Exercise 3.1

A particle in an infinite potential box with walls at $x = 0$ and $x = a$ (i.e., the potential is infinite for $x < 0$ and $x > a$ and zero in between) has the following wave function at some initial time:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{5a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{2}{\sqrt{5a}} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right).$$

(a) Find the possible results of the measurement of the system's energy and the corresponding probabilities.

(b) Find the form of the wave function after such a measurement.

(c) If the energy is measured again immediately afterwards, what are the relative probabilities of the possible outcomes?

Solución:

Cuando resolvimos el pozo infinito de potencial con estos mismos parámetros encontramos las funciones de onda $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\, \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$ y las energías propias $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2 m a^2}$ con $n = 1, 2, 3, \ldots$.

Así que fácilmente identificamos la función de onda al tiempo inicial

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{5\, a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{2}{\sqrt{5\, a}} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)$$

como la superposición

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{10}} \varphi_1(x) + \frac{2}{\sqrt{10}} \varphi_3(x).$$

Como el conjunto $\{\varphi_n(x),\ n = 1, 2, 3, \ldots\}$ es ortonormal y completo, la función de onda $\psi(x)$ no está normalizada, ya que $\left(\frac{1}{\sqrt{10}}\right)^2 + \left(\frac{2}{\sqrt{10}}\right)^2 = \frac{1}{2} \neq 1$. Nota: Por el planteamiento del problema en el libro siento que el autor intentó poner la función de onda ya normalizada, pero hubo un pequeño error y la puso mal.

Pra normalizarla es obvio que debemos multiplicar cada coeficiente por $\sqrt{2}$. Por lo tanto, la función de onda normalizada que hay que considerar en el enunciado del problema es

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{5\, a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{5\, a}} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)$$

que se escribe como la superposición

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{5}} \varphi_1(x) + \frac{2}{\sqrt{5}} \varphi_3(x),$$

y ahora $\left(\frac{1}{\sqrt{5}}\right)^2 + \left(\frac{2}{\sqrt{5}}\right)^2 = 1$.

(a) Find the possible results of the measurement of the system's energy and the corresponding probabilities.

Como hemos aprendido de los principios básicos de la mecánica cuántica, los valores que podemos obtener en la medición de una variable dinámica son los valores porpios de su correspondiente operador. En este caso los dos valores propios que pueden aparecer son $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m a^2}$ y

$E_3 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$. La probabilidad con que van a aparecer es el cuadrado de los coeficientes en el desarrollo de la función de onda en términos de funciones propias. Asi que $P(E_1) = \frac{1}{5}$ y $P(E_3) = \frac{4}{5}$.

(b) Find the form of the wave function after such a measurement.

Si medimos la energía y el valor que resulta es $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$, entonces la función propia es $\varphi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\ \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$.

Si medimos la energía y el valor que resulta es $E_3 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$, entonces la función propia es $\varphi_3(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\ \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)$.

(c) If the energy is measured again immediately afterwards, what are the relative probabilities of the possible outcomes?

Si en la primera medición habíamos obtenido la energía $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$, la función de onda original se “colapsa” a la función propia $\varphi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\ \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$, y por lo tanto en medidas subsecuentes obtendremos $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ con probabilidad 1.

Si en la primera medición habíamos obtenido la energía $E_3 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$, la función de onda original se “colapsa” a la función propia $\varphi_3(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\ \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)$, y por lo tanto en medidas subsecuentes obtendremos $E_3 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ con probabilidad 1.

Exercise 3.5
Consider that the wave function of a dimensionless harmonic oscillator, whose Hamiltonian is $\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}\hat{X}^2$, is given at time $t = 0$ by

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}}\phi_0(x) + \frac{1}{\sqrt{18\pi}}\phi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}}e^{-x^2/2} + \frac{1}{\sqrt{18\pi}}\left(1-2x^2\right)e^{-x^2/2}.$$

(a) Find the expression of the oscillator's wave function at any later time t.
(b) Calculate the probability P_0 to find the system in an eigenstate of energy $1/2$ and the probability P_2 of finding the system in an eigenstate of energy $5/2$.
(c) Calculate the probability density, $\rho(x,t)$, and the current density, $\vec{J}(x,t)$.
(d) Verify that the probability is conserved; that is, show that $\partial\rho/\partial t + \vec{\nabla}\cdot\vec{J}(x,t) = 0$.

Solución:

Nota 1: Pongan mucha atención a que en el enunciado se dice explicitamente que es un oscilador armónico sin dimensiones. Esto equivale a tomar $\hbar = m = \omega = 1$. Así que todas las fórmulas que siguen estarán ajustadas a esa hipótesis.

Nota 2: Creo que el enunciado del problema tiene un error, ya que se equivocaron con los coeficientes de las funciones propias del oscilador armónico. En estas unidades, $\phi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}}\exp\left(-x^2/2\right)$ y $\phi_2(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(2x^2-1\right)\exp\left(-x^2/2\right)$. Así que el enunciado debería tener la expresión

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}}\phi_0(x) + \frac{1}{\sqrt{18\pi}}\phi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}}\frac{1}{\pi^{1/4}}\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) - \frac{1}{\sqrt{18\pi}}\frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-2x^2\right)\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right).$$

(a) Find the expression of the oscillator's wave function at any later time t.

Con esta corrección tenemos que al tiempo $t = 0$ el estado del sistema es

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}}\phi_0(x) + \frac{1}{\sqrt{18\pi}}\phi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}}\frac{1}{\pi^{1/4}}\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) - \frac{1}{\sqrt{18\pi}}\frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-2x^2\right)\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right).$$

Esta función de onda no está normalizada ya que la suma de los cuadrados de los coeficientes del desarrollo en términos de funciones propias no es uno; en efecto, $\left(\frac{1}{\sqrt{8\pi}}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{18\pi}}\right)^2 = \frac{13}{72\pi}$.

Para normalizar esta función de onda debemos multiplicar todos los coeficientes por $6\sqrt{\frac{2\pi}{13}}$. Tenemos entonces

$$\psi(x,0) = \frac{6}{\sqrt{52}}\phi_0(x) + \frac{6}{\sqrt{117}}\phi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}}\frac{1}{\pi^{1/4}}\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) - \frac{1}{\sqrt{18\pi}}\frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-2x^2\right)\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right).$$

Es claro que está función de onda inicial sí esta normalizada, ya que $\left(\frac{6}{\sqrt{52}}\right)^2 + \left(-\frac{6}{\sqrt{117}}\right)^2 = \frac{36}{52} + \frac{36}{117} = 1$.

Por tanto la función de onda al tiempo t será

$$\psi(x,t) = \frac{6}{\sqrt{52}}\phi_0(x)\exp(-i E_0 t) + \frac{6}{\sqrt{117}}\phi_2(x)\exp(-i E_2 t)$$
$$= \frac{6}{\sqrt{52}}\frac{1}{\pi^{1/4}}\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)\exp\left(-i\frac{1}{2}t\right) - \frac{6}{\sqrt{117}}\frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-2x^2\right)\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)\exp\left(-i\frac{5}{2}t\right).$$

ya que las energías están dadas como $E_n = n + \frac{1}{2}$.

(b) Calculate the probability P_0 to find the system in an eigenstate of energy $1/2$ and the probability P_2 of finding the system in an eigenstate of energy $5/2$.

Como ya vimos en clase, dichas probabilidades están dadas por los cuadrados de los coeficientes de la superposición lineal en términos de las funciones propias de la energía. Así que

$$P_0 = \left(\frac{6}{\sqrt{52}}\right)^2 = \frac{36}{52} = \frac{9}{13}, \qquad P_2 = \left(\frac{6}{\sqrt{117}}\right)^2 = \frac{36}{117} = \frac{4}{13}.$$

Es claro que $P_0 + P_2 = 1$, tal y como debe ser.

(c) Calculate the probability density, $\rho(x,t)$, and the current density, $\vec{J}(x,t)$.

La densidad de probabilidad es

$$\rho(x,t) = \psi^*(x,t)\,\psi(x,t) = \left[\frac{6}{\sqrt{52}}\frac{1}{\pi^{1/4}}\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)\exp\left(i\,\frac{1}{2}\,t\right) - \frac{6}{\sqrt{117}}\frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{2}}(1-2x^2)\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)\exp\left(i\,\frac{5}{2}\,t\right)\right]$$
$$\times\left[\frac{6}{\sqrt{52}}\frac{1}{\pi^{1/4}}\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)\exp\left(-i\,\frac{1}{2}\,t\right) - \frac{6}{\sqrt{117}}\frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{2}}(1-2x^2)\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)\exp\left(-i\,\frac{5}{2}\,t\right)\right],$$

de donde

$$\rho(x,t) = \frac{1}{13\sqrt{\pi}}\left[11 - 8x^2 + 8x^4 + 6\sqrt{2}\,(2x^2-1)\cos(2t)\right]\exp(-x^2).$$

```
Clear["Global`*"]; Remove["Global`*"];
```

```
ψ[x_, t_] := 6/Sqrt[52] * 1/π^(1/4) * Exp[-x^2/2] * Exp[-ⅈ * 1/2 * t] -
  6/Sqrt[117] * 1/π^(1/4) * 1/Sqrt[2] * (1 - 2 x^2) * Exp[-x^2/2] * Exp[-ⅈ * 5/2 * t]
```

```
t1 = ψ[x, t] * Conjugate[ψ[x, t]];
```

```
ρ[x_, t_] :=
 FullSimplify[ExpToTrig[FullSimplify[t1, Assumptions → (t > 0 && x ∈ Reals && ω > 0)]]]
```

```
ρ[x, t]
```

$$\frac{1}{13\sqrt{\pi}}e^{-x^2}\left(11 - 8x^2 + 8x^4 + 6\sqrt{2}\left(-1+2x^2\right)\mathrm{Cos}[2t]\right)$$

```
Integrate[ρ[x, t], {x, -∞, ∞}]
```

```
1
```

La densidad de corriente es (recuerden que en este problema $\hbar = m = \omega = 1$)

$$J(x,\,t) = \frac{i\,\hbar}{2\,m}\left[\psi^{*}(x,\,t)\,\frac{d\psi(x,\,t)}{dx} - \psi(x,\,t)\,\frac{d\psi^{*}(x,\,t)}{dx}\right].$$

Como

$$\frac{d\psi(x,\,t)}{dx} = -\frac{3\,x}{\sqrt{13}\;\pi^{1/4}}\exp\!\left(-\frac{x^2}{2}\right)\exp\!\left(-i\,\frac{1}{2}\,t\right) + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{13}\;\pi^{1/4}}\,x\left(5-2\,x^2\right)\exp\!\left(-\frac{x^2}{2}\right)\exp\!\left(-i\,\frac{5}{2}\,t\right).$$

```
Clear["Global`*"]; Remove["Global`*"];
```

$$\texttt{ψ[x\_, t\_] :=}\ \frac{6}{\sqrt{52}} * \frac{1}{\pi^{1/4}} * \texttt{Exp}\left[-\frac{x^2}{2}\right] * \texttt{Exp}\left[-i * \frac{1}{2} * t\right] - \frac{6}{\sqrt{117}} * \frac{1}{\pi^{1/4}} * \frac{1}{\sqrt{2}} * \left(1-2\,x^2\right) * \texttt{Exp}\left[-\frac{x^2}{2}\right] * \texttt{Exp}\left[-i * \frac{5}{2} * t\right]$$

$$\texttt{Collect}\left[\texttt{Expand}\left[\texttt{FullSimplify[D[ψ[x, t], x]]}\right],\ \left\{\texttt{Exp}\left[-i * \frac{1}{2} * t\right],\ \texttt{Exp}\left[-i * \frac{5}{2} * t\right],\ e^{-x^2}\right\},\ \texttt{FullSimplify}\right]$$

$$-\frac{3\,e^{-\frac{i\,t}{2}-\frac{x^2}{2}}\,x}{\sqrt{13}\;\pi^{1/4}} + \frac{\sqrt{\frac{2}{13}}\;e^{-\frac{5\,i\,t}{2}-\frac{x^2}{2}}\,x\left(5-2\,x^2\right)}{\pi^{1/4}}$$

tenemos

$$J(x,\,t) = -\frac{24}{13}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\;x\exp\!\left(-x^2\right)\sin(t)\cos(t)$$

```
Clear["Global`*"]; Remove["Global`*"];
```

$$\texttt{ψ[x\_, t\_] :=}\ \frac{6}{\sqrt{52}} * \frac{1}{\pi^{1/4}} * \texttt{Exp}\left[-\frac{x^2}{2}\right] * \texttt{Exp}\left[-i * \frac{1}{2} * t\right] - \frac{6}{\sqrt{117}} * \frac{1}{\pi^{1/4}} * \frac{1}{\sqrt{2}} * \left(1-2\,x^2\right) * \texttt{Exp}\left[-\frac{x^2}{2}\right] * \texttt{Exp}\left[-i * \frac{5}{2} * t\right]$$

$$\texttt{t1} = \frac{i}{2} * \left(-\texttt{Conjugate[ψ[x, t]]} * \texttt{D[ψ[x, t], x]} + \texttt{ψ[x, t]} * \texttt{Conjugate[D[ψ[x, t], x]]}\right);$$

```
FullSimplify[t1, Assumptions → (ω > 0 && t > 0 && x ∈ Reals)]
```

$$-\frac{24}{13} e^{-x^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, x \operatorname{Cos}[t] \operatorname{Sin}[t]$$

(d) Verify that the probability is conserved; that is, show that $\partial\rho/\partial t + \vec{\nabla}\cdot\vec{J}(x,t) = 0$.

Tenemos

$$\rho(x,\,t) = \frac{1}{13\sqrt{\pi}}\left[11 - 8x^2 + 8x^4 + 6\sqrt{2}\,(2x^2-1)\cos(2t)\right]\exp(-x^2)$$

y

$$J(x,\,t) = -\frac{24}{13}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,x\exp(-x^2)\sin(t)\cos(t)$$

Así que

$$\frac{\partial\rho(x,\,t)}{\partial t} = -\frac{24\sqrt{2}}{13\sqrt{\pi}}(2x^2-1)\sin(t)\cos(t)\exp(-x^2)$$

y

$$\frac{\partial J(x,\,t)}{\partial x} = -\frac{24}{13}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,(1-2x^2)\exp(-x^2)\sin(t)\cos(t)$$

Por tanto,

$$\frac{\partial\rho(x,\,t)}{\partial t} + \frac{\partial J(x,\,t)}{\partial x} = 0$$

como se queria demostrar

```
Clear["Global`*"]; Remove["Global`*"];
```

```
$Assumptions = (x ∈ Reals && t > 0);
```

$$\psi[x\_,\, t\_] := \frac{6}{\sqrt{52}} * \frac{1}{\pi^{1/4}} * \operatorname{Exp}\left[-\frac{x^2}{2}\right] * \operatorname{Exp}\left[-i * \frac{1}{2} * t\right] - \frac{6}{\sqrt{117}} * \frac{1}{\pi^{1/4}} * \frac{1}{\sqrt{2}} * (1 - 2x^2) * \operatorname{Exp}\left[-\frac{x^2}{2}\right] * \operatorname{Exp}\left[-i * \frac{5}{2} * t\right]$$

```
ρ[x_, t_] := FullSimplify[ComplexExpand[ψ[x, t] * Conjugate[ψ[x, t]]]]
```

```
ρ[x, t]
```

$$\frac{1}{13\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \left(11 - 8 x^2 + 8 x^4 + 6\sqrt{2} \left(-1 + 2 x^2\right) \mathrm{Cos}[2 t]\right)$$

```
j[x_, t_] :=
 FullSimplify[
  ComplexExpand[
   ⅈ/2 * (-Conjugate[ψ[x, t]] * D[ψ[x, t], x] + ψ[x, t] * Conjugate[D[ψ[x, t], x]])]]
```

```
j[x, t]
```

$$-\frac{12}{13} e^{-x^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, x\, \mathrm{Sin}[2 t]$$

```
ec = D[ρ[x, t], t] + D[j[x, t], x];
```

```
FullSimplify[PowerExpand[ComplexExpand[ExpandAll[ec]]]]
```

0

Exercise 3.10
A particle bound in a one-dimensional potential has a wave function

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{5ikx} \cos(3\pi x/a), & -a/2 \le x \le a/2, \\ 0, & |x| > a/2. \end{cases}$$

(a) Calculate the constant A so that $\psi(x)$ is normalized.
(b) Calculate the probability of finding the particle between $x = 0$ and $x = a/4$.

Solución:

(a)

Para calcular la constante de normalización hacemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx = 1$$

pero

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx = |A|^2 \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2(3\,\pi\,x/a)\,dx = |A|^2\,\frac{a}{2}$$

así que $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$.

(b)

La probabilidad pedida es

$$P = \int_0^{a/4} \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx$$

que da

$$P = \frac{2}{a}\int_0^{a/4} \cos^2(3\,\pi\,x/a)\,dx = \frac{3\,\pi - 2}{12\,\pi}.$$

Numéricamente tenemos, $P = 0.20$, es decir, un 20% de probabilidad de que la partícula esté en esa región.

```
Clear["Global`*"]; Remove["Global`*"];
```

```
$Assumptions = (k > 0 && a > 0);
```

```
ψ[x_] := { A * Exp[5 ⅈ * k * x] * Cos[3*π*x/a]   -a / 2 < x < a / 2
         { 0                                     Abs[x] > a / 2
```

```
Integrate[ψ[x] * Conjugate[ψ[x]], {x, -∞, ∞}]
```

$$\frac{1}{2} a A \text{Conjugate}[A]$$

$$\psi[x\_] := \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} * \text{Exp}[5\, i * k * x] * \text{Cos}\left[\frac{3*\pi*x}{a}\right] & -a/2 < x < a/2 \\ 0 & \text{Abs}[x] > a/2 \end{cases}$$

```
Integrate[ψ[x] * Conjugate[ψ[x]], {x, 0, a / 4}]
```

$$\frac{-2 + 3\pi}{12\pi}$$

```
N[%]
```

0.196948

Exercise 3.13
Show that the momentum and the total energy can be measured simultaneously only when the potential is constant everywhere.

Solución:

Dos variables dinámicas pueden ser medidas simultaneamente si el conmutador de los operadores asociados a ellas es cero.

El operador asociado con la energía total es el hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\,m} + V(\vec{r}).$$

El conmutador del momento y de la energía es entonces

$$\left[\hat{H}, \hat{p}\right] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2\,m} + V(\vec{r}), \hat{p}\right] = \frac{1}{2\,m}\left[\hat{p}^2, \hat{p}\right] + \left[V(\vec{r}), \hat{p}\right].$$

Es claro que $\left[\hat{p}^2, \hat{p}\right] = 0$, y por lo tanto,

$$\left[\hat{H}, \hat{p}\right] = \left[V(\vec{r}), \hat{p}\right].$$

La única forma de que este último conmutador sea cero, es que el potencial sea una constante.

Exercise 3.15

The complete set expansion of an initial wave function $\psi(x, 0)$ of a system in terms of orthonormal energy eigenfunctions $\phi_n(x)$ of the system has three terms, $n = 1, 2, 3$. The measurement of energy on the system represented by $\psi(x, 0)$ gives three values, E_1 and E_2 with probability $1/4$ and E_3 with probability $1/2$.

(a) Write down $\psi(x, 0)$ in terms of $\phi_1(x)$, $\phi_2(x)$, and $\phi_3(x)$.

(b) Find $\psi(x, 0)$ at any later time t, i.e., find $\psi(x, t)$.

Solución:

(a)

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{2}\phi_1(x) + \frac{1}{2}\phi_2(x) + \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_3(x)$$

(b)

$$\psi(x, t) = \frac{1}{2}\phi_1(x)\exp\left(-i\frac{E_1}{\hbar}t\right) + \frac{1}{2}\phi_2(x)\exp\left(-i\frac{E_2}{\hbar}t\right) + \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_3(x)\exp\left(-i\frac{E_3}{\hbar}t\right)$$

Exercise 3.17
Consider a physical system whose Hamiltonian and initial state are given by

$$H = \mathcal{E}_0 \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad |\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix},$$

where $\mathcal{E}_0$ has the dimensions of energy.
(a) What values will we obtain when measuring the energy and with what probabilities?
(b) Calculate the expectation value of the Hamiltonian $\langle \hat{H} \rangle$.

Solución:

(a) What values will we obtain when measuring the energy and with what probabilities?

Los valores que se pueden obtener de una variable dinámica son los valores propios de su correspondiente operador, así que los valores que podemos obtener al medir la energía son los valores propios de

$$\hat{H} = \varepsilon_0 \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Para obtener los valores propios, debemos resolver la ecuación característica

$$\det\left(\hat{H} - \lambda\, I\right) = 0;$$

es decir,

$$\det \begin{pmatrix} \varepsilon_0 - \lambda & -\varepsilon_0 & 0 \\ -\varepsilon_0 & \varepsilon_0 - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & -\varepsilon_0 - \lambda \end{pmatrix} = \varepsilon_0\, \lambda^2 + 2\, \varepsilon_0^2\, \lambda - \lambda^3 = -\, \lambda\, (\lambda - 2\, \varepsilon_0)\, (\varepsilon_0 + \lambda) = 0$$

que claramente nos da tres valores propios de la energía

$$\lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = -\varepsilon_0, \quad \lambda_3 = 2\, \varepsilon_0.$$

Los estados asociados con estos valores propios son los correspondientes vectores propios, que se encuentran al resolver las ecuaciones

$$\varepsilon_0 \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = 0, \qquad \varepsilon_0 \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = -\varepsilon_0 \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}, \qquad \varepsilon_0 \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = 2\, \varepsilon_0 \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix},$$

una para cada valor propio. Desarrollando nos dan

$$\begin{pmatrix} u - v \\ v - u \\ -w \end{pmatrix} = 0, \qquad \begin{pmatrix} 2\, u - v \\ 2\, v - u \\ 0 \end{pmatrix} = 0, \qquad \begin{pmatrix} u + v \\ u + v \\ 3\, w \end{pmatrix} = 0$$

que nos lleva a los vectores propios normalizados

$$|\,\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\,\phi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad |\,\phi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Las probabilidades están dadas por

$$P(E_1 = 0) = |\langle\phi_1 \mid \psi_0\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}\right|^2 = \frac{1}{3}$$

$$P(E_2 = -\varepsilon_0) = |\langle\phi_2 \mid \psi_0\rangle|^2 = \left|\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}\right|^2 = \frac{2}{3}$$

$$P(E_3 = 2\,\varepsilon_0) = |\langle\phi_2 \mid \psi_0\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}\right|^2 = 0$$

(b) Calculate the expectation value of the Hamiltonian $\langle\hat{H}\rangle$.

Podemos calcular el valor esperado del hamiltoniano de dos formas

1. Con los valor propios y las probabilidades que hemos calculado en el punto a), tenemos

$$\langle\hat{H}\rangle = E_1\,P(E_1) + E_2\,P(E_2) + E_3\,P(E_3) = \frac{1}{3}(0) + \frac{2}{3}(-\varepsilon_0) = -\frac{2}{3}\,\varepsilon_0$$

2. Sabemos que el valor esperado se calcula también como

$$\langle\hat{H}\rangle = \left\langle\psi_0 \mid \hat{H} \mid \psi_0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}\varepsilon_0\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} = -\frac{2}{3}\,\varepsilon_0$$

Calculos

```
Clear["Global`*"]; Remove["Global`*"];
```

```
h = ε0 * ( 1  -1  0
          -1   1  0
           0   0 -1 );
```

```
Expand[Det[h - λ * IdentityMatrix[3]]] // TraditionalForm
```

$\varepsilon_0\,\lambda^2 + 2\,\varepsilon_0^2\,\lambda - \lambda^3$

```
Factor[Expand[Det[h - λ * IdentityMatrix[3]]]] // TraditionalForm
```

$-\lambda\,(\lambda - 2\,\varepsilon_0)\,(\varepsilon_0 + \lambda)$

```
Eigenvalues[h]
```

$\{2\,\varepsilon_0, -\varepsilon_0, 0\}$

```
Eigenvectors[h]
```

{{-1, 1, 0}, {0, 0, 1}, {1, 1, 0}}

```
ε0 = 1;
```

```
h.{u, v, w} // MatrixForm // TraditionalForm
```

$$\begin{pmatrix} u - v \\ v - u \\ -w \end{pmatrix}$$

```
(h + ε0 * IdentityMatrix[3]).{u, v, w} // MatrixForm // TraditionalForm
```

$$\begin{pmatrix} 2u - v \\ 2v - u \\ 0 \end{pmatrix}$$

```
(h - 2 ε0 * IdentityMatrix[3]).{u, v, w} // MatrixForm // TraditionalForm
```

$$\begin{pmatrix} -u - v \\ -u - v \\ -3w \end{pmatrix}$$

Exercise 3.20
Consider a physical system which has a number of observables that are represented by the following matrices:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & i \\ -1 & -i & 4 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 3 & 1 \end{pmatrix}.$$

(a) Find the results of the measurements of the compatible observables.
(b) Which among these observables are compatible? Give a basis of eigenvectors common to these observables.
(c) Which among the sets of operators $\{\hat{A}\}$, $\{\hat{B}\}$, $\{\hat{C}\}$, $\{\hat{A}, \hat{B}\}$, $\{\hat{A}, \hat{C}\}$, $\{\hat{B}, \hat{C}\}$ form a complete set of commuting operators?

Solución:

Los operadores están representados por las matrices

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & i \\ -1 & -i & 4 \end{pmatrix}, \qquad C = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 3 & 1 \end{pmatrix}$$

(a) Find the results of the measurements of the compatible observables.

Notemos primero que las matrices que representan a los operadoes son matrices hermitianas, y por tanto, sí pueden representar variable dinámicas observables.

Ya sabemos que al medir una variable dinámica, los valores que podemos obtener son los valores propios del operador correspondiente. Por eso, para saber que valores podemos obtener para estos observables en particular, tenemos que calcular sus valores propios.

Lo haré para el operador $\hat{A}$ y pondré los resultados para los otros dos operadores, ya que el procedimiento es exactamente el miso, que es, además, muy común. Primero debemos construir la ecuación caracter´sitica o secular, haciendo

$$\text{Det}[A - \lambda I] = 0,$$

que nos da

$$\text{Det}\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\right] = (1 - \lambda)\left(\lambda^2 - 1\right) = 0.$$

Esta ecuación tiene tres raíces: 1, 1 y 1, que son los valores propios. Notese que el valor propio 1 tiene multiplicidad 2.

Así que los valores que podemos obtener cuando hagamos una medición de la variable dinámica A será 1 y -1 .

En el caso de la matriz B se obtiene los valores propios $2 + \sqrt{6}$, $2 - \sqrt{6}$, 0 y esos serán los resultados de una medida del observable B.

En el caso de la matriz C se obtiene los valores propios 4, -2, 2 y esos serán los resultados de una medida del observable C.

(b) Which among these observables are compatible? Give a basis of eigenvectors common to these observables.

Para ver cuáles de los operadores son compatibles, debemos calcular sus conmutadores,

$$A\,B - B\,A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & i \\ -1 & -i & 4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & i \\ -1 & -i & 4 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ -1 & -2\,i & 4 \\ 1 & -4 & 2\,i \end{pmatrix},$$

$$A\,C - C\,A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 3 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 3 & 1 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$B\,C - C\,B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & i \\ -1 & -i & 4 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 3 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 3 & 1 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & i \\ -1 & -i & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -3 & 1 \\ 3 & 6\,i & -12 \\ -1 & 12 & -6\,i \end{pmatrix};$$

así que los operadores $\hat{A}$ y $\hat{C}$ son compatibles.

pasamos ahora a calcualr los vectores propios de la matriz A. Tomamos primero el valor propio 1, y debemos resolver la ecuación

$$A\,\vec{v} = \vec{v};$$

es decir,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix}$$

que da el sistema

$$\begin{pmatrix} 0 \\ v_3 - v_2 \\ v_2 - v_3 \end{pmatrix} = 0$$

y que implica que

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} s, \quad s \in \mathbb{R}.$$

Hacemos lo mismo para el otro valor propio, -1,

$$A\,\vec{v} = -\vec{v};$$

es decir,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix}$$

que nos lleva a el sistema

$$\begin{pmatrix} 2\,v_1 \\ v_2 + v_3 \\ v_2 + v_3 \end{pmatrix} = 0$$

y que nos dice que el vector propio es

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} s, \quad s \in \mathbb{R}.$$

$$\text{Eigenvalues}[A] = \{-1,\ 1,\ 1\}$$

$\text{Eigenvalues}[B] = \left\{2 + \sqrt{6}\,,\ 2 - \sqrt{6}\,,\ 0\right\}$

$\text{Eigenvalues}[C] = \{4,\ -2,\ 2\}$

$$\text{Eigenvectors}\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\right] = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{Eigenvectors}\left[\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 3 & 1 \end{pmatrix}\right] = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Exercise 3.25
Consider a particle of mass m which moves under the influence of gravity; the particle's Hamiltonian is $\hat{H} = \hat{P}_z^2/(2m) - mg\hat{Z}$, where g is the acceleration due to gravity, $g = 9.8\,\mathrm{m\,s^{-2}}$.
(a) Calculate $d\langle\hat{Z}\rangle/dt$, $d\langle\hat{P}_z\rangle/dt$, $d\langle\hat{H}\rangle/dt$.
(b) Solve the equation $d\langle\hat{Z}\rangle/dt$ and obtain $\langle\hat{Z}\rangle(t)$, such that $\langle\hat{Z}\rangle(0) = h$ and $\langle\hat{P}_z\rangle(0) = 0$. Compare the result with the classical relation $z(t) = -\frac{1}{2}gt^2 + h$.

Solución:

A partir de la ecuación de Schrödinger es posible demostrar que los valores medios evolucionan según la siguiente

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{A}, \hat{H}\right]\right\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle$$

(a) Calculate $d\langle\hat{Z}\rangle/dt$, $d\langle\hat{P}_z\rangle/dt$, $d\langle\hat{H}\rangle/dt$.

Por lo tanto,

$$\frac{d\langle\hat{z}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{z}, \hat{H}\right]\right\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{z}}{\partial t}\right\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{z}, \hat{H}\right]\right\rangle,$$

pero

$$\left[\hat{z}, \hat{H}\right] = \left[z, \frac{\hat{p}_z^2}{2m} - m\,g\,z\right] = \frac{1}{2m}\left[z, \hat{p}_z^2\right] = \frac{1}{2m}\hat{p}_z[z, \hat{p}_z] + \frac{1}{2m}[z, \hat{p}_z]\,\hat{p}_z = \frac{1}{2m}\hat{p}_z\, i\hbar + \frac{1}{2m} i\hbar\,\hat{p}_z = i\,\frac{\hbar}{m}\,\hat{p}_z$$

así que

$$\frac{d\langle\hat{z}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left\langle i\,\frac{\hbar}{m}\,\hat{p}_z\right\rangle = \frac{1}{m}\langle\hat{p}_z\rangle$$

En el caso del momento lineal, tenemos

$$\frac{d\langle\hat{p}_z\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{p}_z, \hat{H}\right]\right\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{p}_z}{\partial t}\right\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{p}_z, \hat{H}\right]\right\rangle.$$

Calculamos ahora el conmutador

$$\left[\hat{p}_z, \hat{H}\right] = \left[\hat{p}_z, \frac{\hat{p}_z^2}{2m} - m\,g\,z\right] = -m\,g\,[\hat{p}_z,\; z] = i\,\hbar\,m\,g.$$

Y la ecuación queda

$$\frac{d\langle\hat{p}_z\rangle}{dt} = m\,g$$

Para el caso de $\langle\hat{H}\rangle$,

$$\frac{d\langle\hat{H}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{H}, \hat{H}\right]\right\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}\right\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{H}, \hat{H}\right]\right\rangle = 0.$$

(b) Solve the equation $d\langle\hat{Z}\rangle/dt$ and obtain $\langle\hat{Z}\rangle(t)$, such that $\langle\hat{Z}\rangle(0) = h$ and $\langle\hat{P}_z\rangle(0) = 0$. Compare the result with the classical relation $z(t) = -\frac{1}{2}gt^2 + h$.

Resolvemos primero la ecuación $\frac{d\langle\hat{p}_z\rangle}{dt} = m\,g$. Es obvio que la solución es

$$\langle\hat{p}_z\rangle(t) = p_0 + m\,g\,t,$$

y como el problema establece que $\langle\hat{p}_z\rangle(0) = 0$, la solución particular es

$$\langle\hat{p}_z\rangle(t) = m\,g\,t.$$

Ahora usamos que $\frac{d\langle\hat{z}\rangle}{dt} = \frac{1}{m}\langle\hat{p}_z\rangle$ y que $\langle\hat{p}_z\rangle(t) = m\,g\,t$ para llegar a que

$$\frac{d\langle\hat{z}\rangle}{dt} = g\,t$$

cuya solución es

$$\langle\hat{z}\rangle(t) = z_0 + \frac{1}{2}g\,t^2.$$

Como está establecido que $\langle\hat{z}\rangle(0) = h$,

$$\langle\hat{z}\rangle(t) = h + \frac{1}{2}g\,t^2$$

El enunciado del problema en el libro pide que se compare este resultado con el resultado clásico $z(t) = h - \frac{1}{2}g\,t^2$. Sin embargo, el resultado clásico en el libro está mal escrito, ya que segun el planteamiento del problema el potencial es $V(z) = -m\,g\,z$; es decir, la fuerza clásica es $F = m\,g$ y la segunda ley de Newton se escribe $m\,\frac{d^2z}{dt^2} = m\,g$, cuya solución es $z(t) = z_0 + v_0\,t + \frac{1}{2}g\,t^2$; y tomando en cuenta las condiciones iniciales $z(t) = h + \frac{1}{2}g\,t^2$. Todo tiene que ver con la dirección en que se toma positivo el eje Z; el autor del libro pensó que estaba tomando la dirección positiva hacía arriba, cuando en realidad la estaba tomando al revés.

Concluimos que el valor medio de $\hat{z}$ y la variable clásica z se comportan de la misma forma.