HT 3 Mecánica Cuántica

Diego Sarceño, 201900109

Función Extra: Puede ser útil en el futuro.

In[1]:=
```
(* Muestra los vectores propios asociados a un valor propio *)
ObservableEV[SqMatrix_, EigValue_] :=
 Eigenvectors[SqMatrix][[Flatten[Position[Eigenvalues[SqMatrix], EigValue]]]]
```

Problema 1:

Probabilidad de un *valor propio* de un *observable no degenerado* de un sistema en cierto estado.

La lógica de la rutina es la siguiente:

Input: Matriz Cuadrada, Vector de Estado del Sistema y Valor Propio.
Output: Probabilidad de que el sistema esté en el valor propio dado.
Requirements: Encontrar el vector propio asociado al valor propio dado. Esto se puede hacer en mathematica ya que el orden mostrado de los valores propios es el orden correspondiente en el que aparecen los vectores propios.

In[2]:=
```
NonDegenerateProbability[SqMatrix_, State_, Eigenvalue_] := (Abs[#.State]^2) / (Norm[#]^2 * Norm[State]^2) & /@
  Eigensystem[SqMatrix][[2, Position[Eigensystem[SqMatrix][[1]], Eigenvalue][[1]]]]
```

PRUEBAS:

In[3]:=
```
(* Matriz de Prueba (Tomada de la Ht2) *)
MatrixForm[T = {{1, -1, 0}, {-1, 1, 0}, {0, 0, -1}}]
(* Estado de prueba (Tomado del mismo problema que la matriz, Ht2) *)
MatrixForm[ψ0 = 1/Sqrt[6] {1, 1, 2}]
```

Out[3]//MatrixForm=

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

Out[4]//MatrixForm=

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

In[5]:=
```
(* Probando la función dada *)
NonDegenerateProbability[T, ψ0, -1]
```

Out[5]= $\left\{\frac{2}{3}\right\}$

Problema 2:

Probabilidad de un *valor propio* de un *observable degenerado* de un sistema en cierto estado.

La lógica de la rutina es:

Input: Matriz Cuadrada, Vector de Estado del Sistema y Valor Propio.
Output: Probabilidad de que el sistema esté en el valor propio dado.
Requirements: Se utiliza la misma idea del ejercicio pasado, con la salvedad de que necesitamos encontrar todos los vectores propios asociados al valor dado. Para esto se utiliza la función definida al inicio del documento.

In[6]:=
```
DegenerateProbability[SqMatrix_, State_, Eigenvalue_] :=
  Total[Abs[#.State]^2 / (Norm[#]^2 * Norm[State]^2) & /@ ObservableEV[SqMatrix, Eigenvalue]]
```

PRUEBAS:

In[7]:=
```
(* Matriz de Prueba (Tomada de la Ht2) *)
MatrixForm[T2 = 1/Sqrt[2] {{2, 0, 0}, {0, 1, 1}, {0, 1, 1}}]
(* Estado de prueba (Tomado del mismo problema que la matriz, Ht2) *)
MatrixForm[ψ2 = {5, 1, 3}]
```

Out[7]//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[8]//MatrixForm=

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

In[9]:=
```
DegenerateProbability[T2, ψ2, Sqrt[2]]
```

Out[9]= $\frac{33}{35}$

Problema 3:

Proyector

In[10]:=
```
Proyector[Vector_] := Outer[Times, Vector, Conjugate[Vector]]
```

Problema 4:

Valor de espectación de un observable dado un estado $|\psi\rangle$

Lógica de la rutina:

Input: Observable (Matriz cuadrada) y vector de estado.
Output: Valor de espectación.

In[11]:=
```
ExpectationValue[SqMatrix_, State_] := Conjugate[State].(SqMatrix.State)
```

Problema 5:

Conmutador

Lógica de la rutina:

Input: Dos observables *A* y *B*.

Output: Matriz cuadrada (si la matriz resultante es cero las matrices conmutan).

In[12]:=
```
Conmutator[SqMatrix1_, SqMatrix2_] := SqMatrix1.SqMatrix2 - SqMatrix2.SqMatrix1
```

Problema 6:

Tomando los ejercicios de la HT2.

Ejercicio 3:

In[13]:=
```
(* H *)
MatrixForm[H = ϵ0 {{-2, 0, 0}, {0, 1, 0}, {0, 0, 1}}]
(* A *)
MatrixForm[A = a0 {{5, 0, 0}, {0, 0, 2}, {0, 2, 0}}]
```

Out[13]//MatrixForm=

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

Out[14]//MatrixForm=

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

In[16]:=
```
(* Aplicando el conmutador *)
MatrixForm[Conmutator[H, A]]
```

Out[16]//MatrixForm=

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

Ejercicio 4:

In[17]:=
```
(* H *)
MatrixForm[H4 = ϵ0 {{1, -1, 0}, {-1, 1, 0}, {0, 0, -1}}]
(* Estado *)
MatrixForm[ψ4 = 1/Sqrt[6] {1, 1, 2}]
```

Out[17]//MatrixForm=

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

Out[18]//MatrixForm=

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

Primero verificamos si los valores propios del operador son no degenerados o degenerados.

In[19]:=
```
Eigenvalues[H4]
```

Out[19]= $\{2\,\epsilon0, -\epsilon0, 0\}$

Con esto confirmamos que es no degenerado. Aplicamos la función del primer problema.

In[20]:=
```
Flatten[NonDegenerateProbability[H4, ψ4, #] & /@ Eigenvalues[H4]]
```

Out[20]= $\left\{0, \frac{2}{3}, \frac{1}{3}\right\}$

Ejercicio 6:

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

Out[21]//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[22]//MatrixForm=

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

Out[23]//MatrixForm=

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

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

Out[24]//MatrixForm=

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

Los operadores son compatibles.

In[25]:=
```
(* Valores propios de A6 *)
Eigenvalues[A6]
(* Valores propios de B6 *)
Eigenvalues[B6]
```

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

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

In[27]:=
```
(* Probabilidad de √2 *)
DegenerateProbability[A6, ψ6, √2]
(* Probabilidad de -1 *)
NonDegenerateProbability[B6,
 Proyector[Eigenvectors[A6][[1]]].ψ6 + Proyector[Eigenvectors[A6][[2]]].ψ6, -1]
(* Producto de probabilidades *)
DegenerateProbability[A6, ψ6, √2] * NonDegenerateProbability[B6,
  Proyector[Eigenvectors[A6][[1]]].ψ6 + Proyector[Eigenvectors[A6][[2]]].ψ6, -1]
```

Out[27]= $\frac{33}{35}$

Out[28]= {0}

Out[29]= {0}

Problema 7:

In[ ]:=
```
(* H7 *)
MatrixForm[H7 = ϵ0 {{0, -I, 0}, {I, 0, 2 I}, {0, -2 I, 0}}]
(* A7 *)
MatrixForm[A7 = a0 {{0, -I, 0}, {I, 1, 1}, {0, 1, 0}}]
```

Out[ ]//MatrixForm=

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

Out[ ]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} 0 & -i\,a0 & 0 \\ i\,a0 & a0 & a0 \\ 0 & a0 & 0 \end{pmatrix}$$

In[ ]:=
```
(* Eigensystem H7 *)
Eigensystem[H7]
(* Eigensystem A7 *)
Eigensystem[A7]
```

Out[ ]= $\left\{\left\{-\sqrt{5}\,\epsilon 0,\ \sqrt{5}\,\epsilon 0,\ 0\right\},\ \left\{\left\{\frac{1}{2},\ -\frac{i\sqrt{5}}{2},\ 1\right\},\ \left\{\frac{1}{2},\ \frac{i\sqrt{5}}{2},\ 1\right\},\ \{-2,\ 0,\ 1\}\right\}\right\}$

Out[ ]= $\{\{2\,a0,\ -a0,\ 0\},\ \{\{-i,\ 2,\ 1\},\ \{-i,\ -1,\ 1\},\ \{i,\ 0,\ 1\}\}\}$

In[ ]:= `MatrixForm[ψf = Proyector[Eigensystem[A7][[2, 2]]].Eigensystem[H7][[2, 2]]]`

Out[ ]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} \left(\frac{1}{2} - i\right) - \frac{\sqrt{5}}{2} \\ \left(-1 - \frac{i}{2}\right) + \frac{i\sqrt{5}}{2} \\ \left(1 + \frac{i}{2}\right) - \frac{i\sqrt{5}}{2} \end{pmatrix}$$

In[ ]:= `ExpectationValue[H7, ψf] // FullSimplify`

Out[ ]= $\left(-5 + \sqrt{5}\right) \epsilon0$

Problema 8:

In[30]:=
```
(* A8 *)
MatrixForm[A8 = 1/Sqrt[2] {{2, 0, 0}, {0, 1, I}, {0, -I, 1}}]
(* B8 *)
MatrixForm[B8 = {{1, 0, 0}, {0, 0, -I}, {0, I, 0}}]
(* State *)
MatrixForm[ψ8 = 1/6 {1, 0, 4}]
```

Out[30]//MatrixForm=

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

Out[31]//MatrixForm=

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

Out[32]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ 0 \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

In[33]:=
```
(* verificamos que el los observables tengan valores propios no degenerados *)
Eigensystem[A8]
Eigensystem[B8]
```

Out[33]= $\left\{\left\{\sqrt{2}, \sqrt{2}, 0\right\}, \{\{0, i, 1\}, \{1, 0, 0\}, \{0, -i, 1\}\}\right\}$

Out[34]= $\{\{-1, 1, 1\}, \{\{0, i, 1\}, \{0, -i, 1\}, \{1, 0, 0\}\}\}$

Dado que queremos medir el valor de 2, pero este no es un valor permitido, la probabilidad de medirlo la tomamos como cero (no tiene sentido físico pretender obtener un valor no perteneciente al conjunto de vectores propios del observable).

Extra:

Las primeras dos funciones, se lograron unir en una sola, únicamente dependiendo de la función **ObservableEV**.

In[35]:=
```
GeneralProbability[SqMatrix_, State_, Eigenvalue_] :=
 Plus @@ ((Abs[#.State]^2) / (Norm[#]^2 * Norm[State]^2) & /@ ObservableEV[SqMatrix, Eigenvalue])
```

In[38]:=
```
(* Pruebas de la nueva función *)
(* valor degenerado *)
GeneralProbability[T2, ψ2, Sqrt[2]]
(* valor no degenerado *)
GeneralProbability[T, ψ0, -1]
```

Out[38]= $\frac{33}{35}$

Out[39]= $\frac{2}{3}$

In[1]:=
```
(* :Author: Diego Sarceño *)
(* :Date: March 07, 2022 *)
(* :Description: Package with useful routines in quantum mechanics *)
BeginPackage["qmDS`"]

ObservableEV::usage="ObservableEV[SqMatrix,Eigenvalue] gives de set of eigenvectors
Proyector::usage="Proyector[Vector] constructs the ket-bra using the same vector."
ExpectationValue::usage="ExpectationValue[SqMatrix,State] gives the expectation val
Conmutator::usage="Conmutator[SqMatrix1,SqMatrix2] constructs the conmutator betwee
GeneralProbability::usage="GeneralProbability[SqMatrix,State,Eigenvalue] gives the
```

In[7]:=
```
Begin["`Private`"]
(* ObservableEV *)
ObservableEV[SqMatrix_,EigValue_]:=Eigenvectors[SqMatrix][[Flatten[Position[Eigenvalues
```

Out[7]= qmDS`Private`

In[9]:=
```
(* Proyector *)
Proyector[Vector_]:=Outer[Times,Vector,Conjugate[Vector]]
```

In[10]:=
```
(* ExpectationValue *)
ExpectationValue[SqMatrix_,State_]:=Conjugate[State] . (SqMatrix . State)
```

In[11]:=
```
(* Conmutator *)
Conmutator[SqMatrix1_,SqMatrix2_]:=SqMatrix1 . SqMatrix2 - SqMatrix2 . SqMatrix1
```

In[12]:=
```
(* GeneralProbability *)
```
GeneralProbability[SqMatrix_,State_,Eigenvalue_]:=Plus@@$\left(\frac{(\text{Abs}[\#.\text{State}]^2)}{\text{Norm}[\#]^2 * \text{Norm}[\text{State}]^2}\right.$ &/@Obse

In[13]:=
```
End[];
EndPackage[]
```