FYS3110 - Oblig 3 - Karl Henrik Fredly

14. september 2020

Problem 3.7(X)

a)

$$
\begin{aligned}
(\left[\hat{A},\hat{B}\right])^\dagger = (\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})^\dagger = (\hat{A}\hat{B})^\dagger - \hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger = \hat{A}\hat{B}-\hat{A}\hat{B} = 0 \\
\Rightarrow \left[\hat{A},\hat{B}\right] = 0
\end{aligned} \tag{1}
$$

Siden $\hat{A}\hat{B}$ er hermitisk og komplekskonjugering kun sender 0 på 0.

b)

Ressonomentet i a) gjelder helt likt for $\hat{A}$ og $\hat{C}$. Siden $\hat{A}$, $\hat{B}$ og $\hat{C}$ alle er hermitiske og kommuterer med $\hat{A}$ deler de egentilstander. Siden spekteret til $\hat{A}$ ikke er degenerert kan vi skrive $\hat{B}$ og $\hat{C}$ uttrykt ved egenverdidekomposisjon, altså egentilstandene i ortonormale matriser og en diagonal matrise med egenverdiene sine slik at vi får:

$$
\begin{aligned}
([B,C])^\dagger &= BC - CB = UD_BU^\dagger UD_CU^\dagger - UD_CU^\dagger UD_BD^\dagger \\
&= UD_BD_CU^\dagger - UD_CD_BU^\dagger = UD_BD_CU^\dagger - UD_BD_CU^\dagger = 0
\end{aligned} \tag{2}
$$

Siden diagonale matriser alltid kommuterer. B og C deler egentilstander, så ψ_2 er en egentilstand til C med egenverdi λ_{C2} og vi får:

$$
\langle\psi_1|\,\hat{C}\,|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\,\lambda_{C2}\,|\psi_2\rangle = \lambda_{C2}\,\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0 \tag{3}
$$

Problem 3.8(H)

a)

Finner hvor $\hat{H}$ sender standardbasisvektorene, og setter det som kolonnene i $\hat{H}$.

$$\hat{\mathbf{H}} = \begin{bmatrix} -V & -g & 0 & 0 \\ -g & 0 & -g & 0 \\ 0 & -g & 0 & -g \\ 0 & 0 & -g & 0 \end{bmatrix}$$

b)

Finner hvor $\hat{X}$ sender standardbasisvektorene, og setter det som kolonnene i $\hat{X}$.

$$\hat{\mathbf{H}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

c)

Liten vegg med kode:

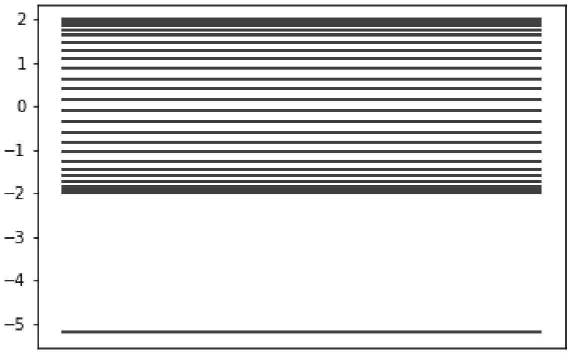
```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

V = 5
g = 1

L = 25
#Hamiltonian
H = np.zeros((L, L))
H[0, 0] = -V
H[0, 1] = -g
for i in range(1, L-1):
    H[i, i-1] = -g
    H[i, i+1] = -g
H[L-1, L-2] = -g
#X
X = np.zeros((L, L))
for i in range(L):
```

```
    X[i, i] = i
#Gjør det enkelt
eigVals = np.linalg.eig(H)[0]
eigVecs = np.linalg.eig(H)[1]
print(eigVals[0])
plt.hlines(eigVals, 0, 1)
plt.xticks([])
plt.savefig("energylevel")
plt.show()
```

Den laveste energien er -5.2.



Figur 1: Energinivåene.

d)

```
GS = eigVecs[:,0]
print(GS[0]**2)
print(eigVecs[:,0][1]**2)
```

Sannsynligheten for å finne elektronet på atom 0 er 0.96, og sannsynligheten for å finne elektroner på atom 1 er 0.0384.

e)

```
print(np.inner(np.conj(GS), X @ GS))
```

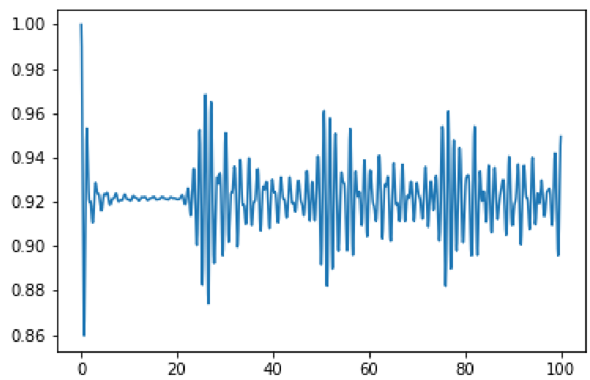
Forventningsverdien til posisjonen i grunntilstanden er 0.0417, altså veldig nært 0.

f)

Finner $|0\rangle$ som en lineærkombinasjon av energiegentilstandene, og finner tidsutviklingen ved å gi hver komponent i lineærkombinasjonen sin egen eksponential gitt ved egenverdien for energi.

```
v0 = np.zeros(L); v0[0] = 1
coeffs = np.linalg.solve(eigVecs, v0)
hbar = 1
def prob0(t):
    total = 0
    for i in range(L):
        total += eigVecs[:,i][0] * coeffs[i] * np.exp(-1j / hbar * eigVals[i] *
    return np.abs(total)**2

t = np.linspace(0, 100, 1000)
plt.plot(t, prob0(t))
plt.savefig("tidsutvikling")
plt.show()
```



Figur 2: Tidsutviklingen fra måling av elektronet i $|0\rangle$.

g)

Ved omtrent t=23$\hbar$ begynner $P_0(t)$ å oscillere mye mer. En mulighet kan være at en bølge som spredte seg ved starten av tidsutviklingen til de andre posisjonene begynner å komme tilbake.

Problem 3.9(H)

a)

$$\hat{\mathbf{H}}^\dagger = \begin{bmatrix} 1 & (\frac{-i}{2})^* & 0 \\ (\frac{i}{2})^* & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{i}{2} & 0 \\ \frac{-i}{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \hat{\mathbf{H}}$$

b)

$$\hat{\mathbf{H}} \left|\mathbf{1}\right\rangle = \begin{bmatrix} 1 & \frac{i}{2} & 0 \\ \frac{-i}{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} i + \frac{i}{2} \\ \frac{-i^2}{2} + 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \frac{3i}{2} \\ \frac{3}{2} \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{3}{2} \left|1\right\rangle$$

$$\hat{\mathbf{H}} \left|\mathbf{2}\right\rangle = \begin{bmatrix} 1 & \frac{i}{2} & 0 \\ \frac{-i}{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \left|2\right\rangle$$

$$\hat{\mathbf{H}} \left|\mathbf{3}\right\rangle = \begin{bmatrix} 1 & \frac{i}{2} & 0 \\ \frac{-i}{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} -i \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} -i + \frac{i}{2} \\ \frac{i^2}{2} + 1 \\ \frac{-1}{2} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} \frac{-i}{2} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{-1}{2} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \left|3\right\rangle$$

c)

Regnet ut med python:

```
H9 = np.array([
    [1, 0.5j, 0],
    [-0.5j, 1, 0],
    [0, 0, 0.5]
])
v1 = 1/2**0.5 * np.array([1j, 1, 0])
v2 = np.array([0, 0, 1])
v3 = 1/3**0.5 * np.array([-1j, 1, -1])
for i in [v1, v2, v3]:
    for j in [v1, v2, v3]:
        print(np.inner(np.conj(i), H9 @ j))
for i in [1, 2, 3]: #printer tilsvarende indekser for å være sikker på plasseri
    for j in [1, 2, 3]:
        print(i , j)
```

$$\hat{\mathbf{H}} = \begin{bmatrix} 1.5 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & -0.288 \\ 0 & -0.289 & 0.5 \end{bmatrix}$$

Matrisen er ikke diagonal.

d)

Ser at $\langle 2|$ og $\langle 3|$ ikke er ortogonale. Finner projeksjonen av $\langle 2|$ på $\langle 3|$:

$$\langle 3|2\rangle\,|2\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}}\,|2\rangle$$

Vi definerer da en ny egenket:

$$|3'\rangle = |3\rangle - \langle 3|2\rangle\,|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} -i \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Normerer og får istedet en faktor $\frac{1}{\sqrt{2}}$ foran. Vi får:

```
v3 = 1/2**0.5 * np.array([-1j, 1, 0])
for i in [v1, v2, v3]:
    for j in [v1, v2, v3]:
        print(np.inner(np.conj(i), H9 @ j))
```

$$\hat{\mathbf{H}} = \begin{bmatrix} 1.5 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0.5 \end{bmatrix}$$

$\hat{H}$ blir diagonal med egenverdiene i riktig rekkefølge langs diagonalen som vi forventer.

Problem 3.10(H)

Vi ser at alle $|\gamma_n\rangle$ er egenvektorer med egenverdi 0. Det gjenstår å se etter egenvektorer i rommet spent ut av $|\psi\rangle$ og $|\phi\rangle$. Vi kan skrive en lineærkombinasjon av disse som $|\lambda\rangle = a\,|\psi\rangle + |\phi\rangle$. Setter opp egenverdiligningen for $|\lambda\rangle$ og ser hvilke a som gir en egenvektor.

$$\hat{H}\,|\lambda\rangle = \hat{H}(a\,|\psi\rangle + |\phi\rangle) = g^*\,|\psi\rangle + ag\,|\phi\rangle)$$

$$\Rightarrow \frac{a}{g^*} = \frac{1}{ag} \Rightarrow a^2 = \frac{g^*}{g} \Rightarrow a = \pm\sqrt{\frac{g^*}{g}}$$

Vi finner egenverdiene ved å sette inn a:

$$\hat{H}(\sqrt{\frac{g^*}{g}}\left|\psi\right\rangle + \left|\phi\right\rangle) = g^*\left|\psi\right\rangle + \sqrt{\frac{g^*}{g}}g\left|\phi\right\rangle) = \sqrt{gg^*}(\sqrt{\frac{g^*}{g}}\left|\psi\right\rangle + \left|\phi\right\rangle)$$

$$\hat{H}(-\sqrt{\frac{g^*}{g}}\left|\psi\right\rangle + \left|\phi\right\rangle) = g^*\left|\psi\right\rangle - \sqrt{\frac{g^*}{g}}g\left|\phi\right\rangle) = -\sqrt{gg^*}(-\sqrt{\frac{g^*}{g}}\left|\psi\right\rangle + \left|\phi\right\rangle)$$

$\hat{H}$ har altså også egentilstand $(\sqrt{\frac{g^*}{g}}\left|\psi\right\rangle + \left|\phi\right\rangle)$ med egenverdi $\sqrt{gg^*}$ og egentilstand $(-\sqrt{\frac{g^*}{g}}\left|\psi\right\rangle + \left|\phi\right\rangle)$ med egenverdi $-\sqrt{gg^*}$.