Opgaven Quantumfysica II, Week 5, 2 februari 2000

Inleveren voor maandag 7 februari 2000, 12.00 uur, bij de portier van de Diamantslijperij. Met vragen over stof en opgaven kun je terecht bij de werkcollegedocenten:

- *Alejandro Arrizabalaga (ITF kamer 333, tel. 5255006, arrizaba@wins.uva.nl)*
- *Joost Slingerland (ITF kamer 356, tel. 5255920, slinger@wins.uva.nl)*
- *Martijn Wubs (WZI kamer B045, tel 5255646, wubs@wins.uva.nl).*

Vermeld alstjeblieft de naam van je werkcollegedocent op het in te leveren werk. Succes !

Opgave 5.1: Het Kepler-probleem in twee dimensies

In deze opgave berekenen we het energiespectrum en de golffuncties van een deeltje met massa μ in de volgende potentiaal:

$$V = -\frac{Ze^2}{r} \tag{1}$$

met $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ (twee dimensies). Dit vereist een aanzienlijke hoeveelheid rekenwerk. Het is aan te raden zeer nauwkeurig te werken!

Het gaat niet alleen om de resultaten van de berekeningen, maar ook om de *methode* die gebruikt wordt om het spectrum en de golffuncties te bepalen. De methode van "scheiding van variabelen" werkt namelijk voor een hele klasse van potentialen. Je zult hem dan ook nog vaak tegenkomen, zoals binnenkort bij het hoorcollege als het spectrum van het waterstofatoom wordt behandeld. Ook Griffiths gebruikt de methode bij het waterstofatoom. Het probleem in deze opgave is iets eenvoudiger (vanwege de twee dimensies in plaats van drie) en moet dan ook gezien worden als een voorbereiding op wat gaat komen.

Nu naar de opgave zelf. Vanwege de vorm van de potentiaal is het zeer onhandig om te werken met coördinaten (x, y). Poolcoördinaten (r, φ) zijn meer geschikt. De Laplaciaan in poolcoördinaten is

$$\triangle = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \tag{2}$$

(Je zou dit zelf kunnen afleiden, maar dat wordt nu niet gevraagd.) De methode van scheiding van variabelen is toe te passen als de potentiaal niet van alle coördinaten afhangt, zoals in ons geval: de potentiaal $V = V(r)$ (centrale potentiaal) hangt alleen af van de straal r en niet van de hoek φ. We veronderstellen nu dat de golffunctie het *product* is van twee functies, als volgt:

$$\Psi(r, \varphi) = \Phi(\varphi)R(r). \tag{3}$$

a. Geef de Hamiltoniaan in poolcoördinaten voor dit probleem. Schrijf vervolgens de Schrödingervergelijking uit en breng de $r-$afhankelijkheid naar links en de $\varphi-$afhankelijkheid naar rechts. Merk dan op dat beide zijden alleen gelijk kunnen zijn als ze constant zijn. Laat op deze manier zien dat de volgende $\Phi(\varphi)$ een oplossing is voor het hoekafhankelijke deel:

$$\Phi(\varphi) = e^{im\varphi}, \tag{4}$$

met m een constante. Bepaal de mogelijke waarden van m door te bedenken dat de functie $\Phi(\varphi)$ periodiek is. Daarmee is het hoekafhankelijke deel van de golffunctie opgelost.

b. Nu gaan we het radiële deel van de golffunctie oplossen. Substitueer (4) in de Schrödingervergelijking en leid de differentiaalvergelijking voor $R(r)$ af.

Om nu de functie $R(r)$ te bepalen, voeren we een aantal handige manipulaties uit. Allereerst substitueren we:

$$R(r) = \frac{u(r)}{\sqrt{r}}. \tag{5}$$

c. Schrijf de differentiaalvergelijking voor $R(r)$ om naar een differentiaal vergelijking voor $u(r)$. Voer de volgende herschaling uit: $r = \frac{\hbar^2}{\mu Z e^2}\rho \equiv a\rho$ en gebruik de afkorting: $\gamma^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2}a^2$. Laat zien dat de differentiaalvergelijking voor $u(\rho)$ eruit ziet als:

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left(\frac{2}{\rho} - \frac{m^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2} - \gamma^2\right) u = 0 \tag{6}$$

We zoeken naar de oplossing van de bovenstaande vergelijking door eerst naar het asymptotische gedrag te kijken, om te beginnen ver van de oorsprong ($\rho \to \infty$).

d. Geef de vorm van $u(\rho)$ ver van de oorsprong voor het geval dat $E > 0$. Hoe ziet het spectrum er dan uit? (Hint: schrijf eerst de differentiaalvergelijking op voor $u(\rho)$, in de limiet dat $\rho \to \infty$.) Verklaar je antwoord uit de eigenschappen van de potentiaal.

e. We kijken nog steeds ver van de oorsprong. Als $E < 0$ hebben we *gebonden toestanden*. Wat is de vorm van $u(\rho)$? (Je hoeft nog niets expliciet te berekenen.) Bedenk dat de golffuncties ook op grote afstand van de oorsprong eindig moeten zijn.

Nu gaan we het aymptotische gedrag nabij de oorsprong onderzoeken. We eisen dat ook voor $r \to 0$ de golffunctie eindig is, dus dat $u(0) = 0$.

f. Geef de differentiaalvergelijking voor $u(\rho)$ voor $\rho \to 0$. Neem aan dat $u(\rho) = \rho^\alpha$. Waarom moet $\alpha > 0$? Bewijs dat $\alpha = |m| + \frac{1}{2}$.

Als we nu het asymptotische gedrag ($r \to \infty$ en $r \to 0$) expliciet aangeven, kunnen we de algemene oplossing voor $u(\rho)$ als volgt schrijven:

$$u(\rho) = e^{-\gamma\rho}\rho^{|m|+\frac{1}{2}}w(\rho). \tag{7}$$

g. Geef de differentiaalvergelijking voor $w(\rho)$. (Zonder nauwkeurigheid vliegt de berekening hier de bocht uit...)

Om de differentiaalvergelijking voor w op te lossen substitueren we een machtreeks:

$$w(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n \tag{8}$$

Door de sommatie voor verschillende termen te verschuiven kunnen we zorgen dat alle ρ's met dezelfde macht n in de som voorkomen. De coëfficiënt van ρ^n moet dan dus gelijk zijn aan 0. Hieruit volgt de volgende recursie-relatie voor de coëfficiënten:

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{\gamma(2n + 2|m| + 1) - 2}{(n+1)(n + 2|m| + 1)}. \tag{9}$$

h. Expandeer de functie $e^{2\gamma\rho}$ en laat zien dat daarvoor geldt dat $\frac{b_{n+1}}{b_n} = \frac{2\gamma}{n+1}$. Bereken $\frac{a_{n+1}}{a_n}$ voor $n \to \infty$ voor vergelijking (9). Geef de oplossing voor $u(\rho)$ in geval de expansie van $w(\rho)$ oneindig zou zijn. Hoe gedraagt $u(\rho)$ zich dan voor $\rho \to \infty$? Conclusie?

i. Stel dat de expansie (8) afbreekt voor zekere n_0, dus $a_{n_0+1} = 0$, maar $a_{n_0} \neq 0$. Druk γ uit in deze n_0 en $|m|$. Gebruik de definitie van γ uit onderdeel (c.) en geef het energiespectrum, dat wil zeggen, de waarden van E_{n_0}.

j. Hersubstitueer tenslotte alle oplossingen en geef de golffuncties horend bij de verschillende energie niveaus E_{n_0}, dus de $\Psi_{n_0 m}(r,\phi)$. Bedenk dat $n_0 = 0, 1, 2, ...$ en $|m| = 0, 1, 2, ...$ Hint: gebruik de afkortingen γ en a zoals hierboven gedefinieerd.

k. Leid vergelijking (9) af.