



ZTF-FCT

Zientzia eta Teknologia Fakultatea
Facultad de Ciencia y Tecnología



Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea

FISIKA KUANTIKA

2 Gaia

Behagarrien adierazpen matriziala

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

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

- Funtzioen biderkaketa eskalarraren propietateak erabiliz, frogatu ezazu denboraren menpekotasuna den Schrödinger-en ekuazioa ondorengo eramatrizialean adieraz daitekeela:

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

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

- Azal ezazu zergatik betetzen den ondorengo erlazioa: $H_{12} = H_{21}^*$.
- Hemen aurrera suposa dezagun H_{12} erreal 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.
- Hasieran 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 erlazioa dezakegu H_{12} balioa ψ_1 eta ψ_2 egoeren arteko transizioaren probabilitatearekin?

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

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:

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

Izan al 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?

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:

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

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

5. Bedinak diren hiru atomoz (A, B, C) osoturiko molekula lineal batean elektroik bakar bat dugu, eta ϕ_A , ϕ_B eta ϕ_C dira elektroik honen 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 desagertu ezkerro (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 liratekeen, hiru egoera hauen energia berdina izanik: E_0 . Baina ϕ_A , ϕ_B eta ϕ_C egoera hauen arteko akoplamendua Hamiltondarrean dugun beste ekarpen baten bidez ($\hat{H}_{\text{int}}$) deskribatuko dugu, non $\hat{H}_{\text{int}}$ -k betetzen dituen erlazioak ondorengoak diren:

$$\hat{H}_{\text{int}}\phi_A = -a\phi_B$$

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

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

eta a konstante positiboa den.

- Lor itzazu $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}$ Hamiltondarraren egoera geldikorak eta hauen energiak.
- $t = 0$ aldiunean elektroia ϕ_A egoeran dago (beraz, A atomoaren inguruan dago lokalizaturik). Azter ezazu elektroia gutxigorabeherako 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 eta ϕ_C dira, hauen autobalioak $-d$, 0 eta d diren, hurrenez hurren. t aldiunean $\hat{D}$ neurtzerakoan, zeinuk dira neurtu ditzakegun balioak eta zein probabilitaterekin?
- Elektroia hasierako egoera edozein bat denean, zeintzuk dira $\langle \hat{D} \rangle$ -n ager daitezkeen maiztasunak? Zein izan daiteke $\hat{D}$ behagarriaren interpretazio fisikoren bat?

6. Sistema baten egoera kuantikoek ortonormala den ondorengo oinarria dute: $\{u_1, u_2, u_3\}$. 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 ondorengo izanik:

$$\psi(t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}}u_1 + \frac{1}{2}u_2 + \frac{1}{2}u_3,$$

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?
- Aurkitu al dezakegu $\hat{H}$ eta $\hat{A}$ -ren aldibereko autofuntzio-oinarririk? Zen 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 $\langle \hat{A} \rangle (t)$ eta $\Delta A(t)$.
- Gauza bera baina $\hat{B}$ eragilearekin.