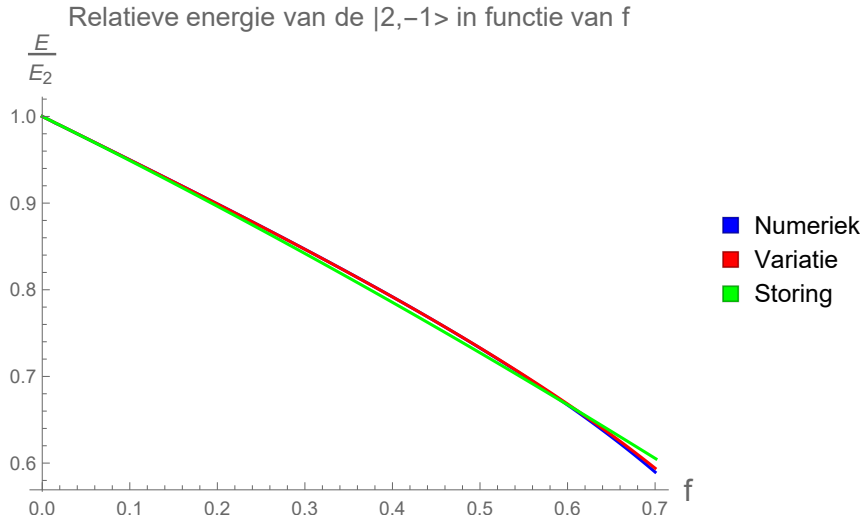


Figure 24: Energie van de $|2,-1\rangle$ toestand. $E_2 = \frac{-2}{9} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu}{\hbar^2}$

Het verloop van de $|2,-1\rangle$ toestand loopt voor de drie methoden sterk samen (figuur (24)).

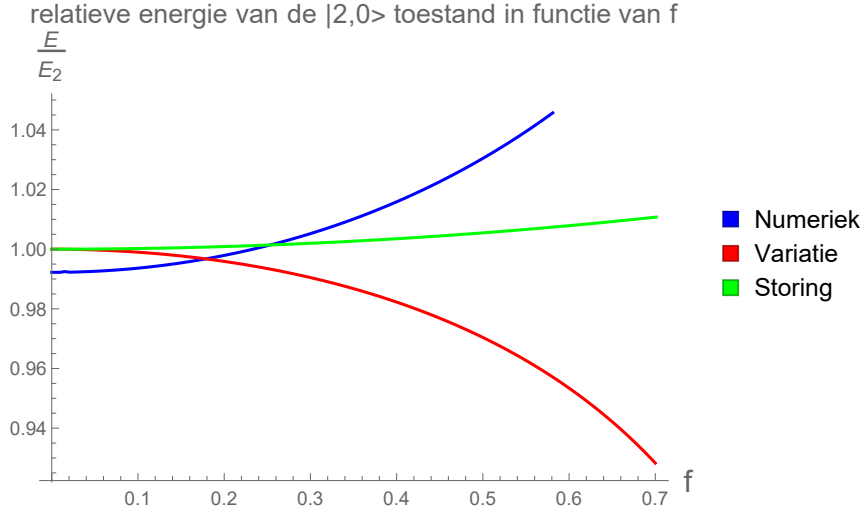


Figure 25: Energie van de $|2,0\rangle$ toestand. $E_2 = \frac{-2}{9} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu}{\hbar^2}$

In figuur (25) wordt het verloop van de energie van de $|2,0\rangle$ toestand getoond. De numerieke waarden beginnen wederom op een foute energiewaarde, de fout is kleiner dan 1%. Deze toestand heeft de resultaten die het verste uiteenlopen. Volgens de methoden van het variatie principe zou het elektron minder sterk gebonden moeten worden. Uit de andere methoden blijkt dat het elektron net sterker wordt gebonden.

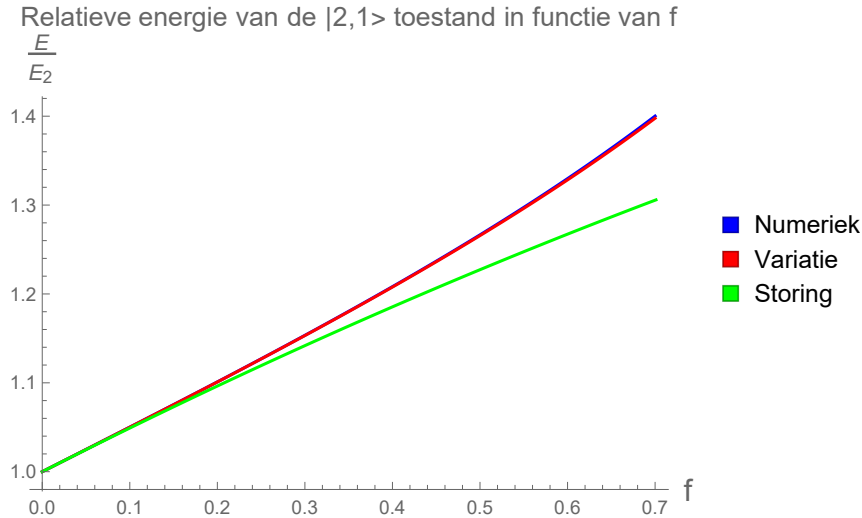


Figure 26: Energie van de $|2,1\rangle$ toestand. $E_2 = \frac{-2}{9} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu}{\hbar^2}$

In figuur (26) wordt het verloop van de energie voor de $|2,-1\rangle$ toestand getoond. De waarden van de numerieke berekeningen komen exact overeen met de waarden van het variatie principe. De storing heeft een lichte afwijking naar beneden.

3.5.2 Golf functies

De gevonden golf functies lijken bij elke methode sterk op elkaar. De $|2,1\rangle$ toestand bij storingsrekening vertoont wel enkele rare structuren. Deze structuren zijn niet te zien in de $|2,-1\rangle$ toestand wat doet vermoeden dat er een fout is gemaakt in de berekening van de $|2,1\rangle$ of $|2,-1\rangle$ toestand.

Voor elke methode klopt de regel dat indien $m_x > m_y$ de golf functie die in de x richting ligt sterker gebonden zal worden.

De $|2,0\rangle$ toestand geeft lichtelijk verschillende resultaten voor de verschillende methodes. Het variatie principe geeft essentieel een ellips. Bij zowel de numerieke berekeningen als de berekeningen met storingsrekening heeft de golffunctie precies twee verschillende $2p$ orbitalen, het is meer dan enkel een vervormde cirkel. Ook het verloop van het energieniveau (figuur(25)) is sterk afwijkend in de gevallen onderling. Vermoedelijk moet er voor het variatie principe een andere test functie gebruikt worden om de juiste energie en golffuncties te vinden.

4 Besluit

Het isotrope waterstofatoom in twee dimensies is volledig analytisch opgelost. Uit de resultaten blijkt dat het elektron sterker gebonden is in twee dimensies vergeleken met het drie dimensionale geval. De resultaten van het twee dimensionale waterstofatoom werden gebruikt als basis om het anisotrope waterstofatoom in twee dimensies benaderend op te lossen. Dit probleem is niet meer analytisch oplosbaar. Het variatie principe, storingsrekening en numerieke methoden werden hiervoor gebruikt. De grondtoestand gaf vergelijkbare resultaten voor het variatie principe en de storingsrekening. De numerieke methoden leken een globale afwijking te hebben in de waarden van de energie.

Voor de eerste geëxciteerde toestand werden er eerst golffuncties gezocht die de gestoorde hamiltoniaan diagonaliseren. De resultaten voor de eerste geëxciteerde toestand komen sterk overeen in de $|2,1\rangle$ en $|2,-1\rangle$ toestand. De $|2,0\rangle$ toestand geeft resultaten die minder goed overeenkomen. De resultaten van het variatie principe wijken het sterkst af van de andere methodes.

Uit de numerieke berekeningen blijkt dat er een kruising is in energieniveaus. De eerste kruising vindt plaats rond $f=0.744$. In deze kruising krijgt een $n=3$ toestand een lagere energie dan een $n=2$ toestand. Dit resultaat is enkel bekomen met de numerieke berekeningen, voor de andere methodes werden de $n=3$ toestanden niet berekend.

De resultaten werden in alle drie gevallen benaderend berekend. Elke methode heeft zo verschillende mogelijke fouten.

Voor het variatie principe kan een slechte test functie voorgesteld zijn, vermoedelijk is dit het geval voor de $|2,0\rangle$ toestand.

Voor de storingsrekening werd de uitkomst tot tweede of voor sommige golffuncties tot eerste orde berekend, dit kan een bron van fouten zijn. Een andere mogelijke fout is het afbreken van de som over alle toestanden vanaf $n=9$.

Bij de numerieke methode kunnen er fouten ontstaan in de discretisatie van de ruimte, de ruimte tussen de ruimtelijke punten kan te groot zijn gekozen. De afgeleiden in de hamiltoniaan werden benaderd, dit kan ook zorgen voor afwijkende resultaten.

In de toekomst kan het interessant zijn om het gedrag van twee Coulomb potentialen met een vaste locatie en met beiden een gebonden elektron te onderzoeken. Het variëren van f kan er voor zorgen dat de golffuncties van de twee elektronen meer of minder overlappen.

5 Dankwoord

De thesis maakt deel uit van mijn bachelorproef voor de opleiding Bachelor Fysica aan de Universiteit van Antwerpen. Bij deze zou ik graag mijn promotor prof. Dr. François Peeters willen bedanken voor zowel de mogelijkheid mijn onderzoek te doen als het overleg over de inhoud. Verder zou ik graag Robbe Van Pottelberge en Dr. Ben van Duppen willen bedanken omdat ik met al mijn vragen naar hun kon komen.

6 Engelstalige samenvatting

In this thesis the anisotropic hydrogen atom is studied in two dimensions. To solve the anisotropic problem the isotropic problem was first solved. The isotropic problem is solved by separating the variables and solving each differential equation. The solutions of the two dimensional problem are compared with the solutions of the three dimensional problem. The main difference is that the bonding between the electron and the nucleus is stronger in the case of the two dimensional problem. This stronger bond is seen in the energy level and in the average value of the radial position. The solutions of the two dimensional isotropic problem are exact and will be used as a starting point for the anisotropic problem. The anisotropic problem is solved using the variational method, perturbation theory and numeric calculations. The numeric calculations suggest that there is an energy level crossing if the anisotropy is large enough. This was not considered with the two other methods. The energy levels are compared between the three different levels, the results vary. For some eigenfunctions the energy levels are almost exactly the same but energy levels of other eigenfunctions differ a lot. It is not certain but this difference is likely due to an inaccurate test function in the variational method.

In this thesis only the eigenfunctions for $n=1$ and $n=2$ are studied using perturbation theory and the variational method. This is why the energy level crossing is only found in the numerical solution. The first energy level crossing is a crossing of a $n=2$ and $n=3$ function.

Each method that is used in solving the anisotropic hydrogen atom has room for errors. As mentioned above it is possible that the test function that is used in the variational method not accurate enough. The energy levels that are calculated with perturbation theory are calculated to second order, the sum over the basisfunctions is stopped at $n=9$. Both these things can create some errors. The main error for the numeric calculations is the distance between the discrete points.

References

- [1] A. K. Geim and K. S. Novoselov. The rise of graphene. *Nature Materials*, 1/03/2007.
- [2] Cem Sevik, John R Wallbank, Oğuz Gülseren, François M Peeters, and Deniz Çakır. Gateinduced monolayer behavior in twisted bilayer black phosphorus. *2D Materials*, 03/08/2017.
- [3] wikipedia.org, *Flattening*, <https://en.wikipedia.org/wiki/Flattening>
- [4] reference.wolfram.com, *Elliptic Integrals and Elliptic Functions*, <https://reference.wolfram.com/language/tutorial/EllipticIntegralsAndEllipticFunctions.html>
- [5] Sakurai, J.J., *Modern Quantum Mechanics Revised Edition*. Addison-Wesley, 1994.
- [6] wikipedia.org, *Natural units*, https://en.wikipedia.org/wiki/Natural_units
- [7] Peeters, F, *Inleiding kwantummechanica*, Universiteit Antwerpen, sept 2017.
- [8] reference.wolfram.com, *GeneratingFunction*, <https://reference.wolfram.com/language/ref/GeneratingFunction.html>
- [9] Weisstein, Eric W. "Dilogarithm." *From MathWorld—A Wolfram Web Resource*. <http://mathworld.wolfram.com/Dilogarithm.html>