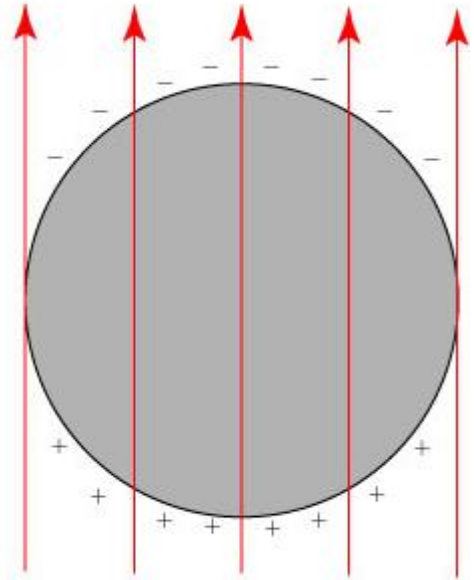


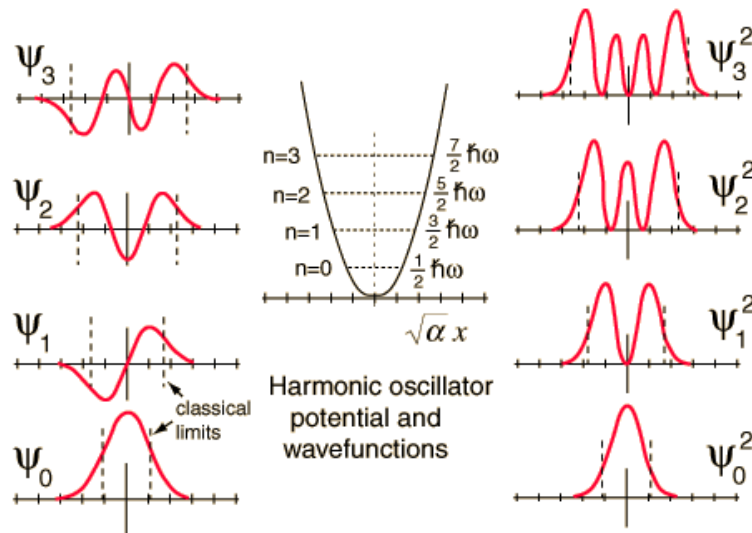
Kvantemekanisk polarisabilitet

Atomer, molekyler og fast stoffer bliver polariserede, når de placeres i elektriske felter. Der sker en ladningsforskydning, fordi de mobile elektroner "skubbes" af feltet. Dette fænomen kan (bør!) beskrives kvantemekanisk, og kan gøres eksakt for meget simple systemer (harmonisk oscillator, brint-atom etc.). For mere komplicerede systemer kræves tilnærmede og numeriske metoder. I projektet vil vi studere både simple og komplicerede eksempler. Såkaldt "perturbationsregning" og "variationsregning" kan benyttes til formålet, når passende computerprogrammer opstilles. Det tænkes ikke at lave eksperimentelt arbejde i projektet.



Projektet kunne indeholde følgende punkter:

1. Gennemgang af polarisabilitetsbegrebet.
2. Benyttelse af perturbationsregning til polarisabilitet.
3. Benyttelse af variationsregning til polarisabilitet.
4. Modellering af brint atom i elektrisk felt.
5. Modellering af helium atom i elektrisk felt.
6. Modellering af simple krystaller (f. eks. grafen) i elektrisk felt.



Projektet sigter mod at give fortrolighed med kvantemekanik for simple og mere komplicerede elektroniske systemer.

Forslagsstiller: Thomas G. Pedersen