

Mathematica eta Mekanika Kuantikoa.

Ion Mitxelena, Davide de Sancho, Txema Merezero
eta
Xabier Lopez

2019.eko azaroaren 6

- 1 Mathematica. Oinarrizko kontzeptuak
- 2 Partikula bat Kaxa batean

Mathematica

Mathematica-n maiuskula eta minuskulak bereizten dira, eta parentesi mota desberdinek esanahi desberdina dute:

Mathematica

Mathematica-n maiuskula eta minuskulak bereizten dira, eta parentesi mota desberdinek esanahi desberdina dute:

- `[]` funtzioen aldagaiak adirezteko erabiltzen dira. `Sin[x]`.

Mathematica

Mathematica-n maiuskula eta minuskulak bereizten dira, eta parentesi mota desberdinek esanahi desberdina dute:

- `[]` funtzioen aldagaiak adirezteko erabiltzen dira. `Sin[x]`.
- `()` Eragiketak taldekatzeko erabiltzen da. `(6+4)/2`.

Mathematica-n maiuskula eta minuskulak bereizten dira, eta parentesi mota desberdinek esanahi desberdina dute:

- `[]` funtzioen aldagaiak adirezteko erabiltzen dira. `Sin[x]`.
- `()` Eragiketak taldekatzeko erabiltzen da. `(6+4)/2`.
- `{ }` zerrendak edo segidak definitzeko erabiltzen dira. `{X,0,10,1}`.

Mathematica-n maiuskula eta minuskulak bereizten dira, eta parentesi mota desberdinek esanahi desberdina dute:

- `[]` funtzioen aldagaiak adirezteko erabiltzen dira. `Sin[x]`.
- `()` Eragiketak taldekatzeko erabiltzen da. `(6+4)/2`.
- `{}` zerrendak edo segidak definitzeko erabiltzen dira. `{X,0,10,1}`.
- Ohiko ariketa matematikoak egiten ditu ohiko ikurrekin: `+`, `-`, `/`, `^`, `Sqrt` ...

Mathematica-n maiuskula eta minuskulak bereizten dira, eta parentesi mota desberdinek esanahi desberdina dute:

- `[]` funtzioen aldagaiak adirezteko erabiltzen dira. `Sin[x]`.
- `()` Eragiketak taldekatzeko erabiltzen da. `(6+4)/2`.
- `{}` zerrendak edo segidak definitzeko erabiltzen dira. `{X,0,10,1}`.
- Ohiko ariketa matematikoak egiten ditu ohiko ikurrekin: `+`, `-`, `/`, `^`, `Sqrt` ...
- Hainbat funtzio ere baditu definituta: `Sin`, `Cos`, `Log` ... guztiak hizki maiuskula batekin hasiko direlarik.

Mathematica-n maiuskula eta minuskulak bereizten dira, eta parentesi mota desberdinek esanahi desberdina dute:

- `[]` funtzioen aldagaiak adirezteko erabiltzen dira. `Sin[x]`.
- `()` Eragiketak taldekatzeko erabiltzen da. `(6+4)/2`.
- `{}` zerrendak edo segidak definitzeko erabiltzen dira. `{X,0,10,1}`.
- Ohiko ariketa matematikoak egiten ditu ohiko ikurrekin: `+`, `-`, `/`, `^`, `Sqrt` ...
- Hainbat funtzio ere baditu definituta: `Sin`, `Cos`, `Log` ... guztiak hizki maiuskula batekin hasiko direlarik.
- Definitutako aldagaika ere inprima daitazke `Print` aginduarekin.

Mathematica

Mathematica-n maiuskula eta minuskulak bereizten dira, eta parentesi mota desberdinek esanahi desberdina dute:

- `[]` funtzioen aldagaiak adirezteko erabiltzen dira. `Sin[x]`.
- `()` Eragiketak taldekatzeko erabiltzen da. `(6+4)/2`.
- `{}` zerrendak edo segidak definitzeko erabiltzen dira. `{X,0,10,1}`.
- Ohiko ariketa matematikoak egiten ditu ohiko ikurrekin: `+`, `-`, `/`, `^`, `Sqrt` ...
- Hainbat funtzio ere baditu definituta: `Sin`, `Cos`, `Log` ... guztiak hizki maiuskula batekin hasiko direlarik.
- Definitutako aldagaika ere inprima daitazke `Print` aginduarekin.

Definizio, edo eragiketa baten emaitza ikusteko, `SHIFT+ENTER` sakatu behar da. Bestalde, definizio baten atzekaldean ; adierazten bada, definizio horren emaitza ez da erakutsiko. Ez bada jartzen ordea, definizioaren emaitza idatziko du Mathematica-k.

- $f=2(* f-k \text{ bi balio du } *)$

- $f=2(* f-k \text{ bi balio du } *)$
- 2

- $f=2(* f-k \text{ bi balio du } *)$
- 2
- $j=5;$
- $h=f*j$

- $f=2(* f-k \text{ bi balio du } *)$
- 2
- $j=5;$
- $h=f*j$
- 10

- $f=2(* f-k \text{ bi balio du } *)$
- 2
- $j=5;$
- $h=f*j$
- 10
- 5^3

- $f=2(* f-k \text{ bi balio du } *)$
- 2
- $j=5;$
- $h=f*j$
- 10
- 5^3
- 125

- $f=2(* f-k \text{ bi balio du } *)$
- 2
- $j=5;$
- $h=f*j$
- 10
- 5^3
- 125
- `Print[f]`

- $f=2(* f-k \text{ bi balio du } *)$
- 2
- $j=5;$
- $h=f*j$
- 10
- 5^3
- 125
- `Print[f]`
- 2

- $f=2(* f-k \text{ bi balio du } *)$
- 2
- $j=5;$
- $h=f*j$
- 10
- 5^3
- 125
- `Print[f]`
- 2
- $har=627.5;(* \text{ hartree bat } 627.5 \text{ kcal/mol } *)$
- $En=0.023;$
- *`Print[En, "hartree", En * har, "kcal/mol dira"]`*

- $f=2(* f-k \text{ bi balio du } *)$
- 2
- $j=5;$
- $h=f*j$
- 10
- 5^3
- 125
- `Print[f]`
- 2
- $har=627.5;(* \text{ hartree bat } 627.5 \text{ kcal/mol } *)$
- $En=0.023;$
- `Print[En, "hartree", En * har, "kcal/mol dira"]`
- 0.023 hartree 14.4325 kcal/mol dira

Funtzioak definitzen

- `x=2;`
- `fa=4+x;`
- `fb:=4+x;`
- `Print[fa]`

Funtzioak definitzen

- `x=2;`
- `fa=4+x;`
- `fb:=4+x;`
- `Print[fa]`
- 6

Funtzioak definitzen

- `x=2;`
- `fa=4+x;`
- `fb:=4+x;`
- `Print[fa]`
- `6`
- `Print[fb]`

Funtzioak definitzen

- `x=2;`
- `fa=4+x;`
- `fb:=4+x;`
- `Print[fa]`
- 6
- `Print[fb]`
- 6

Funtzioak definitzen

- `x=2;`
- `fa=4+x;`
- `fb:=4+x;`
- `Print[fa]`
- `6`
- `Print[fb]`
- `6`
- `Tx=4;`
- `Print[fa]`

Funtzioak definitzen

- `x=2;`
- `fa=4+x;`
- `fb:=4+x;`
- `Print[fa]`
- 6
- `Print[fb]`
- 6
- `Tx=4;`
- `Print[fa]`
- 6

Funtzioak definitzen

- `x=2;`
- `fa=4+x;`
- `fb:=4+x;`
- `Print[fa]`
- `6`
- `Print[fb]`
- `6`
- `Tx=4;`
- `Print[fa]`
- `6`
- `Print[fb]`

- $x=2$;
- $fa=4+x$;
- $fb:=4+x$;
- $\text{Print}[fa]$
- 6
- $\text{Print}[fb]$
- 6
- $T_x=4$;
- $\text{Print}[fa]$
- 6
- $\text{Print}[fb]$
- 8

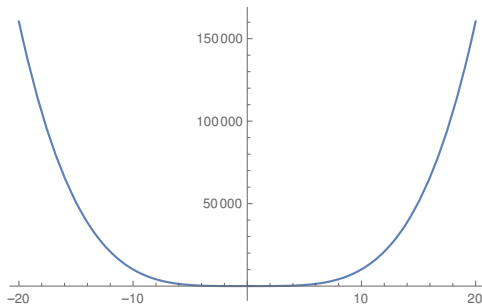
- $\text{Plot}[a*x^4+b*x^2+c*x+2,\{x,-20,20\}]$

Funtzioak irudikatzen

- $a=1; b=1; c=1$;
- $\text{Plot}[a*x^4+b*x^2+c*x+2,\{x,-20,20\}]$

Funtzioak irudikatzen

- $a=1; b=1; c=1$;
- $\text{Plot}[a*x^4+b*x^2+c*x+2,\{x,-20,20\}]$

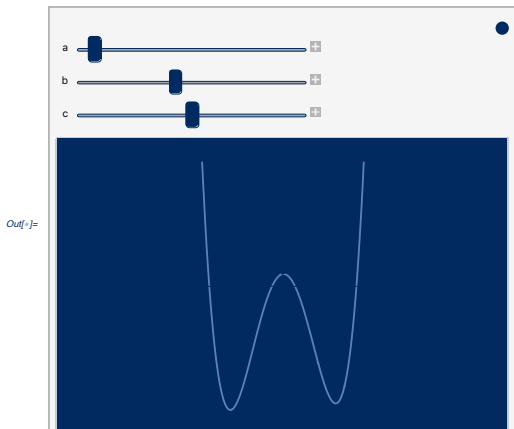


Funtzioak irudikatzen

- `Manipulate[Plot [a*x^4+b*x^2+c*x+2,{x,-20,20},
PlotRange -> {{-20, 20}, {-20, 20}}],
{a, -1, 1}, {b, -10, 10}, {c, -10, 10}]`

Funtzioak irudikatzen

- `Manipulate[Plot [a*x^4+b*x^2+c*x+2,{x,-20,20},
PlotRange -> {{-20, 20}, {-20, 20}},
{a, -1, 1}, {b, -10, 10}, {c, -10, 10}]`

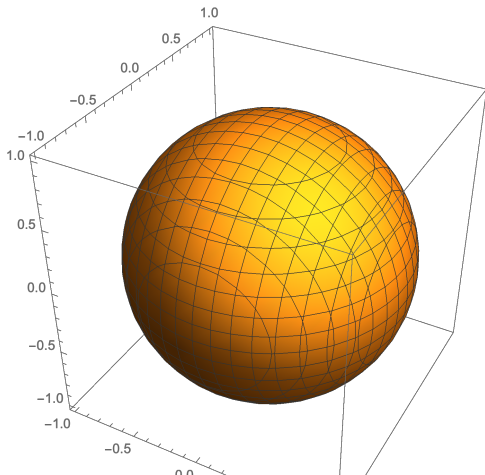


Funtzioak irudikatzen

- $\text{sph}[x_ , y_ , z_] := x^2 + y^2 + z^2;$
 $\text{ContourPlot3D}[\text{sph}[x, y, z] == 1, \{x, -1, 1\}, \{y, -1, 1\}, \{z, -1, 1\}]$

Funtzioak irudikatzen

- $\text{sph}[x_ , y_ , z_] := x^2 + y^2 + z^2;$
`ContourPlot3D[sph[x, y, z] == 1, {x, -1, 1}, {y, -1, 1}, {z, -1, 1}]`



Deribatuak

- $f[x_] := 3^2 + 7;$
- $f'[x]$

Deribatuak

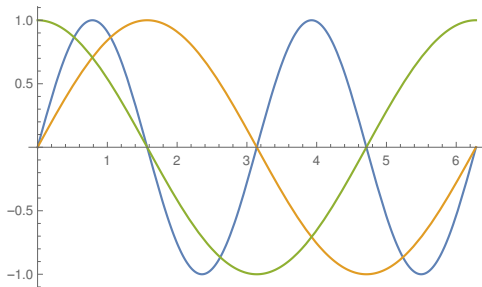
- $f[x_] := 3^2 + 7;$
- $f'[x]$
- $6x$

Deribatuak

- $f[x_] := 3^2 + 7;$
- $f'[x]$
- $6x$
- $f[x_] := (\text{Sin}[x])^2;$
- $\text{Plot}[\{f'[x], \text{Sin}[x], \text{Cos}[x]\}, \{x, 0, 2 \text{ Pi}\}]$

Deribatuak

- $f[x_] := 3^2 + 7;$
- $f'[x]$
- $6x$
- $f[x_] := (\sin[x])^2;$
- $\text{Plot}\{f'[x], \sin[x], \cos[x]\}, \{x, 0, 2\pi\}$



van de Walls-en ekuazia (Gas Errealak)

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$$

$$a = 7.857 \frac{L^2 bar}{mol^2}$$

$$b = 0.087 \frac{L}{mol}$$

$$R = 0.0831 \frac{L bar}{K mol}$$

van de Walls-en ekuazia (Gas Errealak)

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$$

$$a = 7.857 \frac{\text{L}^2 \text{bar}}{\text{mol}^2}$$

$$b = 0.087 \frac{\text{L}}{\text{mol}}$$

$$R = 0.0831 \frac{\text{Lbar}}{\text{Kmol}}$$

$$P = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m^2}$$

van de Walls-en ekuazia (Gas Errealak)

$$P[Bm_ , T_] := R T / (Bm - b) - a/Bm^2$$

van de Walls-en ekuazia (Gas Errealak)

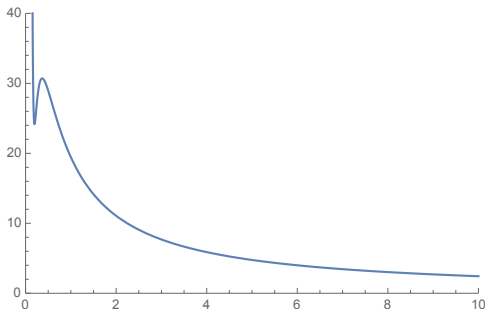
$P[Bm_ , T_] := R T / (Bm - b) - a / Bm^2$

$\text{Plot}[P[Bm, 300], \{Bm, 0, 10\}, \text{PlotRange} \rightarrow \{\{0, 10\}, \{0, 40\}\}]$

van de Walls-en ekuazia (Gas Errealak)

$P[Bm_ , T_] := R T / (Bm - b) - a/Bm^2$

$\text{Plot}[P[Bm, 300], \{Bm, 0, 10\}, \text{PlotRange} \rightarrow \{\{0, 10\}, \{0, 40\}\}]$



van de Walls-en ekuazia (Gas Errealak)

```
t300 = Plot[P[Bm, 300], { Bm, 0, 1},  
PlotRange -> {{0, 1}, {20, 70}}, Frame -> True, FrameLabel ->  
{Style[Row[{"Bolumen Murriztua ", Bm}], 14],  
Style[Row[{"Presioa ", P}], 14]}, PlotLegends -> {"300"}];
```

```
t310 = Plot[P[Bm, 310], {Bm, 0, 1}, PlotStyle -> {{Thick,  
Green}}, PlotRange -> {{0, 1}, {20, 70}}, PlotLegends ->  
{"310"}];
```

```
Show[t300, t310]
```

van de Walls-en ekuazia (Gas Errealak)

```
Manipulate[ Plot[P[Bm, T], { Bm, 0, 1}, PlotRange -> {{0, 1},  
{20, 70}}, PlotLegends -> {T }], {T, 300, 380, 5}]
```

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{baldin eta } x < 0 & \text{(I)} \\ 0 & \text{baldin eta } 0 \leq x \leq L & \text{(II)} \\ \infty & \text{baldin eta } x > L & \text{(III)} \end{cases}$$

$$\hat{H}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) + V(x)$$

Partikula bat Kaxa batean

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{baldin eta } x < 0 & \text{(I)} \\ 0 & \text{baldin eta } 0 \leq x \leq L & \text{(II)} \\ \infty & \text{baldin eta } x > L & \text{(III)} \end{cases}$$

$$\hat{H}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) + V(x)$$

I eta III Zonak $V \rightarrow \infty \Rightarrow \psi_I(x) = \psi_{III}(x) = 0$

- II Zona
 - Jarraia, deribatu jarraia, integragarria ...
 - Unibokoa $\rightarrow \psi(x=0)$ eta $\psi(x=L)$ 0 izan beharko da.

- II Zona
 - Jarraia, deribatu jarraia, integragarria ...
 - Unibokoa $\rightarrow \psi(x=0)$ eta $\psi(x=L)$ 0 izan beharko da.

$$\psi'' = -\frac{2m(E - V)}{\hbar^2}\psi$$

non $V=0$.

- II Zona
 - Jarraia, deribatu jarraia, integragarria ...
 - Unibokoa $\rightarrow \psi(x=0)$ eta $\psi(x=L)$ 0 izan beharko da.

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$$

- II Zona
 - Jarraia, deribatu jarraia, integragarria ...
 - Unibokoa $\rightarrow \psi(x=0)$ eta $\psi(x=L)$ 0 izan beharko da.

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$$

$$\psi_{II}(x) = A\sin kx + B\cos kx$$

Uhin-funtzioa jarraia izan dadin :

- $\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0) = 0 \quad \Rightarrow \quad B = 0$

$$\psi_{II}(x) = A \sin kx$$

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi$$

MATH. Zein da Energiaren expresioa?

Uhin-funtzioa jarraia izan dadin :

- $\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0) = 0 \Rightarrow B = 0$

$$\psi_{II}(x) = A \sin kx$$

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi$$

MATH. Zein da Energiaren expresioa?

- $\psi_{II}(x=L) = \psi_{II}(x=L) = 0$

MATH. Zein da k-ren balioa?

- $\int_0^L \psi(x) * \psi(x) dx = 1$

MATH.

Partikula bat Kaxa batean. Energia.

Partikula bat Kaxa batean. Energia.

$$E = \frac{h^2}{8m} \frac{n^2}{L^2}$$

Partikula bat Kaxa batean. Energia.

$$E = \frac{h^2}{8m} \frac{n^2}{L^2}$$

$$E = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{nx^2}{L_x^2} + \frac{ny^2}{L_y^2} + \frac{nz^2}{L_z^2} \right)$$

Partikula bat Kaxa batean. Grafikak.

$$\hat{H} = \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = \hat{h}_x + \hat{h}_y + \hat{h}_z.$$

$$\hat{H} = \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = \hat{h}_x + \hat{h}_y + \hat{h}_z.$$

$$\psi(x, y, z) = \psi(x)\psi(y)\psi(z)$$

$$\hat{H} = \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = \hat{h}_x + \hat{h}_y + \hat{h}_z.$$

$$\psi(x, y, z) = \psi(x)\psi(y)\psi(z)$$

$$E_{Totala} = E(x) + E(y) + E(z)$$