Kvantemekanikprojekt E2018

Projekt nr: X
Titel: ZXY GHF GT

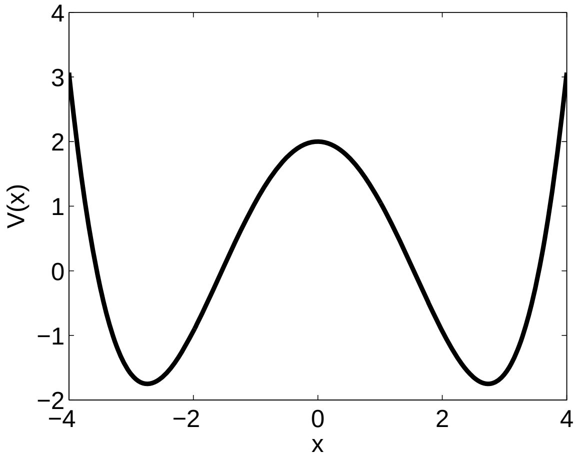
Navn: XX YY
Studienummer: 123456789

Vi afleverer en fælles besvarelse - individuelle besvarelser (ret til det korrekte)

Afleveret: dato (Senest 7/12 kl. 12.00 til Ann-Berit Porse Stærkær, 1520-629)

Projektvejleder: XXX YYY

Instruktor: XXA YYA



Figur 1: Her ses et potentiale. Brug denne kommando når I skal indsætte figurer. Det er ikke så vigtigt hvor figurer er placeret, så længe det er i nærheden af der, hvor I henviser til figuren.

1 Indledning

Formålet med projektrapporten er at forklare projektets formål, metoder og resultater for en læser, som har fulgt kvantemekanik, men ikke nødvendigvis kender til detaljer i emnet, I har studeret. Det er derfor vigtigt at rapporten er skrevet i et klart og *korrekt* sprog. Studieordningen for fysik skriver specifikt,

> "Ved bedømmelsen af bachelorprojekt, kandidatspeciale, masterprojekt og andre større skriftlige opgaver skal der ud over det faglige indhold også lægges vægt på den studerendes stave- og formuleringsevne." Studie-ordning for bacheloruddannelsen i fysik (2015) [1],

og i læringsmålene for kvantemekanik står der at I skal

> "Gennemføre og afrapportere et projektforløb - under vejledning af lærer - inden for et kvantemekanisk emneområde, inklusive litteraturstudier, beregninger samt selvstændig formulering af en skriftlig rapport over emnet."
> Kursusbeskrivelse for kurset Kvantemekanik (E2018).

Nedenfor følger eksempler på hvordan formler kan skrives ind, hvordan figurer kan sættes op samt hvordan henvisninger/referencer angives i teksten. Husk at nummerere formler, der henvises til. Ønskes rapporten skrevet i Word, så skal I designe jeres rapport så I får samme layout som denne, både i forhold til marginer, skrifttype, formler, referencer osv. Marginer er sat til 2 cm (højre/venstre) og 2 cm (top/bund) og der er skrevet med serif-skrifttype (f.eks. Times New Roman) med størrelse 11pt. Forsiden og litteraturlisten tæller ikke med i jeres 6 sider.

Til sidst: *Husk* at læse jeres rapport omhyggeligt igennem for trykfejl inden I afleverer.

2 Eksempel på udregninger

Den kvantemekaniske harmoniske oscillator er en kvantemekanisk partikel fanget i et potential givet ved

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{1}$$

Hvis I vil plotte sådan et potential, så se eksemplet i figur 1 (det er et andet potential, som vises i denne figur). Udregningerne herunder følger [2].

Som ved ethvert andet potential starter vi med at finde de stationære tilstande. Vi skal altså løse ligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi = E\psi \tag{2}$$

Dette kan løses på 2 måder, hvor løsningerne (selvfølgelig) er ækvivalente, men alligevel forskellige.

2.1 Den analytiske metode

I denne del af løsningen gælder det om at "brute force"sig til en (grim) løsning. Dette gøres ved at indføre den dimensionsløse variabel

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \tag{3}$$

og så omskrive den stationære Schrödingerligning til

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - K)\psi \tag{4}$$

med $K = \frac{2E}{\hbar\omega}$. Der løses nu ved hjælp af potensrækker og der kommes frem til følgende egenenergier

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \text{ for } n = 0, 1, 2, \ldots \tag{5}$$

mens der findes frem til følgende egentilstande

$$\psi_n = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}H_n(\xi)e^{-\xi^2/2} \tag{6}$$

Her er $H_n(\xi)$ hermite polynomier som til enhver tid kan slåes op i Schaums [3] eller udregnes ved hjælp af formler man også kan slå op. Grundlæggende er det vigtige blot at det er n'te grads polynomier.

2.2 Algebraisk metode

Opgaven er her at prøve at faktorisere Schrödinger ligningen ved først at omskrive til

$$\frac{1}{2m}(p^2 + (m\omega x)^2)\psi = E\psi \tag{7}$$

og så forsøge at skrive $(p^2 + (m\omega x)^2)$ som et produkt af to simple udtryk. Det ville givetvis være nemt hvis ikke p og x var operatorer. Vi undersøger størrelserne

$$a_\pm = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp ip + m\omega x) \tag{8}$$

Ved en hurtig udregning ses det at

$$a_- a_+ = \frac{1}{2m\hbar\omega}(p^2 + (m\omega x)^2)\psi - \frac{i}{2\hbar}[x, p] \tag{9}$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{i}{2\hbar}[x, p] \tag{10}$$

hvor $[x, p] = xp - px$ er kommutatoren af x og p. En udregning viser at følgende to udtryk

$$[x, p] = i\hbar \tag{11}$$

$$[a_-, a_+] = 1 \tag{12}$$

så derfor får vi nu ligningenerne

$$H = \hbar\omega \left(a_- a_+ - \frac{1}{2} \right) \tag{13}$$

$$= \hbar\omega \left(a_+ a_- + \frac{1}{2} \right) \tag{14}$$

Ved hjælp af det vises at a_+ og a_- kan bruges som stepoperatorer således at

$$H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi) \tag{15}$$

$$H(a_-\psi) = (E - \hbar\omega)(a_-\psi) \tag{16}$$

Man vil ikke have negative energier, dvs. det er begrænset hvor mange gange man kan trække $\hbar\omega$ fra E. Det giver, at der findes en grundtilstand ψ_0 så $a_-\psi_0 = 0$ og det kan bruges til at udregne ψ_0. Dermed får man

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{(1/4)} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{17}$$

med

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{18}$$

Man kan nu bruge stepoperatorerne til at udregne de andre egentilstande ved

$$a_+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1} \qquad a_-\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1} \tag{19}$$

Dermed finder man egentilstandene og egenenergierne

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a_+)^n\psi_0 \qquad E_n = \left(\frac{1}{2} + n \right) \hbar\omega \tag{20}$$

Litteratur

[1] Studieordning for bacheloruddannelsen i fysik (2015).

[2] Introduction to Quantum Mechanics, Second Edition, David J Griffiths.

[3] Schaums's Mathematical Handbook of formulas and Tables, Third Edition, Murray R Spiegel et. al.