HT 2 Mecánica Cuántica

Diego Sarceño, 201900109

Problema 1:

a) Que la densidad de probabilidad no cambia en el tiempo.

b) Para escribir $\Psi(x, 0)$ en términos de las funciones propias, utilizamos los valores de probabilidad de cada una de las energías

$$\left|\Psi(x, 0)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left|\psi 1\right\rangle + \sqrt{\frac{3}{8}} \left|\psi 2\right\rangle + \sqrt{\frac{1}{8}} \left|\psi 3\right\rangle$$

c) Para la función de onda del sistema en cualquier tiemo $t > 0$ se tiene

$$\left|\Psi(x, t)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{t}{\hbar} E1*t} \left|\psi 1\right\rangle + \sqrt{\frac{3}{8}} e^{-\frac{i}{\hbar} E2*t} \left|\psi 2\right\rangle + \sqrt{\frac{1}{8}} e^{-\frac{i}{\hbar} E3*t} \left|\psi 3\right\rangle$$

Para calcular la densidad de probabilidad, es necesario calcular el "bra" del "ket" propuesto, con esto, calculamos el "braket" siguiente: $\left|\left\langle\Psi\middle|\Psi\right\rangle\right|^2$, dado que el conjugado de las exponenciales complejas, solo cambia el signo del complejo del exponente, y el producto de exponenciales es la suma de los exponentes, se hacen 1 todos los términos que tengan al tiempo, entonces si es un estado estacionario.

d) Primero aplicamos el hamiltoniano al estado dado

$$H \left|\Psi(x, t)\right\rangle = \frac{E1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{t}{\hbar} E1*t} \left|\psi 1\right\rangle + \sqrt{\frac{3}{8}} E2e^{-\frac{i}{\hbar} E2*t} \left|\psi 2\right\rangle + \sqrt{\frac{1}{8}} E3e^{-\frac{i}{\hbar} E3*t} \left|\psi 3\right\rangle$$

ahora, aplicamos el "bra" a esto, suponemos que los vectores propios son ortonormales

$$\left\langle\Psi(x, t)\right| H \left|\Psi(x, t)\right\rangle = \frac{E1}{2} + \frac{3}{8} E2 + \frac{1}{8} E3$$

con esto, tenemos que $\partial / \partial t \left\langle\Psi(x, t)\right| H \left|\Psi(x, t)\right\rangle = 0$.

Problema 2:

$$\left|\psi(0)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left|\phi 1\right\rangle + \frac{1}{2} \left|\phi 2\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} \left|\phi 3\right\rangle + \frac{1}{2} \left|\phi 4\right\rangle$$

a) Con esto y sabiendo el valor de cada una de las energías, encontramos la función para cualquier tiempo mayor a cero

$$\left|\psi(t)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} e^{\frac{-i}{\hbar} E1*t} \left|\phi 1\right\rangle + \frac{1}{2} e^{\frac{-i}{\hbar} E2*t} \left|\phi 2\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} e^{\frac{-i}{\hbar} E3*t} \left|\phi 3\right\rangle + \frac{1}{2} e^{\frac{-i}{\hbar} E4*t} \left|\phi 4\right\rangle$$

b) Por construcción la probabilidad de tener cada una de las energías, es el cuadrado de cada uno de los coeficientes que acompañan a cada uno de los estados propios. Entonces

$P(\text{E1}) = \frac{1}{3}$, $P(\text{E2}) = \frac{1}{4}$, $P(\text{E3}) = \frac{1}{6}$, $P(\text{E4}) = \frac{1}{4}$, cuya suma da 1.

c) Para encontrar el promedio en un número muy grande de “iteraciones”, se calcula el valor esperado del hamiltoniano en el estado deseado, en este caso $\left|\psi(0)\right\rangle$. Calculamos el valor esperado, aplicando el Hamiltoniano y luego el “bra”:

$$\left\langle\psi(0)\right| \text{H} \left|\psi(0)\right\rangle = \frac{1}{3}\,\text{E1} + \frac{1}{4}\,\text{E2} + \frac{1}{6}\,\text{E3} + \frac{1}{4}\,\text{E4}$$

d) Al calcular el estado en ambos tiempos, $t = 0$ y $t = 10$, tenemos valores distintos en la exponencial; sin embargo, al momento de aplicar el hamiltoniano y el bra del estado, dichas exponenciales de vuelven 1 y terminamos con el mismo valor esperado. Con esto ya sabemos que el valor esperado del hamiltoniano es constante en el tiempo.

Problema 3:

a) Dado que estamos en un espacio Hilbert de 3 dimensiones.

b) Comprobando si los operadores conmutan. Creamos una rutina para facilitar esto en el resto de la hoja.

In[1]:=
```
Conmutador[A_, B_] := A.B - B.A
```

In[2]:=
```
(* Vemos si definimos las matrices y vemos si conmutan *)
MatrixForm[H = ϵ0 * {{-2, 0, 0}, {0, 1, 0}, {0, 0, 1}}]
```

Out[2]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} -2\,\epsilon0 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon0 \end{pmatrix}$$

In[3]:=
```
MatrixForm[A = a0 * {{5, 0, 0}, {0, 0, 2}, {0, 2, 0}}]
```

Out[3]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} 5\,\text{a0} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\,\text{a0} \\ 0 & 2\,\text{a0} & 0 \end{pmatrix}$$

In[4]:=
```
MatrixForm[Conmutador[H, A]]
```

Out[4]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Lo que implica que conmutan. Ahora, encontramos los vectores propios

In[5]:=
```
Eigensystem[H]
```

Out[5]= {{-2 ϵ0, ϵ0, ϵ0}, {{1, 0, 0}, {0, 0, 1}, {0, 1, 0}}}

In[6]:=
```
Eigensystem[A]
```

Out[6]= {{5 a0, -2 a0, 2 a0}, {{1, 0, 0}, {0, -1, 1}, {0, 1, 1}}}

```
(* Aplicaremos la matriz H a cada uno de los vectores propios de A *)
```

In[7]:=
```
H.# & /@ Eigenvectors[A]
```
Out[7]=
```
{{-2 ϵ0, 0, 0}, {0, -ϵ0, ϵ0}, {0, ϵ0, ϵ0}}
```

Con esto queda claro, al aplicar los H a los vectores propios de A, vemos que cada uno de los vectores resultantes es un vector propio de A multiplicado por un valor propio de H. Con esto encontramos la base de vectores propios en común.

c) No importa el orden, puesto que los operadores conmutan.

d) Para formar un CSCO es necesario que los operadores que lo forman, conmuten y el conjunto de estados propios sea no degenerado. Con esto en mente, es claro que $\{H\}$ no es un CSCO, en cambio $\{A\}$ y $\{H,\ A\}$ si forman un CSCO, como se puede ver en donde se calcularon los valores propios respectivos. Para $\{H^2, A\}$ se tiene

In[8]:=
```
MatrixForm[Conmutador[H.H, A]]
```
Out[8]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Con esto, queda claro que $\{H^2, A\}$ es un CSCO.

e) El sistema se puede describir utilizando 1 o 2 números cuánticos.

Problema 4:

a) Primer encontramos los valores propios y vectores propios del hamiltoniano dado, esto nos dará la información de la energía y con ello calcularemos las probabilidades de cada una de esas energías.

In[9]:=
```
(* Hamiltoniano *)
MatrixForm[H = ϵ0 * {{1, -1, 0}, {-1, 1, 0}, {0, 0, -1}}]
```
Out[9]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} \epsilon 0 & -\epsilon 0 & 0 \\ -\epsilon 0 & \epsilon 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\epsilon 0 \end{pmatrix}$$

In[10]:=
```
(* Enccontrando los vectores y valores propios *)
eigH = Eigensystem[H]
(* Normalizamos los vectores propios *)
eigHn = Normalize[#] & /@ eigH[[2]]
```
Out[10]=
```
{{2 ϵ0, -ϵ0, 0}, {{-1, 1, 0}, {0, 0, 1}, {1, 1, 0}}}
```
Out[11]=

$$\left\{\left\{-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right\}, \{0, 0, 1\}, \left\{\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right\}\right\}$$

Vemos que H es no tiene valores propios repetidos (es no degenerado), entonces podemos calcular las probabilidades de la forma simple. Los valores de energía son: $E1 = 2\,\epsilon 0$, $E2 = -\epsilon 0$, $E3 = 0$, entonces, dado el eigen estado $|\psi(0)\rangle$:

In[12]:=
```
MatrixForm[ψ0 = Normalize[1/√6 {1, 1, 2}]]
```

Out[12]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \end{pmatrix}$$

In[13]:=
```
(* Cálculo de las probabilidades *)
(#.ψ0)^2 & /@ eigHn
```

Out[13]= $\left\{0, \frac{2}{3}, \frac{1}{3}\right\}$

Con esto es claro que las probabilidades son: $P(\text{E1}) = 0$, $P(\text{E2}) = \frac{2}{3}$, $P(\text{E3}) = \frac{1}{3}$.

b) Ahora calculamos el valor esperado de H en el estado $\left|\psi(0)\right\rangle$:

In[14]:=
```
expValueH = ψ0.(H.ψ0)
```

Out[14]= $-\frac{2\,\epsilon0}{3}$

El valor esperado del hamiltoniano es $-\frac{2\,\epsilon0}{3}$.

Problema 5:

In[15]:=
```
(* Estado *)
MatrixForm[ψ = 1/3 {-I, 2, 0}]
(* Operador A *)
MatrixForm[A5 = 1/Sqrt[2] {{1, I, 1}, {-I, 0, 0}, {1, 0, 0}}]
(* Operador B *)
MatrixForm[B5 = {{3, 0, 0}, {0, 1, I}, {0, -I, 1}}]
```

Out[15]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} -\frac{i}{3} \\ \frac{2}{3} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Out[16]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Out[17]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & i \\ 0 & -i & 1 \end{pmatrix}$$

a) Para demostrar la compatibilidad es necesario ver si los operadores conmutan.

In[18]:=
```
MatrixForm[Conmutador[A5, B5]]
```

Out[18]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} 0 & -\frac{3i}{\sqrt{2}} & -\frac{3}{\sqrt{2}} \\ -\frac{3i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ \frac{3}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

vemos que los operadores no son compatibles.

b) Para encontrar los CSCO, encontramos los valores propios de los operadores

In[19]:=
```
Eigensystem[A5]
```

Out[19]= $\left\{\left\{\sqrt{2}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right\}, \{\{2, -i, 1\}, \{-1, -i, 1\}, \{0, i, 1\}\}\right\}$

In[20]:=
```
Eigensystem[B5]
```

Out[20]= $\{\{3, 2, 0\}, \{\{1, 0, 0\}, \{0, i, 1\}, \{0, -i, 1\}\}\}$

Con esto podemos ver que los CSCO son: $\{A\}$, $\{B\}$.

b) Se necesita 1 solo número cuántico.

c) Primero, sabiendo que la probabilidad de obtener el valor -1 para A es cero, puesto que -1 no es un valor propio de A. Entonces el resultado, sin importar la probabilidad de B es cero.

d) Para este inciso ocurre lo mismo la probabilidad total, $P(3, 1) = P(3)\,P(1) = 0$, puesto que $P(1) = 0$.

e) A pesar de ser resultados iguales, no tienen nada que ver con el hecho de que los operadores conmuten o no, simplemente esque se solicitaba una probabilidad en un valor inaxecible para el observable.

Problema 6:

In[21]:=
```
(* Estado *)
MatrixForm[ψ6 = {5, 1, 3}]
(* Operador A *)
MatrixForm[A6 = 1/√2 {{2, 0, 0}, {0, 1, 1}, {0, 1, 1}}]
(* Operador B *)
MatrixForm[B6 = {{1, 0, 0}, {0, 0, 1}, {0, 1, 0}}]
```

Out[21]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} 5 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Out[22]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Out[23]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

a) Demostramos la compatibilidad entre A y B.

In[24]:=
```
MatrixForm[Conmutador[A6, B6]]
```

Out[24]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Los operadores son compatibles.

b) Encontramos los valores propios de los operadores.

In[25]:=
```
(* Para A *)
eigA = Eigensystem[A6]
(* Para B *)
eigB = Eigensystem[B6]
```

Out[25]= $\left\{\left\{\sqrt{2}, \sqrt{2}, 0\right\}, \{\{0, 1, 1\}, \{1, 0, 0\}, \{0, -1, 1\}\}\right\}$

Out[26]= $\{\{-1, 1, 1\}, \{\{0, -1, 1\}, \{0, 1, 1\}, \{1, 0, 0\}\}\}$

Dado que ambos operadores poseen valores propios degenerados, solo el conjunto $\{A, B\}$ forma un CSCO.

c) Dado lo anterior, se requieren dos números cuánticos para caracterizar el fotón.

d) Normalizamos el vector de estado y los vectores propios de cada operador y encontramos la probabil idad del valor $\sqrt{2}$

In[27]:=
```
(* Normalizamos ψ6 *)
nψ6 = Normalize[ψ6]
(* Normalizamos los vectores de A *)
eigAn = Normalize[#] & /@ {{0, 1, 1}, {1, 0, 0}}
(* Normalizamos los vectores de B *)
eigBn = Normalize[{0, -1, 1}]
```

Out[27]= $\left\{\sqrt{\frac{5}{7}}, \frac{1}{\sqrt{35}}, \frac{3}{\sqrt{35}}\right\}$

Out[28]= $\left\{\left\{0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right\}, \{1, 0, 0\}\right\}$

Out[29]= $\left\{0, -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right\}$

In[30]:=
```
(* Encontramos la probabilidad del valor √2 *)
Abs[#.nψ6]^2 & /@ eigAn
```

Out[30]= $\left\{\frac{8}{35}, \frac{5}{7}\right\}$

In[31]:=
```
(* Sumamos ambas probabilidades *)
```
$\frac{8}{35} + \frac{5}{7}$

Out[31]= $\frac{33}{35}$

Ahora toca aplicar B, para ello tenemos que calcular el nuevo estado, que surge de medir el estado original por medio de A.

In[32]:=
```
(* Encontramos el nuevo estado,
utilizamos la función 'Outer' con la operación 'Times' *)
MatrixForm[ζ = Normalize[
   Outer[Times, eigAn[[1]], eigAn[[1]]].nψ6 + Outer[Times, eigAn[[2]], eigAn[[2]]].nψ6]]
```

Out[32]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} \frac{5}{\sqrt{33}} \\ \frac{2}{\sqrt{33}} \\ \frac{2}{\sqrt{33}} \end{pmatrix}$$

Con esto podemos encontrar la probabilidad del valor -1 para B

In[33]:=
```
(eigBn.ζ)^2
```

Out[33]= 0

La probabilidad resultante de medir $\sqrt{2}$ para A y -1 para B es el producto de las probabilidades, por ende es 0.

e) Mismo resultado que el inciso anterior.

f) El resultado del inciso d) y e) es el mismo puesto que los operadores son compatibles, entonces no importa el orden de medición.

Problema 7:

In[34]:=
```
(* A7 *)
MatrixForm[A7 = {{1, 0, 0}, {0, 0, 1}, {0, 1, 0}}]
(* B7 *)
MatrixForm[B7 = {{0, 0, -1}, {0, 0, I}, {-1, -I, 4}}]
(* C7 *)
MatrixForm[C7 = {{2, 0, 0}, {0, 1, 3}, {0, 3, 1}}]
```

Out[34]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Out[35]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & i \\ -1 & -i & 4 \end{pmatrix}$$

Out[36]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 3 & 1 \end{pmatrix}$$

a) Encontramos los valores propios de cada uno de los observables anteriores

In[37]:=
```
eigA7 = Eigensystem[A7];
eigA7[[1]]
```
Out[38]= {-1, 1, 1}

In[39]:=
```
eigB7 = Eigensystem[B7];
eigB7[[1]]
```
Out[40]= $\left\{2+\sqrt{6},\ 2-\sqrt{6},\ 0\right\}$

In[41]:=
```
eigC7 = Eigensystem[C7];
eigC7[[1]]
```
Out[42]= {4, -2, 2}

b) Realizamos todos los conmutadores necesarios (3, ([*A*, *B*], [*B*, *C*], [*A*, *C*]))

In[43]:=
```
(* [A,B] *)
MatrixForm[Conmutador[A7, B7]]
(* [B,C] *)
MatrixForm[Conmutador[B7, C7]]
(* [A,C] *)
MatrixForm[Conmutador[A7, C7]]
```
Out[43]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ -1 & -2i & 4 \\ 1 & -4 & 2i \end{pmatrix}$$

Out[44]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} 0 & -3 & 1 \\ 3 & 6i & -12 \\ -1 & 12 & -6i \end{pmatrix}$$

Out[45]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

para {A,C}, buscamos la base de vectores propios en común.

In[46]:=
```
(* Vectores propios de A *)
eigA7[[2]]
(* Vectores propios de b *)
A7.# & /@ eigC7[[2]]
```
Out[46]= {{0, -1, 1}, {0, 1, 1}, {1, 0, 0}}

Out[47]= {{0, 1, 1}, {0, 1, -1}, {1, 0, 0}}

se tienen la misma base de vectores propios.

c) Para los CSCO se tienen: {*B*}, {*C*},}, {*A*, *C*}.