ELEC-C3220 Kvantti-ilmiöt, kevät 22 **Välikoe 1, malliratkaisut**
opettaja: Matti Raasakka

Tehtävä 1

Tarkastellaan kvanttihiukkasta yhdessä ulottuvuudessa. Hiukkasen tilaa kuvaa aaltofunktio

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ne^{ax} & \text{kun } x < 0\,, \\ Ne^{-2ax} & \text{kun } 0 \leq x\,. \end{cases}$$

missä $a > 0$ on vakio. N on aaltofunktion normalisointivakio.

a) Selvitä normalisointivakion N arvo vakion a avulla lausuttuna. (2p)
b) Laske hiukkasen liikemäärän odotusarvo ja varianssi. (4p)

Malliratkaisu:

a) Normalisointivakion N arvo voidaan selvittää aaltofunktion normalisaatioehdosta $\int_{\mathbb{R}} |\varphi(x)|^2 \mathrm{d}x = 1$. (1p) Saadaan

$$\begin{aligned} 1 &= N^2 \int_{-\infty}^{0} e^{2ax}\, \mathrm{d}x + N^2 \int_{0}^{\infty} e^{-4ax}\, \mathrm{d}x \\ &= N^2 \frac{1}{2a}(1-0) + N^2 \frac{1}{-4a}(0-1) \\ &= N^2 \left(\frac{1}{2a} + \frac{1}{4a} \right) = N^2 \frac{3}{4a} \\ \Rightarrow \quad N &= \sqrt{\frac{4a}{3}}\,. \quad \text{(1p)} \end{aligned}$$

b) Liikemääräoperaattori hiukkasen aaltofunktiolle yhdessä ulottuvuudessa on $\hat{p} = -i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$. (1p) Odotusarvo voidaan laskea seuraavasti:

$$\begin{aligned} \langle p \rangle_\varphi &= \langle \varphi | \hat{p} | \varphi \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}} \overline{\varphi(x)} (-i\hbar) \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}(x)\, \mathrm{d}x \\ &= -i\hbar N^2 \int_{-\infty}^{0} e^{ax} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} e^{ax}\, \mathrm{d}x - i\hbar N^2 \int_{0}^{\infty} e^{-2ax} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} e^{-2ax}\, \mathrm{d}x \\ &= -i\hbar N^2 a \int_{-\infty}^{0} e^{2ax}\, \mathrm{d}x - i\hbar N^2 (-2a) \int_{0}^{\infty} e^{-4ax}\, \mathrm{d}x \\ &= -i\hbar N^2 a \frac{1}{2a} - i\hbar N^2 (-2a) \frac{1}{4a} = 0\,. \quad \text{(1p)} \end{aligned}$$

Varianssi $\Delta p^2 = \langle p^2\rangle_\varphi - \langle p\rangle_\varphi^2$ tilassa φ. (1p) Liikemäärän odotusarvo $\langle p\rangle_\varphi = 0$, joten

$$\begin{aligned}
\Delta p^2 = \langle p^2\rangle_\varphi &= \langle \varphi|\hat{p}^2|\varphi\rangle \\
&= \int_{\mathbb{R}} \overline{\varphi(x)}(-i\hbar)^2 \frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2}(x)\ \mathrm{d}x \\
&= -\hbar^2 N^2 \int_{-\infty}^{0} e^{ax} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} e^{ax}\ \mathrm{d}x - \hbar^2 N^2 \int_0^\infty e^{-2ax}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} e^{-2ax}\ \mathrm{d}x \\
&= -\hbar^2 N^2 a^2 \int_{-\infty}^{0} e^{2ax}\ \mathrm{d}x - \hbar^2 N^2 (-2a)^2 \int_0^\infty e^{-4ax}\ \mathrm{d}x \\
&= -\hbar^2 N^2 a^2 \frac{1}{2a} - \hbar^2 N^2 (4a^2)\frac{1}{4a} \\
&= -\hbar^2 N^2 a^2 \left(\frac{1}{2a} + \frac{1}{a}\right) \\
&= -\frac{3}{2}\hbar^2 N^2 a \\
&= -\frac{3}{2}\hbar^2 \frac{4a}{3} a = -2\hbar^2 a^2 . \quad (1\text{p})
\end{aligned}$$

HUOM: Tulos ei vaikuta fysikaalisesti järkevältä, koska sen mukaan liikemäärän neliön odotusarvo olisi negatiivinen. Tässä kohti voidaan muistaa, että eksponentiaalisesti pienenevä aaltofunktio vastaa fysikaalisesti tilannetta, jossa hiukkanen on energeettisesti kielletyssä alueessa, eli sen 'liike-energia' $E_k = E - U$ on negatiivinen, ja siten liikemäärän neliö $p^2 = E_k/2m$ on myös periaatteessa negatiivinen. Tällaista aaltofunktiota ei kuitenkaan ole käytännössä mahdollista toteuttaa, koska se tosiaan vaatisi hiukkasella olevan kaikkialla negatiivisen liike-energian, mikä ei ole fysikaalisesti mahdollista.

Tehtävä 2

Tarkastellaan kvanttihiukkasta (massa m), joka saapuu negatiivisen x-akselin suunnasta potentiaaliin

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{kun } x < 0, \\ U_1 & \text{kun } 0 \le x < L, \\ U_2 & \text{kun } x \ge L, \end{cases}$$

missä U_1 ja U_2 ovat vakioita, jotka toteuttavat $0 < U_2 < U_1$.

a) Mitkä ovat hiukkasen kokonaisenergian E mahdolliset arvot tässä tilanteessa? (1p)
b) Millä kokonaisenergian E arvoilla hiukkanen voi liikkua mielivaltaisen kauas positiivisen x-akselin suuntaan? (1p)
c) Muodosta hiukkasen kokonaisenergian ominaistilan aaltofunktion jatkuvuusehdot kohdissa $x = 0$ ja $x = L$, kun hiukkasen kokonaisenergialle E pätee $U_2 < E < U_1$. (4p)

Malliratkaisu:

a) Hiukkasen kokonaisenergia voi saada minkä tahansa epänegatiivisen arvon $E \ge 0$, sillä potentiaalivallin vasemmalla puolella hiukkanen on vapaa, ja sillä on vain liike-energiaa. (1p)

b) Hiukkanen voi liikkua mielivaltaisen pitkälle positiivisen x-akselin suuntaan (mahdollisesti tunneloitumalla potentiaalivallin läpi), kun sen kokonaisenergia $E > U_2$. (1p)

c) Merkitään eri alueita seuraavasti:

- Alue I: $x < 0$

- Alue II: $0 \leq x < L$
- Alue III: $x \geq L$

Eri alueissa stationäärisen Schrödingerin yhtälön ratkaisut ovat (0,5p/kohta)

- Alue I: $\phi_I = a_+ e^{ikx} + a_- e^{-ikx}$
- Alue II: $\phi_{II} = b_+ e^{\alpha x} + b_- e^{-\alpha x}$
- Alue III: $\phi_{III} = c_+ e^{ik' x}$.

Tässä $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ ja $k' = \sqrt{2m(E - U_2)}/\hbar$ ovat hiukkasen aaltofunktion aaltoluvut alueissa I ja III, ja $\alpha = \sqrt{2m(U_1 - E)}/\hbar$ on tunkeutumissyvyyden käänteisluku alueessa II. (0,5p) Alueessa III ei ole negatiivisen aaltoluvun/liikemäärän komponenttia, sillä hiukkanen saapuu valliin vasemmalta käsin.

Alueiden rajakohdissa $x = 0$ ja $x = L$ vaaditaan aaltofunktion ja sen ensimmäisen derivaatan jatkuvuus.

- Alueiden I ja II rajakohta, $x = 0$: (0,5p/kohta)
  - Aaltofunktion jatkuvuus:
$$\begin{aligned} \phi_I(0) &= \phi_{II}(0) \\ a_+ + a_- &= b_+ + b_- \end{aligned}$$
  - Aaltofunktion derivaatan jatkuvuus:
$$\begin{aligned} \phi_I'(0) &= \phi_{II}'(0) \\ ik(a_+ - a_-) &= \alpha(b_+ - b_-) \end{aligned}$$
- Alueiden II ja IIi rajakohta, $x = L$: (0,5p/kohta)
  - Aaltofunktion jatkuvuus:
$$\begin{aligned} \phi_{II}(L) &= \phi_{III}(L) \\ b_+ e^{\alpha L} + b_- e^{-\alpha L} &= c_+ e^{ik' L} \end{aligned}$$
  - Aaltofunktion derivaatan jatkuvuus:
$$\begin{aligned} \phi_{II}(L) &= \phi_{III}(L) \\ \alpha(b_+ e^{\alpha L} - b_- e^{-\alpha L}) &= ik' c_+ e^{ik' L} \end{aligned}$$

Tehtävä 3

Tarkastellaan kahden keskenään vuorovaikuttavan kubitin systeemiä. Ajanhetkellä $t = 0$ kubitit ovat tilassa $|00\rangle$. Systeemin Hamiltonin operaattori on $H = \epsilon \sigma_x \otimes \sigma_x$, missä

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

ja $\epsilon > 0$ on jokin vakioenergia.

a) Ratkaise systeemin tila millä tahansa myöhemmällä ajanhetkellä t. (4p)
b) Millä ajanhetkillä kubitit ovat kietoutuneet keskenään? Perustele. (2p)

Malliratkaisu

a) Matriisi σ_x kuvaa kantatilan $|0\rangle = (1\ 0)^T$ kantatilaksi $|1\rangle = (0\ 1)^T$ ja toisin päin. Niinpä matriisin σ_x normalisoidut ominaisvektorit ovat

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)\,, \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)\,,$$

joille pätee $\sigma_x|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle$. Hamiltonin operaattorin $H = \epsilon\sigma_x \otimes \sigma_x$ ominaistilat ovat siten $|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle$, (1p) ja näitä vastaavat ominaisarvot $\epsilon, -\epsilon, -\epsilon, \epsilon$ (tässä järjestyksessä) (1p), sillä esimerkiksi

$$\begin{aligned} H|+-\rangle &= \epsilon(\sigma_x \otimes \sigma_x)(|+\rangle \otimes |-\rangle) \\ &= \epsilon\sigma_x|+\rangle \otimes \sigma_x|-\rangle \\ &= \epsilon|+\rangle \otimes (-|-\rangle) \\ &= -\epsilon|+-\rangle\,. \quad \text{(1p)} \end{aligned}$$

Kubittien tila ajanhetkellä t voidaan siis esittää energian ominaistilojen avulla muodossa

$$\begin{aligned} |\Phi(t)\rangle = &\langle ++|00\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t}|++\rangle + \langle +-|00\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(-\epsilon)t}|+-\rangle \\ &+ \langle -+|00\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(-\epsilon)t}|-+\rangle + \langle --|00\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t}|--\rangle\,. \quad \text{(1p)} \end{aligned}$$

Sisätuloiksi saadaan

$$\langle \pm\pm|00\rangle = \langle \pm|0\rangle\langle \pm|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2}$$

kaikille $+,-$ yhdistelmille. Esittämällä tilat $|\pm\rangle$ kannassa $|0\rangle, |1\rangle$ saadaan tilalle ajanhetkellä t

$$\begin{aligned} |\Phi(t)\rangle &= \frac{1}{2}\left[e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t}|++\rangle + e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon t}|+-\rangle + e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon t}|-+\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t}|--\rangle\right] \\ &= \frac{1}{2}\Big[e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t}\frac{1}{2}\left(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle\right) \\ &\qquad + e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon t}\frac{1}{2}\left(|00\rangle - |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle\right) \\ &\qquad + e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon t}\frac{1}{2}\left(|00\rangle + |01\rangle - |10\rangle - |11\rangle\right) \\ &\qquad + e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t}\frac{1}{2}\left(|00\rangle - |01\rangle - |10\rangle + |11\rangle\right)\Big] \\ &= \frac{1}{2}\Big[(e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t} + e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon t})|00\rangle + (e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t} - e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon t})|11\rangle\Big] \\ &= \cos(\epsilon t/\hbar)|00\rangle - i\sin(\epsilon t/\hbar)|11\rangle\,. \quad \text{(1p)} \end{aligned}$$

b) Kubitit ovat kietoutuneet, kun niiden tilaa ei voida esittää yksittäisten kubittien tilojen tensoritulona. (1p) Yllä olevasta lausekkeesta tilalle nähdään, että tila on tulotila $|00\rangle$ tai $-i|11\rangle$, kun $\epsilon t/\hbar = \frac{\pi}{2}n$, missä n on mielivaltainen kokonaisluku, koska tällöin jompi kumpi kertoimista menee nolliin. Tämä tapahtuu siis ajanhetkillä $t = \frac{\pi\hbar}{2\epsilon}n$. Muilla ajanhetkillä molemmat kertoimet $\cos(\epsilon t/\hbar)$ ja $-i\sin(\epsilon t/\hbar)$ eroavat nollasta, joten tila on kantatilojen $|00\rangle$ ja $|11\rangle$ superpositio. Tällaisessa tilassa kubitit ovat kietoutuneet keskenään: Kahden kubitin tulotilassa

$$\begin{aligned} |\phi\rangle|\psi\rangle &= (\phi_0|0\rangle + \phi_1|1\rangle)(\psi_0|0\rangle + \psi_1|1\rangle) \\ &= \phi_0\psi_0|00\rangle + \phi_0\psi_1|01\rangle + \phi_1\psi_0|10\rangle + \phi_1\psi_1|11\rangle \end{aligned}$$

kaikkien kertoimien ϕ_0,ϕ_1,ψ_0,ψ_1 täytyisi erota nollasta, jotta molemmat termit $|00\rangle, |11\rangle$ esiintyisivät superpositiossa, mutta tällöin myös ristitermien $|01\rangle, |10\rangle$ kertoimet ovat erisuuret kuin nolla. Kubitit ovat siis kietoutuneet, kun $t \neq \frac{\pi\hbar}{2\epsilon}n$. (1p)