Behagarrien adierazpen matriziala.

1. Suposa dezagun sistema kuantiko batek bi egoera linealki independiente eta ortonormalak dituela bakarrik, ψ_1 eta ψ_2. Hau da, sistemaren edozein egoera kuantikoa bi egoera hauen konbinazio linealaren bitartez adieraz dezakegu.

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$$

- Funtzioaren biderketa eskalararen propietateak erabiliz, froga ezazu denboraren menpekoa den Schrödinger-en ekuazioa ondorengo era matrizialean adieraz daitekela:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

non $H_{ij} = (\psi_i, \hat{H}\psi_j)$ den.

- Azal ezazu zergatik betetzen den ondorengo erlazioa $H_{12} = H_{21}^*$
- Hemendik aurrera suposa dezagun H_{12} erreala dela eta $H_{11} = H_{22}$. Aurki itzazu ondorengo forma duten emaitzak: $c_1 = ae^{-i\omega t}$ eta $c_2 = be^{-i\omega t}$. Zein da emaitza hauen esangura fisikoa?
- Aurki itzazu Hamiltondarraren autofuntzioak eta autobalioak.
- Hasierako sistema ψ_1 egoeran badago (hau da $c_1 = 1$ eta $c_2 = 0$), zein izango da sistemaren uhin funtzioa beste edozein t aldiunetan?
- Aurreko kasuan kalkula itzazu $|c_1(t)|^2$ eta $|c_2(t)|^2$ koefizienteen adierazpenak, eta azter ezazu denborarekin duten garapena. Zergatik erlaziona dezakegu H_{12} balioa ψ_1 eta ψ_2 egoeren arteko trantsizioaren probabilitatearekin?

Dakigunez $\Psi = \sum_j c_i\psi_i \Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_j c_j\psi_j\right) = \hat{H}\left(\sum_j c_j\psi_j\right) =$

$= \sum_j c_j\hat{H}\psi_j$ orduan bi aldeetan biderkatuz ψ_i batekin:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Big(\sum_{i,j} c_j\underbrace{(\psi_i,\psi_j)}_{\delta_{ij}}\Big) = \sum_{i,j} c_j\underbrace{(\psi_i\hat{H}\psi_j)}_{H_{ij}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Big(c_j\sum_{ij}\delta_{ij}\Big) = \Big(\sum_{i,j} H_{ij}\Big)c_j$$

Gure kasura eramanda: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ izango da.

• Definizioz $\mathcal{H}_{12} = (\psi_1, \hat{H}\psi_2) = (\hat{H}\psi_1, \psi_2) = (\psi_2, \hat{H}\psi_1)^* = \mathcal{H}_{21}^*$ Q.E.D

• $\mathcal{H}_{11} = \mathcal{H}_{22} = \mathcal{H}$ eta $\mathcal{H}_{12}$ erreala bada $\mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_{21} = \mathcal{H}'$ orduan, hurrengo sistema dugu:

$$\begin{cases} i\hbar\, \dot{C}_1 = \mathcal{H} C_1 + \mathcal{H}' C_2 & (1) \\ i\hbar\, \dot{C}_2 = \mathcal{H}' C_1 + \mathcal{H} C_2 & (2) \end{cases}$$

(1)-(2) eginez $\rightarrow i\hbar(\dot{C}_1 - \dot{C}_2) = (\mathcal{H} - \mathcal{H}')(C_1 - C_2)$

(1)+(2) eginez $\rightarrow i\hbar(\dot{C}_1 + \dot{C}_2) = (\mathcal{H} + \mathcal{H}')(C_1 + C_2)$

hurrengo aldagai aldaketa eginez $u = C_1 - C_2$ eta $v = C_1 + C_2$

$$i\hbar\, \dot{u} = (\mathcal{H} - \mathcal{H}')\, u \Rightarrow u = A e^{-i\frac{(\mathcal{H}-\mathcal{H}')}{\hbar}t} = C_1 - C_2 \quad (3)$$

$$i\hbar\, \dot{v} = (\mathcal{H} + \mathcal{H}')\, v \Rightarrow v = B e^{-i\frac{(\mathcal{H}+\mathcal{H}')}{\hbar}t} = C_1 + C_2 \quad (4)$$

$$(3)+(4) \longrightarrow A e^{-i\frac{(\mathcal{H}-\mathcal{H}')}{\hbar}t} + B e^{-i\frac{(\mathcal{H}+\mathcal{H}')}{\hbar}t} = 2C_1 \Rightarrow \boxed{C_1 = a\, e^{-i\frac{\mathcal{H}}{\hbar}t} = a e^{-i\omega t}}$$

$$(4)-(3) \longrightarrow B e^{-i\frac{(\mathcal{H}+\mathcal{H}')}{\hbar}t} - A e^{-i\frac{(\mathcal{H}-\mathcal{H}')}{\hbar}t} = 2C_2 \Rightarrow \boxed{C_2 = b\, e^{-i\frac{\mathcal{H}}{\hbar}t} = b\, e^{-i\omega t}}$$

Non $\mathcal{H}_{11} = \mathcal{H}_{22}$ direnez daukagu $|C_1|^2 = |C_2|^2 \Rightarrow a = b$ izango dira. Hau da neurtu ahal ditugu bi autobalioak probabilitate berberarekin.

• Autofuntzioak eta autobalioak.

Autobalioak ateratzeko:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} a e^{-i\omega t} \\ a e^{-i\omega t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & \hat{H} & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a e^{-i\omega t} \\ a e^{-i\omega t} \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} a e^{-i\omega t} \\ a e^{-i\omega t} \end{pmatrix}$$

Hau da autobalioak $E = \hbar\omega$ izango dira 2-ko endekapenarekin.

Eta autofuntzioak. $\begin{pmatrix} -\hbar\omega & 0 \\ 0 & -\hbar\omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 0 \iff \begin{cases} v_1 = (0,1) \\ v_2 = (1,0) \end{cases} \Rightarrow \begin{matrix} \psi_1' = b\,\psi_2 \\ \psi_2' = a\,\psi_1 \end{matrix}$

- Hasieran sistema $\Psi(x,0) = \psi_1$. Eta hauek Hamiltondearraren autofuntzioa direnez $\Psi(x,t) = \psi_1$ izango da beti.

- Dakigunez $|C_1|^2 = 1$ izango da eta $|C_2|^2 = 0$ eta lehen esan dugun bezala $\Psi(x,t) = \psi_1$ izango da bakarrik, beraz $|C_1|^2(t) = 1$ eta $|C_2|^2(t) = 0$ azken honetatik atera dezakegu $b=0$ izango dela.

2. Kalkulatu a zabalerako potentzial-osin infinituan mugitzen den m masadun partikulari dagokion Hamiltondarraren autofuntzioen oinarrian momentu linealak duen adierazpen matriziala.

Dakigunez: $\hat{P}_{nm} = (\psi_n, \hat{p}\,\psi_m)$ izango da eta $\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin\left[\frac{n\pi}{a}(x - a/2)\right]$

Hau jakinda: $\hat{P}_{nm} = \frac{2}{a}\int_{-a/2}^{a/2} \sin\left[\frac{n\pi}{a}(x - a/2)\right](-i\hbar)\frac{m\pi}{a}\cos\left[\frac{n\pi}{a}(x - a/2)\right] dx =$

$$= -i\hbar\,\frac{2\pi m}{a^2}\int_{-a/2}^{a/2} \sin\left[\frac{n\pi}{a}\left(x - \frac{a}{2}\right)\right]\cos\left[\frac{m\pi}{a}\left(x - \frac{a}{2}\right)\right] dx$$

Dakigu $n = m$ orduan $\hat{P}_{nn} = 0$ izango dela simetriagatik beraz $m \neq n$ kasua aztertuko dugu.

$$\hat{P}_{nm} = -i\hbar\,\frac{2\cancel{\pi} m}{a^{\cancel{2}}}\cdot\frac{\cancel{a}}{\cancel{\pi}}\;\frac{(n - n\cos m\pi\,\cos n\pi - m\sin m\pi\sin n\pi)}{(m^2 - n^2)}$$

Gainera $n, m \in \mathbb{N}$ daudenez: $\hat{P}_{nm} = -i\hbar\,\frac{2}{a}\,\frac{mn}{m^2 - n^2}\left(1 - (-1)^m(-1)^n\right) \Leftrightarrow$

$$\Leftrightarrow \hat{P}_{nm} = i\hbar\,\frac{2mn}{a(m^2 - n^2)}\left((-1)^{m+n} - 1\right) \begin{cases} \nearrow -i\hbar\,\frac{2mn}{a(m^2 - n^2)} & n+m \text{ bak} \\ \searrow 0 & n+m \text{ bik} \end{cases}$$

Beraz
$$\boxed{\hat{P}_{nm} = \begin{cases} 0 & ;\ m = n \text{ eta } m+n \text{ bikoiti} \\ -i\hbar\,\frac{2mn}{a(m^2 - n^2)} & ;\ m+n \text{ bakoiti} \end{cases}}$$

3. Sistema baten uhin-funtzioen oinarri ortonormala bi egoeraz osoturik dago: $\{\phi_1, \phi_2\}$. Oinarri honetan adierazita sistemaren hamiltondarra beheko matrizearen bidez adierazten dugu:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 + \varepsilon & (\sqrt{2}+i)\varepsilon \\ (\sqrt{2}-i)\varepsilon & E_0 - \varepsilon \end{pmatrix}$$

Izan daiteke ε zenbaki irudikari bat? Hasieran ($t=0$ aldiunean) sistema ϕ_1 egoeran badago, zein da edozein t aldiune batean ϕ_2 egoeran aurkitzeko probabilitatea?

Definizioz dakigu $H_{ij} = (\phi_i, \hat{H}\phi_j) = (\hat{H}\phi_i, \phi_j) = (\phi_j, \hat{H}\phi_i)^* = H_{ji}^* \Rightarrow$
$\Rightarrow H_{ii} = H_{ii}^*$ edo beste modu batean esanda $H_{ii} \in \mathbb{R}$.

Beraz H_{11} eta $H_{22} \in \mathbb{R} \Leftrightarrow (E_0 \pm \varepsilon) \in \mathbb{R} \Rightarrow$ ezinezkoa da ε irudikaria izatea.

Kalkulatu behar ditugu H-ren autobalioak eta autofuntzioak.

H-ren autofuntzioak: $\begin{cases} E_1 = E_0 - 2\varepsilon \\ E_2 = E_0 + 2\varepsilon \end{cases}$

Autobalioak:

$E_1 = E_0 - 2\varepsilon$: (Puedo coger cualquiera?)

$$\begin{pmatrix} 3\varepsilon & (\sqrt{2}+i)\varepsilon \\ (\sqrt{2}-i)\varepsilon & \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow (\sqrt{2}-i)\alpha = -\beta \Rightarrow \psi_1 = \frac{1}{2}(\sqrt{2}-i, -1)$$

$E_2 = E_0 + 2\varepsilon$:

$$\begin{pmatrix} -\varepsilon & (\sqrt{2}+i)\varepsilon \\ (\sqrt{2}-i)\varepsilon & -3\varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 0 \Longrightarrow \alpha = \sqrt{2}+i\beta \Rightarrow \psi_2 = \frac{1}{2}(1, \sqrt{2}+i)$$

Orduan daukagu oinarri berria $\beta' = \{\psi_1, \psi_2\}$ izango dena.

Beraz honekin daukagu: $T_{\beta'}^{-1} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} i+\sqrt{2} & 1 \\ -1 & -i+\sqrt{2} \end{pmatrix}$

$$\phi_1 = T_{\beta}^{-1}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(i+\sqrt{2})\psi_1 - \frac{1}{2}\psi_2$$

$$\phi_2 = T_{\beta}^{-1}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\psi_1 + \frac{1}{2}(-i+\sqrt{2})\psi_2$$

Beraz gure $\psi'(x,0) = \phi_1 = \frac{1}{2}\left[(i+\sqrt{2})\psi_1 - \psi_2\right] \Rightarrow$

$$\Rightarrow \psi'(x,t) = \frac{1}{2}\left[(i+\sqrt{2})\, e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}\psi_1 - e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}\psi_2\right]$$

Orduan $C_2(t) = (\phi_2, \psi(x,t)) = \frac{1}{4}\left(1, \sqrt{2}+i\right)\begin{pmatrix} i+\sqrt{2}\, e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \\ -e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}\end{pmatrix} =$

$$= \frac{(\sqrt{2}+i)}{4}\left(e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} - e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}\right) = \frac{(\sqrt{2}+i)\, e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t}}{4}(2i)\sin\left(\frac{2\varepsilon}{\hbar}t\right) =$$

$$= e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t}\,\frac{(-1+i\sqrt{2})}{2}\sin\left(\frac{2\varepsilon}{\hbar}t\right)$$

Han da $\boxed{\mathbb{P}(\phi_2)(t) = \frac{3}{4}\sin^2\left(\frac{2\varepsilon}{\hbar}t\right)}$

4. Sistema kuantiko baten Hamiltondarraren ortonormalizaturiko autofuntzioak ψ_n deitzen ditugu. Egoera hauen energiak E_n dira. Hasiera batean ($t=0$) sistema ψ egoeran dago. Egoera horretan $\hat{A}$ behagarria neurtzen badugu $+1$ neurtuko genukeen zehaztasun osoarekin. $\hat{A}$ behagarria ondorengo erlazioak betetzen ditu:

$$\hat{A}\psi_1 = \psi_2 \,;\; \hat{A}\psi_2 = \psi_1 \,;\; \text{eta } \hat{A}\psi_n = 0 \quad n \geq 3$$

- Aurki itzazu $\hat{A}$ eragilearen autofuntzioak
- Beste edozein t aldiune batean, A neurtzen dugu $\psi(t)$, zein da $+1$ lortzeko probabilitatea?

- Lehenengo behar dugu $\hat{A}$-ren adierazpena:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} (\psi_1, \hat{A}\psi_1) & (\psi_1, \hat{A}\psi_2) \\ (\psi_2, \hat{A}\psi_1) & (\psi_2, \hat{A}\psi_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Beraz autobalioak $\det(\hat{A} - \lambda \mathbb{1}) = 0 \Leftrightarrow \lambda^2 - 1 = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} \lambda_+ = 1 \\ \lambda_- = -1 \end{cases}$

Beraz hauen autofuntzioak:

λ_+:

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \vec{0} \Rightarrow v_+ = (1,1) \Leftrightarrow \phi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + \psi_2)$$

λ_-:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \vec{0} \Rightarrow v_- = (1,-1) \Leftrightarrow \phi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 - \psi_2)$$

Beraz $\hat{A}$-ren autofuntzioak $\{\phi_+, \phi_-\}$ izango dira.

- Dakigunez $\hat{A}\psi = +1\,\psi \Rightarrow \psi(x,0) = \phi_+$ eta hau Hamiltondarraren oinarrian jarriz denborarekiko menpekotasuna ikusi ahal izateko.

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 + \Psi_2) \Rightarrow \Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi_1 e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + \Psi_2 e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}\right)$$

Beraz nahi dugu +1 agertzeko probabilitatea $\Rightarrow$

$$\Rightarrow C_1(t) = (\phi_1, \Psi(x,t)) = \frac{1}{2}(1, +1)\begin{pmatrix} e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \\ +e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}\right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \mathbb{P}(\phi_+) = |C_1(t)|^2 = \frac{1}{4}\left(2 + e^{-i\left(\frac{E_1-E_2}{\hbar}\right)t} + e^{i\frac{(E_1-E_2)}{\hbar}t}\right) = \frac{1+\cos\left(\frac{E_1-E_2}{\hbar}t\right)}{2} \Rightarrow$$

$$\boxed{\mathbb{P}(\phi_+) = \cos^2\left(\frac{E_1-E_2}{2\hbar}t\right)}$$

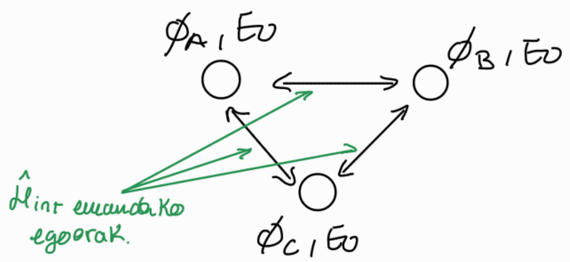
2.G.

5. Berdinak diren hiru atomoz (A,B,C) osoturiko molekula lineal batean elektroi bakar bat dugu, eta ϕ_A, ϕ_B eta ϕ_C dira elektroi horren A, B eta C atomoetan lokalizaturiko uhin-funtzio ortonormalak, hurrenez hurren. Ondorengo azterpenerako hiru uhin-funtzio hauek osotzen duten azpi-espazioan zentratuko gara. Beraz, $\{\phi_A, \phi_B, \phi_C\}$ da elektroiak izan ditzakeen egoeren oinarria. Atomo batean lokalizaturiko elektroiak beste atomoekin duen elkarrekintza desagertuz ezkero (hau da elektroiak ez luke atomo batetik bestera salto egingo), $\hat{H}_0$ Hamiltondarrari dagokion uhin-funtzioak ϕ_A, ϕ_B eta ϕ_C izango lirateke, hiru egoera hauen energia berdina izanik: E_0. Baina ϕ_A, ϕ_B eta ϕ_C egoera hauen arteko akoplamendua Hamiltondarrean dugu beste ekarpen baten bidez ($\hat{H}_{int}$) deskribatuko dugu, non $\hat{H}_{int}$-k betetzen duen erlazioak ondorengoak diren:

$$\hat{H}_{int}\,\phi_A = -a\,\phi_B \quad , \quad \hat{H}_{int}\,\phi_B = -a\,\phi_A - a\,\phi_C \quad , \quad \hat{H}_{int}\,\phi_C = -a\,\phi_B$$

a konstante positiboa.

- Lor itzazu $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}$ Hamiltondarraren egoera geldikorrak eta hauen energiak
- $t=0$ aldiunean elektroia ϕ_A egoeran dago (beraz, A atomoaren inguruan dago lokalizaturik). Aztertu ezazu elektroiaren gutxigorabehérako kokapena denboraren funtzioan. t aldiuneren batean elektroia A, B edo C atomoaren inguruan erabat lokalizaturik egongo al da?
- $\hat{D}$ behagarri baten autofuntzioak ϕ_A, ϕ_B, ϕ_C dira, hauen autobalioak, $-d, 0, d$ hurrenez hurren. t aldiunean $\hat{D}$ neurtzerakoan zeintzuk dira neurtu ditzakegun balioak eta zein probabilitatearekin?
- Elektroiaren hasierako egoera edozein bat denean, zeintzuk dira $\langle \hat{D} \rangle$-n ager daitezkeen maiztasunak? Zein izan daiteke $\hat{D}$ behagarriaren interpretasio fisikoren bat?



• $\hat{\mathcal{H}}$ lortzeko $\hat{H}_0$ eta $\hat{H}_{in}$ lortu behar dugu.

$\hat{H}_0$ berealakoa izango da: $\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & 0 \\ 0 & E_0 & 0 \\ 0 & 0 & E_0 \end{pmatrix}$

$\hat{H}_{int}$ lortzeko definizioa erabiliko dugu:

$$\hat{H}_{int} = \begin{pmatrix} 0 & (\phi_A, \hat{H}_{int}\phi_B) & (\phi_A, \hat{H}_{int}\phi_C) \\ (\phi_B, \hat{H}_{int}\phi_A) & 0 & (\phi_B, \hat{H}_{int}\phi_C) \\ (\phi_C, \hat{H}_{int}\phi_A) & (\phi_C, \hat{H}_{int}\phi_B) & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -a & 0 \\ -a & 0 & -a \\ 0 & -a & 0 \end{pmatrix}$$

$$(\phi_A, \hat{H}_{int}\phi_B) = (\phi_B, \hat{H}_{int}\phi_A) = (\phi_B, \hat{H}_{int}\phi_C) = (\phi_C, \hat{H}_{int}\phi_B) = -a$$
$$(\phi_A, \hat{H}_{int}\phi_C) = (\phi_C, \hat{H}_{int}\phi_A) = 0$$

Beraz Hamiltondarra bien batura izanda:

$\hat{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} E_0 & -a & 0 \\ -a & E_0 & -a \\ 0 & -a & E_0 \end{pmatrix}$ izango da.

Beraz Hamiltondarraren autobalioak, hau da energiak: $\begin{cases} E_1 = E_0 \\ E_2 = E_0 - \sqrt{2}\,a \\ E_3 = E_0 + \sqrt{2}\,a \end{cases}$

Eta honen egoera geldikorrak, edo haren autofuntzioak:

• $E_1 = E_0$

$$\begin{pmatrix} 0 & -a & 0 \\ -a & 0 & -a \\ 0 & -a & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \vec{0} \Rightarrow \begin{cases} \beta = 0 \\ \alpha = -\gamma \end{cases} \Rightarrow v_1 = (-1, 0, 1) \Rightarrow \phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\phi_A + \phi_C)$$

• $E_2 = E_0 - \sqrt{2}\,a$

$$\begin{pmatrix} \sqrt{2}a & -a & 0 \\ -a & \sqrt{2}a & -a \\ 0 & -a & \sqrt{2}a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \vec{0} \Rightarrow \begin{cases} \sqrt{2}a\,\alpha = a\beta & (1) \\ -a\alpha - a\gamma = -\sqrt{2}a\beta & (2) \\ \sqrt{2}a\,\gamma = a\beta & (3) \end{cases}$$

$\frac{(1)}{(3)} \rightarrow \gamma = \alpha$

$(2) \rightarrow \beta = \frac{2}{\sqrt{2}} = \sqrt{2}$

Beraz $v_2 = (1, \sqrt{2}, 1) \Rightarrow \phi_2 = \frac{1}{2}(\phi_A + \sqrt{2}\phi_B + \phi_C)$

- $E_3 = E_0 + \sqrt{2}a \rightarrow v_3 = (1, -\sqrt{2}, 1) \Rightarrow \phi_3 = \frac{1}{2}(\phi_A - \sqrt{2}\phi_B + \phi_C)$

Beraz Hamiltondarraren energiak E_0 eta $E_0 \pm \sqrt{2}a$ izango dira eta haren egoera geldikorrak $\{\phi_1, \phi_2, \phi_3\}$ izango dira

Gainera daukagu oinarri aldaketaren matrizea $T_{\beta'} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$

Honekin atera ahal ditugu gure ϕ_A, ϕ_B, ϕ_C $\{\phi_1, \phi_2, \phi_3\}$ oinarrian

$$\phi_A = T_{\beta'}^{-1}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(-\sqrt{2}\phi_1 + \phi_2 + \phi_3)$$

$$\phi_B = T_{\beta'}^{-1}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_2 - \phi_3)$$ Gero erabiliko ditugu.

$$\phi_C = T_{\beta}^{-1}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\sqrt{2}\phi_1 + \phi_2 + \phi_3)$$

- Dakigu $\Psi(x,0) = \phi_A$ izango dela, hau Hamiltondarraren oinarrira pasatuz gero denboraren menpekotasuna sartu ahal izateko:

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{2}(-\sqrt{2}\phi_1 + \phi_2 + \phi_3) \Rightarrow \Psi(x,t) = \frac{1}{2}\left(-\sqrt{2}\, e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}}\phi_1 + e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}}\phi_2 + e^{-i\frac{E_3 t}{\hbar}}\phi_3\right) =$$

$$= \frac{e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t}}{2}\left(-\sqrt{2}\phi_1 + e^{i\frac{\sqrt{2}a}{\hbar}t}\phi_2 + e^{-i\frac{\sqrt{2}a}{\hbar}t}\phi_3\right)$$ Baliokidea da esatea:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{2}\left(-\sqrt{2}\phi_1 + e^{i\frac{\sqrt{2}a}{\hbar}t}\phi_2 + e^{-i\frac{\sqrt{2}a}{\hbar}t}\phi_3\right)$$ Beraz sartzen dugu β oinarria.

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{2}\left[-\sqrt{2}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}(-\phi_A + \phi_C) + e^{i\frac{\sqrt{2}a}{\hbar}t}\frac{1}{2}(\phi_A + \sqrt{2}\phi_B + \phi_C) + \right.$$

$$\left. + e^{-i\frac{\sqrt{2}a}{\hbar}t}\frac{1}{2}(\phi_A - \sqrt{2}\phi_B + \phi_C)\right]$$ $b = \frac{\sqrt{2}a}{\hbar}$

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{2}\Big\{\Big[1 + \frac{1}{2}\left(e^{ibt} + e^{-ibt}\right)\Big]\phi_A +$$

$$+ \frac{\sqrt{2}}{2}\left(e^{ibt} - e^{-ibt}\right)\phi_B +$$

$$+ \Big[-1 + \frac{1}{2}\left(e^{ibt} + e^{-ibt}\right)\Big]\phi_C\Big\} =$$

$$= \frac{1}{2}\Big\{\big[1 + \cos(bt)\big]\phi_A + i\sqrt{2}\,\sin(bt)\,\phi_B + \big[\cos(bt) - 1\big]\phi_C\Big\} =$$

$$= \frac{1}{2}\Big\{2\cos^2\left(\frac{bt}{2}\right)\phi_A + i\sqrt{2}\,\sin(bt)\,\phi_B - 2\sin^2\left(\frac{bt}{2}\right)\phi_C\Big\}$$

Beraz:

$$\boxed{P(A) = \cos^4\left(\frac{\sqrt{2}\,a t}{2\hbar}\right), \quad P(B) = \frac{1}{2}\sin^2\left(\frac{\sqrt{2}\,a}{\hbar}t\right), \quad P(C) = \sin^4\left(\frac{\sqrt{2}\,a t}{2\hbar}\right)}$$

Erabat lokalizatuta egongo da atomo bakoitzean:

$$P(A) \stackrel{!}{=} 1 \iff \cos\left(\frac{\sqrt{2}\,a t_A}{2\hbar}\right) = 1 \iff \frac{\sqrt{2}\,a\, t_A}{2\hbar} = n\pi \iff \boxed{t_A = \frac{\sqrt{2}\,\hbar\, n\pi}{a} \quad \forall n \in \mathbb{N}}$$

$$P(B) \stackrel{!}{=} 1 \iff \sin\left(\frac{\sqrt{2}\,a}{\hbar}t_B\right) = \sqrt{2} \leftarrow \text{ezinezkoa} \Rightarrow \boxed{\text{ez da inoiz B-n lokalizaturik egongo.}}$$

$$P(C) \stackrel{!}{=} 1 \iff \sin\left(\frac{\sqrt{2}\,a t_C}{2\hbar}\right) = 1 \iff \frac{a}{\sqrt{2}\,\hbar} t_C = \left(\frac{1}{2} + n\right)\pi \iff \boxed{t_C = \frac{\sqrt{2}\,\hbar}{a}\left(\frac{1}{2} + n\right)\pi \quad \forall n \in \mathbb{N}}$$

- $\hat{D}$ dakigu β oinarrian $-d, 0, d$ autobalioak dituela $\Rightarrow$

$$\Rightarrow \hat{D}_\beta = \begin{pmatrix} -d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d \end{pmatrix}$$

Beraz aurreko emaitza erabiliz:

$$\boxed{P(-d) = P(A) \; ; \; P(0) = P(B) \text{ eta } P(d) = P(C)}$$

- Hasierako egoera edozein izanda: $\Psi(x,0) = \alpha\,\phi_1 + \beta\,\phi_2 + \gamma\,\phi_3$

$\hat{D}$ jarri behar dugu β' oinarrian:

$$(\phi_1, \hat{D}\phi_1) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(-\phi_A + \phi_C), \hat{D}\frac{1}{\sqrt{2}}(-\phi_A + \phi_C)\right) = \frac{1}{2}(-d+d) = 0$$

$$(\phi_1, \hat{D}\phi_2) = (\phi_1, \hat{D}\phi_3) = (\phi_2, \hat{D}\phi_1) = (\phi_3, \hat{D}\phi_1) = -\frac{d}{\sqrt{2}}$$

$$(\phi_2, \hat{D}\phi_2) = (\phi_2, \hat{D}\phi_3) = (\phi_3, \hat{D}\phi_2) = (\phi_3, \hat{D}\phi_3) = 0$$

Beraz $$\hat{D}_{\beta'} = -\frac{d}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$ izango da.

Beraz, dakigunez $\Psi(x,t)$ aurrekoa hartuko dugu $\Rightarrow$

$\Rightarrow \Psi(x,t) = \frac{1}{2}(-\sqrt{2}\phi_1 + e^{ibt}\phi_2 + e^{-ibt}\phi_3)$ Beraz:

$$\langle\hat{D}\rangle(t) = -\frac{d}{4\sqrt{2}}\left(-\sqrt{2}\phi_1, e^{-ibt}, e^{ibt}\right)\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -\sqrt{2} \\ e^{ibt} \\ e^{-ibt} \end{pmatrix} =$$

$$= -\frac{d}{4\sqrt{2}}\left(2\cos bt, -\sqrt{2}, -\sqrt{2}\right)\begin{pmatrix} -\sqrt{2} \\ e^{ibt} \\ e^{-ibt} \end{pmatrix} = \cancel{-}+\frac{d}{\cancel{4\sqrt{2}}}\,\cancel{-2\sqrt{2}}\,(\cos bt + \cos bt) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle\hat{D}\rangle(t) = d\cos\omega t \quad \text{eta} \quad \omega = \frac{\sqrt{2}a}{\hbar}}$$

momentu dipolarraren antza du non $d = p_0$ izango da eta e^--a atomo bakoitzean lokalizaturik dagoenean hau da t_A eta t_C denboretan izango dugu $\langle\hat{D}\rangle(t_{A,C})$ momentu dipolarra.

6. Sistema baten egoera kuantikoen ortonormala den ondorengo oinarria dute: $\{\phi_1, \phi_2, \phi_3\}$. Oinarri horretan, Hamiltondarraren ($\hat{H}$) eta beste bi behagarrien ($\hat{A}$ eta $\hat{B}$) adierazpen matrizialak hauek dira:

$$\hat{H} = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad \hat{A} = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{eta} \quad \hat{B} = b \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

non ω_0, a eta b konstante positiboak eta errealak diren. Sistema fisikoaren hasierako egoera ondorengoa izanik:

$$\psi(t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1 + \frac{1}{2}\phi_2 + \frac{1}{2}\phi_3$$

erantzun ondorengo galderak

- Trukakorrak al dira $\hat{H}$ eta $\hat{A}$? eta $\hat{A}$ eta $\hat{B}$? Zein bikotek osotzen dute behagarri trukakorreko multzo osoa?
- Aurki al dezakegu $\hat{H}$ eta $\hat{A}$-ren aldibereko autofuntzio-oinarririk? Zein da? Eta $\hat{H}$ eta $\hat{B}$-rena?
- $t=0$ aldiunean, energia neurtzen badugu zeintzuk dira lor ditzakegun balioak eta hauen probabilitateak? Zein da $\langle \hat{H} \rangle$ eta $\Delta \hat{H}$?
- Edozein t aldiune batean $\hat{A}$ neurtzen badugu, zeintzuk dira lor ditzakegun balioak eta hauen probabilitateak? Kalkulatu $\langle A \rangle(t)$ eta $\Delta A(t)$
- Gauza bera baina $\hat{B}$ eragilearekin.

- Trukakorrak diren ikusteko:

$-[\hat{H},\hat{A}] = \hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H} = \vec{0} \Rightarrow$ Bai direla trukakorrak

$-[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \neq \vec{0} \Rightarrow$ Ez dira trukakorrak

- Trukakorrak direnez bai aurkitu ahal dugula.

Hau aurkitzeko a diagonalizatuko dugu, beste era esanda $\hat{H}$-ren oinarrian jarriko dugu:

Dakigu $\hat{A}$-ren autobalioak eta autofuntzioak
$$\begin{cases} \lambda = -a \rightarrow \phi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\phi_2 + \phi_3) \\ \lambda = a \rightarrow \phi_a^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_2 + \phi_3) \\ \lambda = a \rightarrow \phi_a^2 = \phi_1 \end{cases}$$

orduan gure oinarri berria $\{\phi_{-a}, \phi_a^1, \phi_a^2\}$ izango da bien aldibereko oinarria.

Multzo osoa osotzen duten ikusteko:

$\hat{H}$	$\hat{A}$	$\hat{H}$	$\hat{A}$
$\hbar\omega_0$	a	$\cancel{\phi_1}$	$\cancel{\phi_1}, \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_2+\phi_3)$
$\hbar\omega_0$	$-a$	ϕ_1	$\frac{1}{\sqrt{2}}(-\phi_2+\phi_3)$ ← No es posible.
$2\hbar\omega_0$	a	ϕ_2, ϕ_3	$\phi_1, \cancel{\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_2+\phi_3)}$
$2\hbar\omega_0$	$-a$	ϕ_2, ϕ_3	$\cancel{\frac{1}{\sqrt{2}}(-\phi_2+\phi_3)}$

Beraz bai osotzen dutela multzo osoa.

$\hat{H}$ eta $\hat{B}$-rena aurkitzeko lehenengo trukakorrak izan behar dira, eta ez direnez, ezinezkoa da.

- Lor ditzakegun energiaren balioen probabilitateak $\mathbb{P}(\hbar\omega_0) = \frac{1}{2}$ eta $\mathbb{P}(2\hbar\omega_0) = \frac{1}{4}$ izango dira.

$$\langle \hat{H} \rangle = (\Psi, \hat{H}, \Psi) = \frac{3\hbar\omega_0}{2} \quad \text{eta} \quad \langle \hat{H}^2 \rangle = (\Psi, \hat{H}^2\Psi) = \frac{5\hbar^2\omega_0^2}{2}$$

Beraz $\Delta\hat{H} = \sqrt{\frac{5\hbar^2\omega_0^2}{2} - \frac{9\hbar^2\omega_0^2}{4}} = \frac{\hbar^2\omega_0^2}{2}$

- $\hat{A}(t)$ neurtzen badugu ze balioak lortuko genituzke?

Dakigu $\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1 e^{-i\omega_0 t} + \frac{e^{-i2\omega_0 t}}{2}(\phi_2+\phi_3) \Rightarrow$

$$\Rightarrow \Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_0 t}\phi_a^2 + \frac{e^{-i2\omega_0 t}\sqrt{2}}{2}\phi_a^1$$

Hau da $\mathbb{P}(a)(t) = 1$ eta $\mathbb{P}(-a)(t) = 0$

$$\left.\begin{array}{l}\langle\hat{A}\rangle(t) = (\Psi, \hat{A}\Psi) = a \\ \langle\hat{A}^2\rangle(t) = a^2\end{array}\right\} \Rightarrow \Delta A(t) = 0$$

- Con B

$$\langle B\rangle(t) = \frac{b}{4} + \frac{b}{\sqrt{2}}\cos(w_0 t)$$

$$\langle B^2\rangle(t) = b^2$$

Por lo que: $\Delta B(t) = \sqrt{b^2 - \frac{b^2}{16} + \frac{b^2}{2\sqrt{2}}\cos(w_0 t) + \frac{b^2}{2}\cos^2(w_0 t)}$

3. Gaia (Dimentsio bakarreko potentzialak)

Partikula askea.

1. Hasierako ($t=0$) uhin-funtzio bati, $\Psi(x,t=0)$, dagokion Fourier-en transformatua $A(k) = Ce^{-\alpha|k-k_0|}$ da (k_0 eta α konstanteak dira). Zeintzuk dira C, k_0 eta α konstanteen unitateak (NSn)?). Kalkula ezazu uhin-funtzioan adierazpena edozein aldiunetan ondorengo bi kasuetan:

- Uhin-funtzioak hutsean desplazatzen den eremu elektrikoa adierazten duenean.
- m masadun partikula aske baten uhin-funtzioa denean.

Kasu bakoitzean uhin-funtzioak denborarekiko izango duen garapena grafikoki aztertzeko, irudika itzazue funtzio hauen moduluen karratuak (*Dentsitate-Probabilitatea*) aldiune ezberdinetan. Azaldu eta interpretatu bi kasuen artean ikusten dituzuen ezberdintasunak.

• Unitateak jakiteko, lehenengo jakin behar dugu k-ren unitateak:

$$p = \hbar k \Rightarrow [k] = \frac{J\,s}{kg\,m/s} = \frac{J\,s^2}{kg\,m} = \frac{kg\,m^2\,s^2}{kg\,m\,s^2} = m$$

Hau jakinda. Esponentzialen esponenteak izan behar dira derrigorrez adimentsionalak $\Rightarrow$ $[k_0] = [k] = m^{-1}$ eta $[\alpha] = [k]^{-1} = m$

$$[A(k)] = [C] = \sqrt{[k]} = m^{1/2} \Rightarrow \boxed{[k_0] = m^{-1}, [C] = m^{1/2} \text{ eta } [\alpha] = m}$$

• $\Psi(x,t)$ eremu elektrikoa bada adierazten duena:

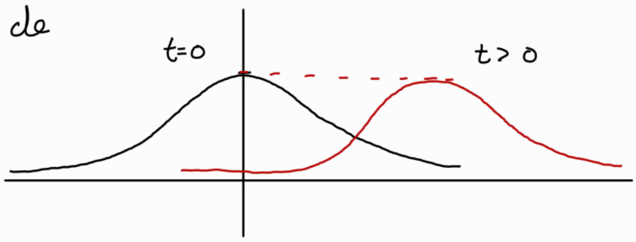
$$\Psi(x,t=0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k)\, e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\int_{-\infty}^{k_0} C\, e^{\alpha(k-k_0)}\, e^{ikx}\, dk + \int_{k_0}^{\infty} C\, e^{-\alpha(k-k_0)}\, e^{ikx}\, dk \right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{C\, e^{ik_0x}}{\alpha + ix} + \frac{C\, e^{ik_0x}}{\alpha - ix} \right) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, C\alpha\, \frac{e^{ik_0x}}{\alpha^2 + x^2}$$

Orduan uhin elektromagnetikoa izanda: $\Psi(x,t) = \Psi(x-\omega t, 0) \Rightarrow$

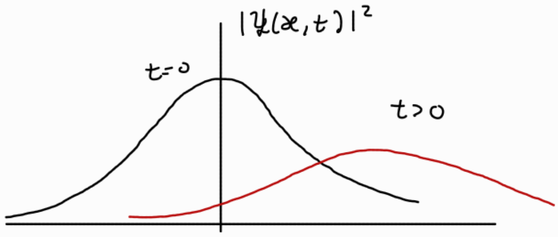
$$\Rightarrow \Psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, C\alpha\, \frac{e^{ik_0(x-\omega t)}}{\alpha^2 + (x-\omega t)^2}$$

Hau da



• Partikula masa bacu, dakige $\varepsilon_k = \frac{\hbar k^2}{2m} \Rightarrow$

$$\Rightarrow \Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k)\, e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t\right)}\, dk = \frac{e^{\left(\alpha k_0 t - \frac{2m x^2}{\hbar}\right)}\; e^{-i \frac{\alpha^2 2m}{\hbar}}}{\sqrt{2\alpha}\; \sqrt[4]{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{2m\alpha^2}}}$$



2.G.

2. $t = 0$ aldiunean, partikula baten uhin-funtzioa honako hau da:

$$\Psi(x, 0) = e^{-ax^2}$$

non a erreala eta positiboa den.

- Emandako funtzioa, partikula askeren baten uhin-funtzioa izan al daiteke? Erantzuna baiezkoa bada, kalkulatu al daiteke $\Psi(x, t)$ uhin-funtzioa?

- $\Psi(x, 0)$ uhin-funtzioa, egoera iraunkorren baten uhin-funtzioa izan al daiteke? Erantzuna baiezkoa bada, kalkulatu al daiteke $\Psi(x, t)$ uhin-funtzioa?

• Partikula askea izango da lurrengoa betetzen badu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \cancel{V(x)}^{\,0}\,\Psi = E\Psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}2a\Psi\left(-1 + 2ax^2\right) = E\Psi \Rightarrow$$

$$\Rightarrow E = -\frac{\hbar^2 a\,(2ax^2-1)}{m}$$ → ez da, ezinezkoa da x-ren menpean egotea.

• Egoera iraunkorra bada Hamiltondarraren autofuntzioa izan behar da ⇒

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' + V(x)\,\Psi = E\Psi \iff -\frac{a\hbar^2}{m}\left(2ax^2-1\right) + V = E$$

Orduan $E = \frac{\hbar^2 a}{m}$ bada eta $V(x) = -\frac{2\hbar^2 a^2 x^2}{m}$ bada $\Psi(x,0)$ egoera iraunkor bat izango litzateke eta

$$\boxed{\Psi(x,t) = e^{-ax^2}\cdot e^{-i\frac{\hbar^2 a}{m}t}}$$

3. G.

Potentzial osinak.

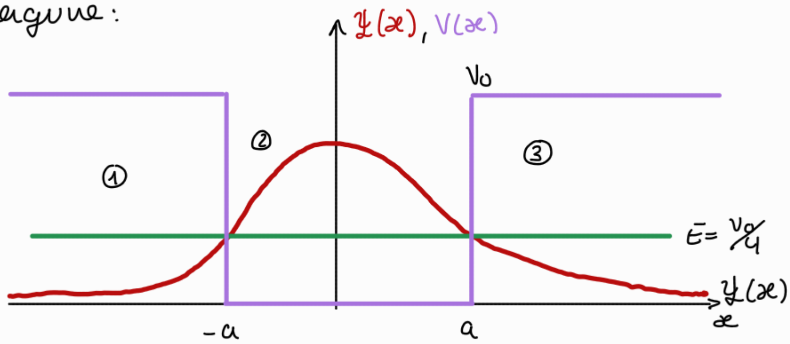
1. Kontsidera ezazu ondorengo dimentsio bakarreko energia potentziala:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| \leq a \\ V_0 > 0 & |x| \geq a \end{cases}$$

Suposa dezagun egoera lotu bat bakarra dagoela (oinarrizko egoera) eta oinarrizko energia honen balioa $E = V_0/4$ dela.

- Irudi berean adieraz ezazu energia potentziala eta oinarrizko uhin-funtzioari dagozkion irudiak (koalitatiboki).
- Kalkula ezazu oinarrizko uhin-funtzioari dagokion adierazpena (ez duzue normalizatu behar).
- Oinarrizkoa egoeraren energia $E = V_0/4$ denean, froga ezazu ondorengo erlazioa betetzen dela: $\sqrt{2mV_0}a/\hbar = 2\pi/3$.

∘ Orduan daukeguna:



∘ Orduan teoriatik dakigunez klasikoki debekaturik dauden eremuak esponentzial errealak izango dira eta klasikoki baimenduta daudenak esponentzial irudikariak:

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{K_1 x} + Be^{-K_1 x} & ; \; x < -a \\ Ce^{iK_2 x} + De^{-iK_2 x} & ; \; -a < x < a \\ Ee^{K_1 x} + Fe^{-K_1 x} & ; \; a < x \end{cases}$$

non $K_1 = \dfrac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ eta $K_2 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

M.B. aplikatuz gero: $B = 0$ eta $E = 0$ izango dira.

Oinarrizko egoera simetrikoa izango da $\Rightarrow$ $\Psi(-x) = \Psi(x)$

Orduan: ∘ $C = D$

orduan $\psi(x) = \begin{cases} Ae^{k_1 x} \\ C\cos(k_2 x) \\ Fe^{-k_1 x} \end{cases}$

Jarraitutasuna dela eta:

$\psi_1(-a) = \psi_2(-a) \Rightarrow Ae^{-k_1 a} = C\cos(k_2 a) \Longleftrightarrow A = Ce^{k_1 a}\cos(k_2 a)$

Eta simetria gatik $F=A$

Alan da: $\boxed{\psi(x) = \begin{cases} C\cos(k_2 a)\, e^{k_1(a+x)} & x < -a \\ C\cos(k_2 x) & -a \leq x \leq a \\ C\cos(k_2 a)\, e^{k_1(a-x)} & x > a \end{cases}}$

Izango da oinarrizko egoeraren adierazpen orokorra

- hau frogatzeko:

$k_1 = \sqrt{\dfrac{3mV_0}{2\hbar^2}}$ eta $k_2 = \sqrt{\dfrac{mV_0}{2\hbar^2}} = \dfrac{\sqrt{2mV_0}}{2\hbar}$

orduan dakigunez: $\psi_1'(-a) = \psi_2'(-a) \Longleftrightarrow k_1\cos(k_2 a) = k_2\sin(k_2 a) \Longleftrightarrow$

$\Longleftrightarrow \operatorname{tg}(k_2 a) = \sqrt{3} \Longleftrightarrow k_2 a = \dfrac{\pi}{3} \Longleftrightarrow \boxed{\dfrac{\sqrt{2mV_0}}{2\hbar} = \dfrac{2\pi}{3}}$

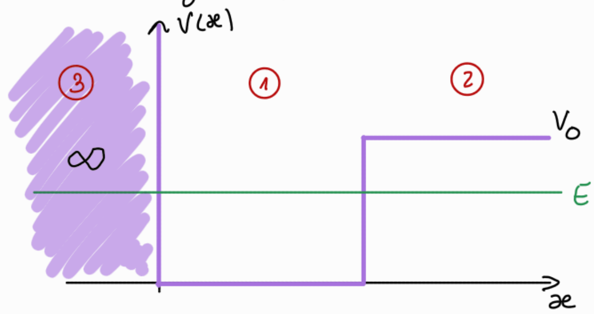
3. G.

2. Dimentsio bakar batean, partikula bat honako potentzial honetan dago,

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 < x < a \\ V_0 & a < x \end{cases}$$

- $E < V_0$ denean, lor ezazu energia onargarriak ematen dituen ekuazioa.
- m, a eta V_0-ren balioak direla eta, tarte horretan, posiblea al da energiak balio bat ere ez eukitzea? Kalkula ezazu (gutxi gora-behera, balio zehatza ez da beharrezkoa) zein izan behar den aurreko magnitudeen arteko erlazioa, gutxienez energiaren balio bat onargarria izateko.
- Justifikatu aurreko emaitza Ziurtasun Ezaren Printzipioaren ikuspuntutik.
- Demagun $\alpha \equiv \sqrt{2mV_0}a/\hbar = 5.236$ dela. Emandako taulari begira, energiak zenbat balio izango ditu $0 < E < V_0$ tartean? Zeintzuk dira balio hauek? (Gutxi gora-beherako balioak eman, inolako interpolaziorik egin gabe)
- Irudikatu (gutxi gora-behera) autobalio horiekin lotuta dauden autofuntzioak.

- Daukagun Potentziala:



ordun izango dugun uhin-funtzioaren adierazpena:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ A\cos(k_1 x) + B\sin(k_1 x) & 0 < x < a \\ Ce^{k_2 x} + De^{-k_2 x} & x > a \end{cases}$$

non $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ eta $k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

Orduan M.B. aplikatuz:

$\psi(x \to \infty) = 0 \Rightarrow C = 0$

$\psi(x = 0) = 0 \Rightarrow A = 0$

Beraz

$$\psi(x) = \begin{cases} B\sin(k_1 x) & x < a \\ De^{-k_2 x} & x > a \end{cases}$$

Jarraitutasuna dela eta:

$$\psi_1(a) = \psi_2(a) \Rightarrow B\sin(k_1 a) = De^{-k_2 a}$$

Beraz gure uhin-funtzioa:

$$\Psi(x) = \begin{cases} B\sin(k_1 x) & x<a \\ B\sin(k_1 a)\, e^{k_2(a-x)} & x>a \end{cases}$$

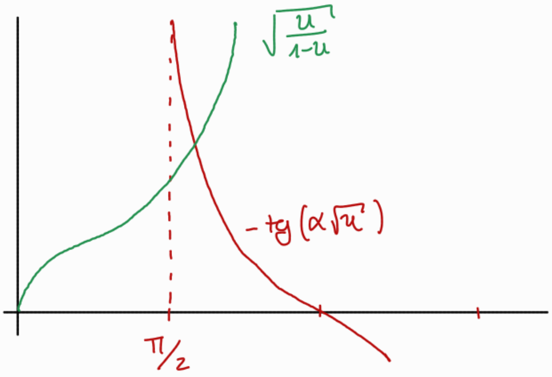
denean, hemendik deribatuak jarraiak izango direnez $x=a$ puntuan:

$$\Psi_1'(a) = \Psi_2'(a) \Rightarrow B k_1 \cos(k_1 a) = -B\sin(k_1 a) k_2 \Rightarrow tg(k_1 a) = -\frac{k_1}{k_2} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \boxed{tg\left(\frac{\sqrt{2mE}\,a}{\hbar}\right) = -\sqrt{\frac{E}{(V_0-E)}}}$$

Hau da energia onargarriak ematen dituen adierazpena.

- $\nexists E$?? Irudikatuko dugu $-tg(\alpha\sqrt{u}) = \sqrt{\frac{u}{(1-u)}}$ $\quad u = \frac{E}{V_0}$



Biak justo mozten dira $u=1$ puntuan, non asintota bat egongo da eta ondorioz hau gertatzeko $\alpha = \frac{\sqrt{2mV_0}\,a}{\hbar} \geq \frac{\pi}{2}$ izan behar da.

- Dakigu: $\alpha = \frac{\sqrt{2mV_0}\,a}{\hbar} = 5'236$ orduan: zer balio $0<E<V_0$ orduan bilatu behar ditugu tarteen balioak kurrengoa betetzen dutena

$$\sqrt{\frac{u}{1-u}} \approx -tg(\alpha\sqrt{u})$$

Lehenengoa: • $u=0'25$ bada $\Rightarrow E_1 = 0'25\, V_0$

• $u = 0'9$ bada $\Rightarrow E_2 = 0'9\, V_0$

- Irudikatzeko dakigu lehenengoa simetrikoa izango dela eta bigarrena antisimetrikoa