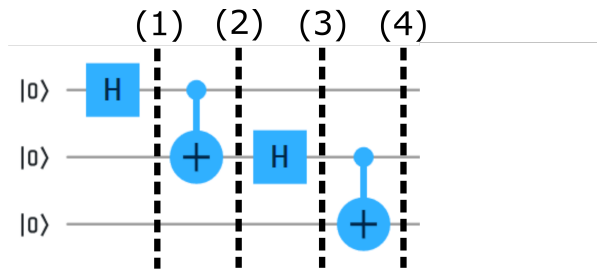


Tehtävä 1

a) Lasketaan kuvassa 1 esitetyn piirin tuottamat tilat eri kohdissa 1, 2, 3 ja 4. Piirin alkutila on $|000\rangle$. (1p)



Kuva 1: Tehtävä 1:n kvanttipiiri.

$$|\psi_1\rangle = (H \otimes I \otimes I)|000\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |100\rangle) \quad (1p)$$

$$|\psi_2\rangle = (\text{CNOT} \otimes I) \frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |100\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |110\rangle) \quad (1p)$$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |010\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}}(|100\rangle - |110\rangle) \right) = \frac{1}{2} (|000\rangle + |010\rangle + |100\rangle - |110\rangle) \quad (1p)$$

$$|\psi_4\rangle = (I \otimes \text{CNOT}) \frac{1}{2} (|000\rangle + |010\rangle + |100\rangle - |110\rangle) = \frac{1}{2} (|000\rangle + |011\rangle + |100\rangle - |111\rangle) \quad (1p)$$

Kubittien lopputila on $|\psi_4\rangle$. (1p)

b) Kun ensimmäisen kubitin arvo mitataan, romahtaa kvanttitalan superpositio mittaustulosta vastaavaan tilaan. (1p) Jos ensimmäisen kubitin arvoksi mitataan 0, niin kubittien tilaksi saadaan ne superposition haarat, jotka ovat yhteensopivat mittaustuloksen kanssa:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|000\rangle + |011\rangle) = |0\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle) . \quad (1p)$$

Toisen ja kolmannen kubitin tilaksi saadaan siis $\frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle) = |\text{Bell}\rangle$ eli nk. Bellin tila. (1p) Bellin tila on kietoutunut, sillä sitä ei voida esittää yksikubittitilojen tulona $|\phi_1\rangle|\phi_2\rangle$, kuten luennoilla on todettu. (1p)

Jos ensimmäisen kubitin arvoksi mitataan 1, niin kubittien tilaksi tässä tapauksessa tulee

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|100\rangle + |111\rangle) = |1\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle - |11\rangle) ,$$

joten toisen ja kolmannen kubitin tilaksi tulee $\frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle - |11\rangle)$. (1p) Tämä on myös kietoutunut tila, mikä voidaan osoittaa esimerkiksi yrittämällä kirjoittaa se tulotilana. Kahden yksikubittitilan $|\phi_k\rangle = c_{k0}|0\rangle + c_{k1}|1\rangle$, $k = 1,2$, tulolle saadaan

$$|\phi_1\rangle|\phi_2\rangle = c_{10}c_{20}|00\rangle + c_{10}c_{21}|01\rangle + c_{11}c_{20}|10\rangle + c_{11}c_{21}|11\rangle .$$

Jotta tästä saataisiin tila $\frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle - |11\rangle)$ täytyisi kantavektoreiden kertoimien olla samat, joten saadaan yhtälöt

$$c_{10}c_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_{10}c_{21} = 0, \quad c_{11}c_{20} = 0, \quad c_{11}c_{21} = -\frac{1}{\sqrt{2}} .$$

Näihin ei löydy ratkaisua, sillä esimerkiksi $c_{10}c_{21} = 0$ vaatii, että joko $c_{10} = 0$ tai $c_{21} = 0$, mutta ensimmäisessä tapauksessa $c_{10} = 0$ ensimmäinen yhtälö ei voi toteutua, ja toisessa tapauksessa $c_{21} = 0$ viimeinen yhtälö ei voi toteutua. Tilaa $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle)$ ei siis voi esittää tulotilana. (1p) Oltaisiin myös vaihtoehtoisesti voitu näyttää, että kubittien arvot ovat korreloituneet esim. näyttämällä, että niiden odotusarvojen tulo ($= 1/4$) on erisuuri kuin niiden tulon odotusarvo ($= 1/2$).

Tehtävä 2

a) Todennäköisyys saadaan integroimalla aaltofunktion itseisarvon neliötä välin $[0, L']$ yli: (1p)

$$\begin{aligned} \int_0^{L'} |\varphi(x)|^2 dx &= \frac{30}{L^5} \int_0^{L'} x^2(L-x)^2 dx & (1p) \\ &= 10 \left(\frac{L'}{L}\right)^3 - 15 \left(\frac{L'}{L}\right)^4 + 6 \left(\frac{L'}{L}\right)^5. & (2p) \end{aligned}$$

b) Mittauksen tulokseksi voidaan saada joku systeemin Hamiltonin operaattorin ominaisarvoista (1p), jotka äärettömän potentiaalikaivon tapauksessa ovat muotoa $E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$, missä n on positiivinen kokonaisluku (1p). Havaitsemistodennäköisyys saadaan tilojen sisätulon itseisarvon neliönä. (1p) Energian ominaistilojen aaltofunktiot ovat muotoa $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right)$, missä $n = \pm 1, \pm 2, \dots$, joten sisätuloksi saadaan

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \varphi \rangle &= \int_0^L \overline{\psi_n(x)} \varphi(x) dx & (1p) \\ &= \sqrt{\frac{60}{L^6}} \int_0^L x(L-x) \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) dx & (1p) \\ &= \sqrt{\frac{60}{L^6}} \left[L \int_0^L x \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) dx - \int_0^L x^2 \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) dx \right]. \end{aligned}$$

Sulkujen sisällä olevat integraalit voidaan laskea esim. paloittain integroimalla, käyttämällä integrointikaavoja tai tietokoneella. Tulokseksi saadaan

$$\begin{aligned} \int_0^L x \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) dx &= -\frac{L^2}{\pi} \frac{(-1)^n}{n} \\ \int_0^L x^2 \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) dx &= -\frac{L^3}{\pi} \frac{(-1)^n}{n} - 2 \left(\frac{L}{\pi n}\right)^3 (1 - (-1)^n). \end{aligned}$$

Näiden yksinkertaistamiseksi on käytetty hyväksi relaatiota $\cos(\pi n) = (-1)^n$. Sijoittamalla nämä yllä olevaan sisätulon lausekkeeseen saadaan

$$\langle \psi_n | \varphi \rangle = \sqrt{\frac{60}{L^6}} \cdot 2 \left(\frac{L}{\pi n}\right)^3 (1 - (-1)^n) = \frac{4\sqrt{15}}{\pi^3 n^3} (1 - (-1)^n) = \begin{cases} \frac{8\sqrt{15}}{\pi^3 n^3} & \text{kun } |n| \text{ on pariton,} \\ 0 & \text{kun } |n| \text{ on parillinen.} \end{cases} \quad (2p)$$

Todennäköisyys havaita hiukkasen kokonaisenergiaksi $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$ on siten

$$|\langle \psi_n | \varphi \rangle|^2 = \begin{cases} \left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3 n^3}\right)^2 & \text{kun } n \text{ on pariton,} \\ 0 & \text{kun } n \text{ on parillinen.} \end{cases} \quad (1p)$$

Tehtävä 3

HUOM: Saadut pisteet pyöristetään ylöspäin lähimpään kokonaislukuun.

a) Merkitään eri x -akselin välejä seuraavasti:

- Alue I: $x \leq 0$, missä $U(x) = \infty$.

- Alue II: $0 < x < L_1$, missä $U(x) = 0$.
- Alue III: $L_1 \leq x < L_2$, missä $U(x) = U$.
- Alue IV: $x \geq L_2$, missä $U(x) = \infty$.

Energian ominaistilojen aaltofunktiot saavat seuraavanlaiset muodot eri alueissa:

- Alue I: $\psi_I(x) = 0$, sillä potentiaali on ääretön. (0,5p)
- Alue II: $\psi_{II}(x) = c_+ e^{ipx/\hbar} + c_- e^{-ipx/\hbar}$, missä $p = \sqrt{2mE}$. (0,5p)
- Alue III: $\psi_{III}(x) = d_+ e^{\alpha x} + d_- e^{-\alpha x}$, missä $\alpha = \sqrt{2m(U - E)}/\hbar$. (0,5p)
- Alue IV: $\psi_{IV}(x) = 0$, sillä potentiaali on ääretön. (0,5p)

Aaltofunktiolle saadaan seuraavat jatkuvuusehdot alueiden rajoilla:

- Raja I-II: Aaltofunktion jatkuvuus: $\psi_{II}(0) = c_+ + c_- = 0$. (0,5p)
- Raja II-III: Aaltofunktion jatkuvuus: $\psi_{II}(L_1) = \psi_{III}(L_1)$

$$\Rightarrow c_+ e^{ipL_1/\hbar} + c_- e^{-ipL_1/\hbar} = d_+ e^{\alpha L_1} + d_- e^{-\alpha L_1}. \quad (0,5p)$$

Aaltofunktion derivaatan jatkuvuus: $\frac{d\psi_{II}}{dx}(L_1) = \frac{d\psi_{III}}{dx}(L_1)$

$$\begin{aligned} \Rightarrow c_+ \left(i \frac{p}{\hbar} \right) e^{ipL_1/\hbar} + c_- \left(-i \frac{p}{\hbar} \right) e^{-ipL_1/\hbar} &= d_+ \alpha e^{\alpha L_1} + d_- (-\alpha) e^{-\alpha L_1} \\ \left(i \frac{p}{\hbar} \right) \left(c_+ e^{ipL_1/\hbar} - c_- e^{-ipL_1/\hbar} \right) &= \alpha (d_+ e^{\alpha L_1} - d_- e^{-\alpha L_1}). \end{aligned} \quad (0,5p)$$

- Raja III-IV: Aaltofunktion jatkuvuus: $\psi_{III}(L_2) = 0$

$$d_+ e^{\alpha L_2} + d_- e^{-\alpha L_2} = 0. \quad (0,5p)$$

Jatkuvuusehdosta I-II saadaan ratkaistua $c_- = -c_+$ ja jatkuvuusehdosta III-IV $d_- = -d_+ e^{2\alpha L_2}$. Sijoittamalla nämä rajan II-III aaltofunktion jatkuvuusehtoon saadaan

$$\begin{aligned} c_+ \left(e^{ipL_1/\hbar} - e^{-ipL_1/\hbar} \right) &= d_+ \left(e^{\alpha L_1} - e^{-\alpha(L_1 - 2L_2)} \right) \\ 2ic_+ \sin(pL_1/\hbar) &= d_+ \left(e^{\alpha L_1} - e^{-\alpha(L_1 - 2L_2)} \right). \end{aligned}$$

Toisaalta sijoittamalla $c_- = -c_+$ ja $d_- = -d_+ e^{2\alpha L_2}$ rajan II-III aaltofunktion derivaatan jatkuvuusehtoon saadaan

$$\begin{aligned} \left(i \frac{p}{\hbar} \right) c_+ \left(e^{ipL_1/\hbar} + e^{-ipL_1/\hbar} \right) &= \alpha d_+ \left(e^{\alpha L_1} + e^{-\alpha(L_1 - 2L_2)} \right) \\ 2ic_+ \frac{p}{\hbar} \cos(pL_1/\hbar) &= \alpha d_+ \left(e^{\alpha L_1} + e^{-\alpha(L_1 - 2L_2)} \right). \end{aligned}$$

Jakamalla saadut yhtälö puolittain saadaan

$$\begin{aligned} \frac{p \cos(pL_1/\hbar)}{\hbar \sin(pL_1/\hbar)} &= \alpha \frac{e^{\alpha L_1} + e^{-\alpha(L_1 - 2L_2)}}{e^{\alpha L_1} - e^{-\alpha(L_1 - 2L_2)}} = \alpha \frac{e^{\alpha(L_1 - L_2)} + e^{-\alpha(L_1 - L_2)}}{e^{\alpha(L_1 - L_2)} - e^{-\alpha(L_1 - L_2)}} \\ \frac{p}{\hbar \alpha} &= \frac{\sin(pL_1/\hbar) e^{\alpha(L_1 - L_2)} + e^{-\alpha(L_1 - L_2)}}{\cos(pL_1/\hbar) e^{\alpha(L_1 - L_2)} - e^{-\alpha(L_1 - L_2)}} = \frac{\tan(pL_1/\hbar)}{\tanh(\alpha(L_1 - L_2))}. \end{aligned} \quad (1p)$$

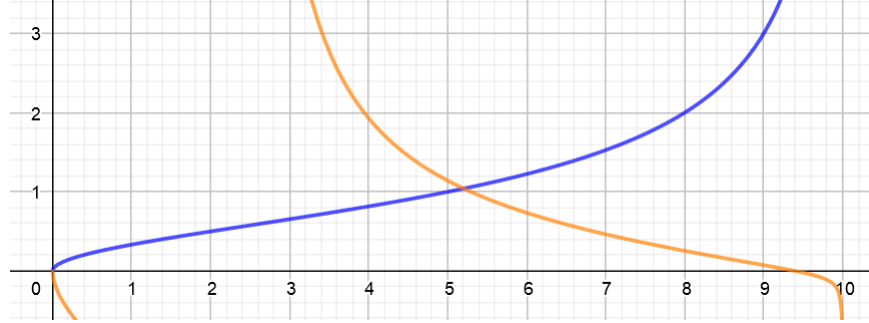
Sijoittamalla $p = \sqrt{2mE}$ ja $\alpha = \sqrt{2m(U - E)}/\hbar$ saadaan energian kvantisointiehdoksi

$$\sqrt{\frac{E}{U - E}} = \frac{\tan(\sqrt{2mE}L_1/\hbar)}{\tanh(\sqrt{2m(U - E)}(L_1 - L_2)/\hbar)}. \quad (1p)$$

b) Elektronin energian ominaisarvot voidaan ratkaista esim. graafisesti piirtämällä kuvaajat kvantisointiehdon eri puolille, ja etsimällä niiden leikkauskohdat. (1p) (Voidaan myös ratkaista yhtälö numeerisesti esim. MATLABilla.) Kuvassa 2 on esitetty kuvaajat vakioiden arvoilla $U = 10$ eV, $L_1 = 2$ Å ja $L_2 = 5$ Å. (1p) Energian yksikkönä vaaka-akselilla on käytetty elektronivoltia. Sininen kuvaaja vastaa yhtälön vasemman puolen funktiota $\sqrt{E}/(10 \text{ eV} - E)$, ja oranssi kuvaaja oikean puolen funktiota $\tan(2a\sqrt{E})/\tanh(-3a\sqrt{10 \text{ eV} - E})$, missä numeerinen vakio

$$a = \sqrt{2m_e \cdot 1,609 \cdot 10^{-19} \text{ J/eV} \cdot 10^{-10} \text{ m}/\hbar} \approx 0,5123 \text{ eV}^{-\frac{1}{2}}.$$

Nähdään, että elektronin perustilan energia $E_0 \approx 5,20$ eV, ja tämä on ainoa elektronin tila, jonka energia on alle 10 eV. (1p)



Kuva 2: Elektronin energian ominaisarvojen graafinen ratkaisu, kun $E < U$.

Ensimmäisen viritetyn tilan energian ratkaisemiseksi täytyy selvittää kvantisointiehto myös tiloille, joiden energialle pätee $E > U$. (1p) Tämä saadaan johdettua helposti edellisestä kvantisointiehdosta, kun huomataan, että tässä tapauksessa $\sqrt{U - E} = i\sqrt{E - U}$, ja siten

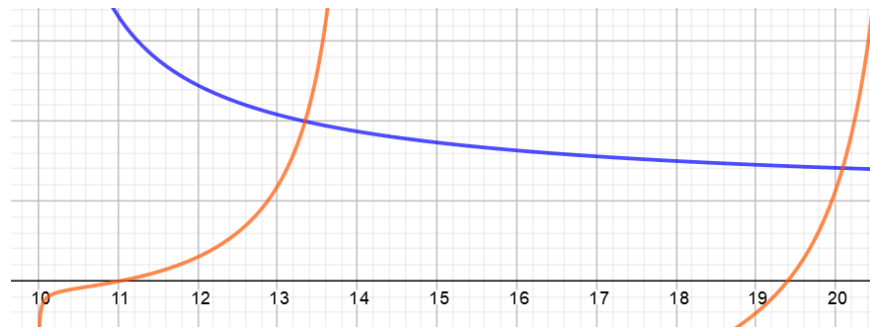
$$\alpha = \sqrt{2m(U - E)}/\hbar = i\sqrt{2m(E - U)}/\hbar = ip'/\hbar,$$

missä p' on elektronin liikemäärä alueessa III. Kvantisointiehdon johtaminen jatkuvuusehdoista etenisi tässäkin tapauksessa aivan samoin kuin edellisessä, joten voidaan käyttää suoraan edellistä kvantisointiehtoa. Sijoittamalla $\sqrt{U - E} = i\sqrt{E - U}$ edelliseen kvantisointiehtoon, ja käyttämällä relaatiota $\tanh(ix) = i \tan(x)$ saadaan kvantisointiehdoksi, kun $E > U$,

$$\sqrt{\frac{E}{E - U}} = \frac{\tan(\sqrt{2mEL_1}/\hbar)}{\tan(\sqrt{2m(E - U)}(L_1 - L_2)/\hbar)}.$$

Vastaavasti kuin yllä, voidaan tässäkin tapauksessa piirtää kuvaajat kvantisointiehdon molempien puolien funktioille, ja ratkaista energian ominaisarvot graafisesti (kuva 3). Ensimmäisen viritetyn tilan energiaksi saadaan $E_1 \approx 13,34$ eV.

Jotta sähkömagneettinen säteily voisi siirtää elektronin perustilalta ensimmäiselle viritetylle tilalle, täytyy sen fotoneilla olla elektronin energiatilojen energioiden erotusta vastaava määrä energiaa (1p), eli $\Delta E = E_1 - E_0 \approx 13,34 - 5,20 = 8,14$ eV. Tätä vastaava SM-säteilyn aallonpituus on $\lambda = \frac{hc}{\Delta E} \approx 150$ nm. (1p)



Kuva 3: Elektronin energian ominaisarvojen graafinen ratkaisu, kun $E > U$.