Hoja de trabajo 2

En este notebook mostramos cómo usar Mathematica para resolver los ejercicios 3 y 5 de la hoja de trabajo 2. Algunas de las ventajas que tiene utilizar Mathematica es:

- No se pierde tiempo en cálculos matemáticos (eigenvalores, eigenvectores, cálculo de productos internos) y no se desvía la atención de la física.
- La aritmética es bien difícil. A veces es mejor dejar que la compu haga los cálculos porque luego uno se empeña de más porque se le olvidó copiar un signo "-".
- A largo plazo tiene muchas ventajas de cara a un proyecto de graduación o un trabajo aprender herramientas de computación. Es un valor agregado muy poderoso junto con saber matemáticas.

Definición de rutinas

Como parte de la programación limpia me gusta definir rutinas para no estar copiando código una y otra vez durante todo el notebook. Es mejor sólo llamar a la rutina.

```
(* Conmutador de dos matrices A y B *)
Commutator[A_, B_] := A.B - B.A

(* Matriz del proyector de un vector vec *)
Projector[vec_] := Outer[Times, vec, vec]
```

Ejercicio 3

a.

La dimensión del espacio deber ser igual a 3 porque el espacio de Hilbert es $\mathbb{C}^3$.

b.

Sí. Los operadores conmutan.

In[29]:=
```
MatrixForm[H = ϵ0 {{-2, 0, 0}, {0, 1, 0}, {0, 0, 1}}]
```

Out[29]//MatrixForm=

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

In[30]:=
```
MatrixForm[A = a0 {{5, 0, 0}, {0, 0, 2}, {0, 2, 0}}]
```
Out[30]//MatrixForm=

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

In[31]:=
```
MatrixForm[Commutator[H, A]]
```
Out[31]//MatrixForm=

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

c.

No, no importa el orden porque H y A conmutan. Es decir, son observables compatibles.

d.

Un CSCO es un conjunto de operadores que conmutan todos entre todos y que además cada conjunto de eigenvalores define unívocamente a cada eigenvector.

Para revisar cuáles de los posible conjuntos son CSCO (conjunto completo de observables que conmutan, CSCO por sus siglas en inglés) necesitamos revisar también el espectro (eigenvalores) de cada uno de los operadores para revisar si alguno presenta degeneración.

In[25]:=
```
Eigenvalues[H]
```
Out[25]= $\{-2\,\epsilon0,\ \epsilon0,\ \epsilon0\}$

In[26]:=
```
Eigenvalues[A]
```
Out[26]= $\{5\,a0,\ -2\,a0,\ 2\,a0\}$

Dado que H y A conmutan, entonces deben tener compartir una eigenbase, es decir,

$$H\left|\psi_i\right\rangle = E_i\left|\psi_i\right\rangle$$
$$A\left|\psi_i\right\rangle = a_i\left|\psi_i\right\rangle,$$

con $\left|\psi_{\mathrm{i}}\right\rangle$ eigenvectores de H y de A simultáneamente. **Es fundamental notar que aunque comparten una eigenbase, los eigenvalores son distintos.** Volvamos a la física... $\left|\psi_{\mathrm{i}}\right\rangle$ son *eigenestados* de los observables H y A. Podríamos caracterizar a los eigenestados únicamente con sus eigenvalores asociados. Por ejemplo, supongamos que $\left|\psi_1\right\rangle$ es el eigenestado cuyo eigenvalor de la energía (eigenvalor de H) es $E_1 = -2\,\epsilon0$. Podría alguien preguntar por el "eigenestado con eigenvalor $-2\,\epsilon0$" y perfectamente sabríamos que se refiere a $\left|\psi_1\right\rangle$. Ahora bien, los dos eigenestados restantes $\left|\psi_2\right\rangle$ y $\left|\psi_3\right\rangle$ tienen ambos eigenvalor $E_2 = E_3 = \epsilon0$, entonces ya no sabríamos a cuál de los estados se referirá alguien si nos pregunta por el eigenestado con eigenvalor $\epsilon0$. Por esto, debe ser obvio que necesitamos también a los eigenvalores de A para poder identificar unívocamente mediante un conjunto de eigenvalores (los números cuánticos) a los eigenestados en común de H y A. Por ejemplo, supongamos que $5\,a0$, $-2\,a0$ *y* $2\,a0$ son los eigenvalores de $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ y $|\psi_3\rangle$; ahora si nos preguntan por el estado *con números cuánticos* ($\epsilon 0$, $-2\,a0$) sí podemos saber que se refieren al estado $|\psi_2\rangle$.

Revisemos qué pasa con $\{H^2, A\}$:

In[27]:=
```
Commutator[H.H, A]
```
Out[27]=
```
{{0, 0, 0}, {0, 0, 0}, {0, 0, 0}}
```

In[28]:=
```
Eigenvalues[H.H]
```
Out[28]= $\{4\,\epsilon 0^2, \epsilon 0^2, \epsilon 0^2\}$

Los CSCO son:
$\{A\}$, $\{H, A\}$, $\{H^2, A\}$

e.

Para este sistema se necesitan 1 o 2 números cuánticos.

Ejercicio 5

a.

In[34]:= $\texttt{MatrixForm}\left[A = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\{2, 0, 0\}, \{0, 1, 1\}, \{0, 1, 1\}\}\right]$

Out[34]//MatrixForm=

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

In[35]:=
```
MatrixForm[B = {{1, 0, 0}, {0, 0, 1}, {0, 1, 0}}]
```
Out[35]//MatrixForm=

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

In[36]:=
```
MatrixForm[Commutator[A, B]]
```
Out[36]//MatrixForm=

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

A y B son compatibles.

b.

Revisando los espectros:

In[39]:=
```
Eigensystem[A]
```

Out[39]= $\left\{\left\{\sqrt{2}, \sqrt{2}, 0\right\}, \{\{0, 1, 1\}, \{1, 0, 0\}, \{0, -1, 1\}\}\right\}$

In[48]:=
```
Eigensystem[B][[All, {2, 3, 1}]]
```

Out[48]= {{1, 1, -1}, {{0, 1, 1}, {1, 0, 0}, {0, -1, 1}}}

Ya que los dos espectros son degenerados, pero vemos que los conjuntos de números cuánticos (a_i, b_i) definen unívocamente a cada eigenvector, entonces el único CSCO es {*A*, *B*}.

c.

Se necesitan dos números cuánticos.

d.

Normalizamos ψ:

In[50]:=
```
MatrixForm[ψ = Normalize[{5, 1, 3}]]
```

Out[50]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} \sqrt{\frac{5}{7}} \\ \frac{1}{\sqrt{35}} \\ \frac{3}{\sqrt{35}} \end{pmatrix}$$

Normalizamos los eigenvectores de *A* con eigenvalor $\sqrt{2}$:

In[55]:=
```
(* evAi: eigenvector i de A *)
evA1 = Normalize[{0, 1, 1}]; evA2 = {1, 0, 0};
MatrixForm /@ {evA1, evA2}
```

Out[56]=
$$\left\{\begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}\right\}$$

Normalizamos el eigenvector de *B* con eigenvalor -1:

In[58]:=
```
MatrixForm[evB3 = Normalize[{0, -1, 1}]]
```

Out[58]//MatrixForm=

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

Calculamos la probabilidad de medir ψ en los eigenvectores de *A* con eigenvalor $\sqrt{2}$, es decir

$$\text{Prob}\left(A = \sqrt{2}\right) = |\langle \text{evA1} \mid \psi\rangle|^2 + |\langle \text{evA2} \mid \psi\rangle|^2$$

```
Abs[#.ψ]^2 &/@{evA1, evA2}
```

Out[59]= $\left\{\frac{8}{35}, \frac{5}{7}\right\}$

La probabilidad de medir a $\sqrt{2}$ para A es entonces

In[60]:= $\frac{8}{35} + \frac{5}{7}$

Out[60]= $\frac{33}{35}$

El estado despúes de la medición de A es (proyectamos ψ sobre evA1 + evA2, el eigenespacio con eigenvalor $\sqrt{2}$)

```
In[84]:= ψAfterA = Normalize[Projector[evA1].ψ + Projector[evA2].ψ]
```

Out[84]= $\left\{\frac{5}{\sqrt{33}}, \frac{2}{\sqrt{33}}, \frac{2}{\sqrt{33}}\right\}$

Calculamos ahora la probabilidad de medir al nuevo estado en -1 para B:

```
In[85]:= Abs[evB3.ψAfterA]^2
```

Out[85]= 0

Dado que A y B son compatibles, entonces no importa el orden de medición, los resultados serán los mismos. Por lo tanto, sin importar el orden de la medición, al medir $\sqrt{2}$ para A y -1 para B, la probabilidad es $\frac{33}{35} \times 0 = 0$. Si hubiésemos meditado un poco el problema podríamos haber notado que el resultado de medir -1 para B en el estado ψ es igual a cero, entonces no tendríamos que haber realizado más cálculos (inserte emoji de payaso).

e.

Cero .

f.

Nos medio ahorramos los cálculos (no hicimos e) porque notamos que A y B son compatibles, lo que quiere decir que el orden de la medición no importa, traducido en término de las probabilidades $P\left(a = \sqrt{2}\right) P(B = -1) = P(b = -1)\, P\left(a = \sqrt{2}\right)$. Recordemos que esto sólo es válido para operadores compatibles (que conmutan).