

Ejercicio 3.2

Se supone que $n_g = 0.5$ y $e_J = 1$. El Hamiltoniano truncado, con $N = 1$, y los vectores propios se calculan con el siguiente programa.

```
import numpy as np
from numpy import linalg

N = 1
ng = 0.5
eJ = 1

def resetH(N):
    return np.zeros((2*N+1, 2*N+1))
def setH(N, ng, eJ):
    MH = resetH(N)
    for i in range(2*N+1):
        MH[i,i] = 4*((i-N-ng)**2)
    for i in range(1,2*N+1):
        MH[i-1,i] = -0.5*eJ
    for i in range(2*N):
        MH[i+1,i] = -0.5*eJ
    return MH

def eigen_vectors(N,ng,eJ):
    M = setH(N,ng,eJ)
    vector_list = linalg.eig(M)[1]
    for i in range(2*N+1):
        V = [vector_list[0,i]]
        for j in range(2*N):
            V = V+[vector_list[j+1,i]]
        P = M@V
        Q = P/V
        print("eigen_vector(",i,")=", V)
        print("eigen_value(",i,")=",Q[0])
        print("=====")

eigen_vectors(N,ng,eJ)
H = setH(N, ng, eJ)
```

Este es el resultado.

```
eigen_vector( 0 )= [0.9980451115916611, -0.06237687508564537, 0.0038833854481092407]
eigen_value( 0 )= 9.031249526880687
=====
eigen_vector( 1 )= [0.0462000657001439, 0.6945120889200995, -0.7179961784530209]
eigen_value( 1 )= 1.4836460901619852
=====
eigen_vector( 2 )= [0.04208929979568658, 0.7167719887093732, 0.6960362110151449]
eigen_value( 2 )= 0.4851043829573307
=====
```

Por tanto, definiendo las listas a , b y c

```
a = [0.9980451115916611, -0.06237687508564537, 0.0038833854481092407]
b = [0.0462000657001439, 0.6945120889200995, -0.7179961784530209]
c = [0.04208929979568658, 0.7167719887093732, 0.6960362110151449]
```

los estados propios, en la base de los estados de carga, son

$$\begin{aligned} |\psi_0\rangle &= a_0|-1\rangle + a_1|0\rangle + a_2|1\rangle, \\ |\psi_1\rangle &= b_0|-1\rangle + b_1|0\rangle + b_2|1\rangle, \\ |\psi_2\rangle &= c_0|-1\rangle + c_1|0\rangle + c_2|1\rangle. \end{aligned}$$

Se comprueba que son ortonormales (con pequeños impreciones de cálculo):

```
a[0]**2 + a[1]**2 + a[2]**2
1.0
b[0]**2 + b[1]**2 + b[2]**2
1.0
```

```

c[0]**2 + c[1]**2 + c[2]**2
1.0000000000000004

a[0]*b[0] + a[1]*b[1] + a[2]*b[2]
1.2576745200831851e-17
a[0]*c[0] + a[1]*c[1] + a[2]*c[2]
8.673617379884035e-18
b[0]*c[0] + b[1]*c[1] + b[2]*c[2]
5.551115123125783e-17

```

Ejercicio 3.3

La matriz M que transforma los coeficientes de un vector representado en la base de los estados de carga en su representación en la base de los estados propios es la siguiente:

```

M = np.matrix([a, b, c]).transpose()
M
matrix([[ 0.99804511,  0.04620007,  0.0420893 ],
        [-0.06237688,  0.69451209,  0.71677199],
        [ 0.00388339, -0.71799618,  0.69603621]])

```

Se comprueba que la matriz M es unitaria (con pequeñas imprecisiones de cálculo).

```

M@M.transpose()
matrix([[1.00000000e+00, 2.88551468e-17, 1.35868390e-17],
        [2.88551468e-17, 1.00000000e+00, 1.25843294e-16],
        [1.35868390e-17, 1.25843294e-16, 1.00000000e+00]])

```

La matriz $M^T = M^{-1}$ es la siguiente:

```

M.transpose()
matrix([[ 0.99804511, -0.06237688,  0.00388339],
        [ 0.04620007,  0.69451209, -0.71799618],
        [ 0.0420893 ,  0.71677199,  0.69603621]])

```

Las columnas de M^T , es decir, las filas de M , son los coeficientes de la representación de los estados de carga en la base de los estados propios:

$$\begin{aligned}
|-1\rangle &= a_0|\psi_0\rangle + b_0|\psi_1\rangle + c_0|\psi_2\rangle, \\
|0\rangle &= a_1|\psi_0\rangle + b_1|\psi_1\rangle + c_1|\psi_2\rangle, \\
|1\rangle &= a_2|\psi_0\rangle + b_2|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle.
\end{aligned}$$

Resumiendo y redondeando:

$$\begin{aligned}
|\psi_0\rangle &= 0.998|-1\rangle - 0.062|0\rangle + 0.004|1\rangle, \\
|\psi_1\rangle &= 0.046|-1\rangle + 0.695|0\rangle - 0.718|1\rangle, \\
|\psi_2\rangle &= 0.042|-1\rangle + 0.717|0\rangle + 0.696|1\rangle.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|-1\rangle &= 0.998|\psi_0\rangle + 0.046|\psi_1\rangle + 0.042|\psi_2\rangle, \\
|0\rangle &= -0.062|\psi_0\rangle + 0.695|\psi_1\rangle + 0.717|\psi_2\rangle, \\
|1\rangle &= 0.004|\psi_0\rangle - 0.718|\psi_1\rangle + 0.696|\psi_2\rangle.
\end{aligned}$$

Se calculan las probabilidades que corresponden a los coeficientes a_1 , a_2 , b_0 y c_0 :

```

a[1]**2
0.003890874545450206
a[2]**2
1.5080682538586608e-05
b[0]**2
0.002134446070697613
c[0]**2
0.0017715091572911826

```

Son prácticamente nulas. Por tanto

$$\begin{aligned}
|\psi_0\rangle &\approx |-1\rangle, \\
|\psi_1\rangle &\approx \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle), \\
|\psi_2\rangle &\approx \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|-1\rangle &\approx |\psi_0\rangle, \\
|0\rangle &\approx \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle), \\
|1\rangle &\approx \frac{1}{\sqrt{2}}(-|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle).
\end{aligned}$$