Norges teknisk-naturvitenskapelige universitet
Institutt for fysikk

Faglig kontakt under eksamen:
Navn: Jan Myrheim
Telefon: 73 59 36 53, mobil 90 07 51 72

Eksamen i fag TFY4205 Kvantemekanikk II
Torsdag 8. desember 2011
Tid: 9.00–13.00

Sensurfrist: Torsdag 29. desember 2011

Tillatte hjelpemidler: Kalkulator, matematiske og fysiske tabeller.

En tabell over fysiske konstanter finnes sist i dette oppgavesettet.
Alle deloppgaver teller likt ved sensuren.

Oppgave 1:

a) Hva er en stasjonær tilstand?

Hvis A er en vilkårlig observabel, og H er Hamilton-operatoren, så er forventningsverdien av kommutatoren $[A, H]$ lik null i en stasjonær tilstand. Hvorfor?

b) La H være Hamilton-operatoren for elektronet i et hydrogenatom,

$$H = T + V = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m_\mathrm{e}} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \ .$$

Her er $T = \vec{p}^{\,2}/(2m_\mathrm{e})$ kinetisk energi, og $V = -e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$ er potensiell energi.

Beregn kommutatoren $[\vec{r}\cdot\vec{p} + \vec{p}\cdot\vec{r}\,,\ H]$.

Bruk resultatet til å bevise virialteoremet for forventningsverdiene til T og V i en stasjonær tilstand til hydrogenatomet:

$$2\,\langle T\rangle + \langle V\rangle = 0\ .$$

Hvis den stasjonære tilstanden har energi E, hva er da $\langle T\rangle$ og $\langle V\rangle$?

c) Bølgefunksjonen for elektronet i grunntilstanden til hydrogenatomet er

$$\psi_0(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\,\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\ ,$$

der a_0 er Bohr-radien (se tabellen på siste side i oppgavesettet). Vi ser bort fra at det er en liten forskjell mellom elektronmassen og den reduserte massen. Vi ser også bort fra at elektronet har spinn.

Anta at atomkjernen i hydrogenatomet plutselig forsvinner, f.eks. ved at den treffes av et høyenergetisk negativt π-meson og omdannes til et nøytron, mens π^- omdannes til π^0. I øyeblikket etterpå er elektronet fremdeles i tilstanden ψ_0, men det som var en bundet stasjonær tilstand for elektronet i atomet, er ikke lenger en stasjonær tilstand, og elektronet beveger seg bort som en fri partikkel.

Bølgefunksjonen for et fritt elektron med kvantisert impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ i et normeringsvolum $\mathcal{V}$ er

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\ .$$

Vi kan for eksempel bruke periodiske randkrav på bølgefunksjonen, de tillatte verdiene for bølgetallsvektoren $\vec{k}$ er da diskrete.

Regn ut sannsynlighetsamplituden $c_{\vec{k}}$ for å finne elektronet i impulsegentilstanden $\psi_{\vec{k}}$ etter at atomkjernen er fjernet.

Kontroller at sannsynligheten er bevart, dvs. at

$$\sum_{\vec{k}} |c_{\vec{k}}|^2 = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3\vec{k}\ |c_{\vec{k}}|^2 = 1\ .$$

Et par integral som kan være nyttige, finnes på siste side.

d) Hva er den gjennomsnittlige energien $\langle E\rangle$ for det frie elektronet i slutt-tilstanden?

Kommentar?

Oppgave 2:

En kvantedatamaskin skal kunne løse noen spesielle oppgaver mer effektivt enn en klassisk datamaskin. Et eksempel er Grovers algoritme for å søke i en usortert database.

Oppgaven kan for eksempel være å søke gjennom telefonkatalogen, der navnene står alfabetisk, for å finne hvem som har et gitt telefonnummer. Hvis katalogen inneholder N navn, og alle har hver sitt telefonnummer, så må en (i følge klassisk fysikk) i gjennomsnitt søke gjennom halve katalogen for å finne det oppgitte nummeret. Den tiden det tar på en klassisk datamaskin er altså proporsjonal med N. Med Grovers algoritme kan kvantedatamaskinen gjøre søket på en tid som er proporsjonal med $\sqrt{N}$.

For å demonstrere algoritmen kan vi ta som eksempel en katalog med 10 navn, A til J, og med telefonnummer 0 til 9, for eksempel A6, B5, C9, D3, E7, F4, G2, H8, I0, J1. Vi spør etter hvem som har telefonnummer 7.

For å representere hele telefonkatalogen i en klassisk datamaskin trenger vi 10 navneregister for å lagre navnene og 10 nummerregister for å lagre numrene. Vi søker gjennom nummerregistrene til vi finner 7, og så kan vi lese av navnet i det tilsvarende navneregistret.

I kvantedatamaskinen representerer vi oppføringene i telefonkatalogen, A6 til J1, med ortonormale tilstandsvektorer $|\mathrm{A6}\rangle$ til $|\mathrm{J1}\rangle$. I tilstanden $|\mathrm{A6}\rangle$, for eksempel, er navneregistret i tilstanden $|\mathrm{A}\rangle$ og nummerregistret i tilstanden $|6\rangle$. Hvis vi da måler navneregistret, vil vi få navnet A som måleresultat, og hvis vi måler nummerregistret, vil vi få nummeret 6 som måleresultat.

I en kvantedatamaskin trenger vi bare ett navneregister og ett nummerregister, fordi vi kan representere hele telefonkatalogen med den superponerte tilstanden

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}}\left(|\mathrm{A6}\rangle + |\mathrm{B5}\rangle + |\mathrm{C9}\rangle + |\mathrm{D3}\rangle + |\mathrm{E7}\rangle + |\mathrm{F4}\rangle + |\mathrm{G2}\rangle + |\mathrm{H8}\rangle + |\mathrm{I0}\rangle + |\mathrm{J1}\rangle\right) . \qquad (1)$$

Hver gang vi preparerer denne tilstanden og måler både navneregistret og nummerregistret, finner vi et navn og det tilsvarende telefonnummeret, for eksempel D og 3 eller H og 8. Vi sier at de to registrene er i en sammenfiltret tilstand (engelsk: entangled state).

a) Den enkleste søkemetoden er å preparere tilstanden $|\phi\rangle$ og måle nummerregistret. Problemet er at sannsynligheten for å finne det ettersøkte nummeret 7 da er ganske liten, og dessuten ødelegger vi den kvantemekaniske tilstanden når vi måler.

Hva er sannsynligheten for å lese ut nummeret 7 i første forsøk?

Hvis vi bruker denne metoden, hvor mange ganger i gjennomsnitt (omtrentlig) må vi gjenta prepareringen og målingen før vi finner det nummeret vi leter etter?

Sammenlign med søk på en klassisk datamaskin.

Grovers algoritme er smartere. Vi forutsetter at vi har en kvanteprosessor (vi kan tenke på den som en ≪svart boks≫ eller et ≪orakel≫) som leser telefonnummeret n fra nummerregistret og avgjør om det er 7 eller ikke. Prosessoren kan beskrives matematisk som en unitær operator U som virker slik at

$$U|n\rangle = \begin{cases} |n\rangle & \text{hvis} \quad n = 7 , \\ -|n\rangle & \text{hvis} \quad n \neq 7 . \end{cases}$$

Videre bruker vi tilstandsvektoren $|\phi\rangle$ definert i ligning (1) til å definere en operator

$$V = I - 2\,|\phi\rangle\langle\phi| ,$$

der I er identitetsoperatoren.

b) Vis at operatoren V er både hermitisk og unitær, dvs. at $V = V^\dagger = V^{-1}$.

Vi forutsetter også at vår kvantedatamaskin inneholder en kvanteprosessor som utfører operasjonen V, det er (i hvert fall teoretisk) mulig fordi V er unitær.

c) Definer

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \frac{1}{3}\left(|\mathrm{A6}\rangle + |\mathrm{B5}\rangle + |\mathrm{C9}\rangle + |\mathrm{D3}\rangle + |\mathrm{F4}\rangle + |\mathrm{G2}\rangle + |\mathrm{H8}\rangle + |\mathrm{I0}\rangle + |\mathrm{J1}\rangle\right) , \\ |\psi_2\rangle &= |\mathrm{E7}\rangle , \end{aligned}$$

slik at $\langle\psi_1|\psi_1\rangle = \langle\psi_2|\psi_2\rangle = 1$, $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$ og

$$|\phi\rangle = \frac{3}{\sqrt{10}}\,|\psi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{10}}\,|\psi_2\rangle = \cos\alpha\,|\psi_1\rangle + \sin\alpha\,|\psi_2\rangle ,$$

der denne ligningen definerer vinkelen α.

Vis at hvis $|\psi\rangle = \cos\beta\,|\psi_1\rangle + \sin\beta\,|\psi_2\rangle$, så er

$$VU\,|\psi\rangle = \cos\gamma\,|\psi_1\rangle + \sin\gamma\,|\psi_2\rangle \qquad \text{med} \qquad \gamma = \beta + 2\alpha .$$

d) Vi så ovenfor at hvis vi måler nummerregisteret i tilstanden $|\phi\rangle$, er sannsynligheten liten for at vi får det ønskede resultatet 7. Spørsmålet er om vi kan preparere en annen tilstand enn $|\phi\rangle$ der sannsynligheten for måleresultatet 7 er større.

Ved hjelp av vår kvantedatamaskin kan vi for eksempel preparere tilstanden $|\phi_1\rangle = VU\,|\phi\rangle$.

Hvis vi måler nummerregisteret i denne tilstanden, hva er da sannsynligheten for måleresultatet 7?

Eller vi kan preparere tilstanden $|\phi_2\rangle = VU\,|\phi_1\rangle = (VU)^2|\phi\rangle$.

Hvis vi måler nummerregisteret i denne tilstanden, hva er da sannsynligheten for måleresultatet 7?

Sannsynligheten er alltid mindre enn 1, men hvis sannsynligheten er nær 1 og vi ikke måler 7 i første forsøk, kan vi bare preparere den samme tilstanden og måle en gang til.

e) Helt generelt, hvis telefonkatalogen inneholder N navn, omtrent hvor mange ganger må vi utføre den unitære operasjonen VU for å oppnå en sannsynlighet nær 1 for å finne det telefonnummeret vi spør etter?

Kommentar?

Noen fysiske konstanter og formler

Lyshastigheten i vakuum:	$c = 299\,792\,458\,\mathrm{m/s}$
Permeabiliteten i vakuum:	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}\,\mathrm{N/A^2}$
Permittiviteten i vakuum:	$\epsilon_0 = 1/(\mu_0 c^2) = 8{,}854 \times 10^{-12}\,\mathrm{F/m}$
Den reduserte Plancks konstant:	$\hbar = h/(2\pi) = 1{,}055 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$
Elementærladningen:	$e = 1{,}602 \times 10^{-19}\,\mathrm{C}$
Finstrukturkonstanten:	$\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) = 1/137{,}036$
Elektronmassen:	$m_\mathrm{e} = 9{,}109 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg} = 0,511\,\mathrm{MeV}/c^2$
Protonmassen:	$m_\mathrm{p} = 1{,}6726 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg} = 938,28\,\mathrm{MeV}/c^2$
Nøytronmassen:	$m_\mathrm{n} = 1{,}6749 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg} = 939,57\,\mathrm{MeV}/c^2$
Atommasseenheten:	$\mathrm{u} = 1{,}660\,54 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg} = 931,46\,\mathrm{MeV}/c^2$
Bohr-radien for hydrogen:	$a_0 = \hbar/(\alpha m_\mathrm{e} c) = 0{,}529\,\text{Å}$

Kanoniske kommutasjonsrelasjoner:

$$[x, p_x] = [y, p_y] = [z, p_z] = \mathrm{i}\hbar\ , \qquad [x, p_y] = [x, p_z] = \cdots = [z, p_y] = 0\ .$$

Grunntilstandsenergien til hydrogenatomet:

$$E_1 = -\frac{\alpha^2 m_\mathrm{e} c^2}{2} = -\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e} a_0^2}\ .$$

Et par nyttige integral:

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\; r^n\,\mathrm{e}^{-\lambda r} = \frac{n!}{\lambda^{n+1}} \qquad \text{for} \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \qquad \text{og} \qquad \mathrm{Re}\,\lambda > 0\ .$$

$$\int_0^\infty \mathrm{d}u\; \frac{u^2}{(1+u^2)^4} = \int_0^\infty \mathrm{d}u\; \frac{u^4}{(1+u^2)^4} = \frac{\pi}{32}\ .$$

The Norwegian University of Science and Technology
Department of Physics

Contact person:
Name: Jan Myrheim
Telephone: 73 59 36 53, mobile 90 07 51 72

Examination, course TFY4205 Quantum Mechanics II
Thursday December 8, 2011
Time: 9.00–13.00

Grades made public: Thursday December 29, 2011

Allowed to use: Calculator, mathematical and physical tables.

A table of physical constants can be found at the end of this problem set.
All subproblems are given the same weight in the grading.

Problem 1:

a) What is a stationary state?

If A is an arbitrary observable, and H is the Hamiltonian operator, then the expectation value of the commutator $[A, H]$ vanishes in a stationary state. Why?

b) Let H be the Hamiltonian of the electron in a hydrogen atom,

$$H = T + V = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m_\mathrm{e}} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \; .$$

Here $T = \vec{p}^{\,2}/(2m_\mathrm{e})$ is kinetic energy, and $V = -e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$ is potential energy.

Compute the commutator $[\vec{r}\cdot\vec{p}+\vec{p}\cdot\vec{r},\, H]$.

Use the result to prove the virial theorem for the expectation values of T and V in a stationary state of the hydrogen atom:

$$2\,\langle T\rangle + \langle V\rangle = 0 \; .$$

If the stationary state has energy E, what are then $\langle T\rangle$ and $\langle V\rangle$?

c) The wave function for the electron in the ground state of the hydrogen atom is

$$\psi_0(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\,\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}} \; ,$$

where a_0 is the Bohr radius (see the table on the last page). We ignore the small difference between the electron mass and the reduced mass. We also ignore the electron spin.

Assume that the nucleus of the hydrogen atom suddenly disappears, e.g. because it is hit by an energetic negative π meson and is transformed into a neutron, while the π^- is transformed into a π^0. Immediately afterwards the electron is still in the state ψ_0, but what was a bound stationary state of the electron in the atom is no longer a stationary state, instead the electron moves away as a free particle.

The wave function of a free electron of quantized momentum $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ in a normalization volume $\mathcal{V}$ is

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}} \; .$$

We may for example impose periodic boundary conditions on the wave function, then the allowed values of the wave number vector $\vec{k}$ are discrete.

Compute the probability amplitude $c_{\vec{k}}$ to find the electron in the momentum eigenstate $\psi_{\vec{k}}$ after the atomic nucleus has been removed.

Check that the probability is conserved, that is,

$$\sum_{\vec{k}} |c_{\vec{k}}|^2 = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}^3\vec{k}\; |c_{\vec{k}}|^2 = 1 \; .$$

Potentially useful integrals can be found on the last page.

d) What is the average energy $\langle E \rangle$ of the free electron in the final state?

Comments?

Problem 2:

A quantum computer is supposed to be capable of solving some special problems more effeciently than a classical computer. An example is Grover's algorithm for searching in an unsorted data base.

The problem may be for example to search through the telephone directory, in which the names are in alphabetical order, to find who owns a given telephone number. If the directory contains N names, everybody having his/her own phone number, then (according to classical physics) one has to search through on the average half the directory in order to find the given number. Thus, the search time on a classical computer is proportional to N. With Grover's algorithm the quantum computer can do the search in a time proportional to $\sqrt{N}$.

In order to demonstrate the algorithm we may take as an example a directory with 10 names, A to J, and with phone numbers 0 to 9, for example A6, B5, C9, D3, E7, F4, G2, H8, I0, J1. We ask who has the phone number 7.

To represent the whole directory in a classical computer we need 10 name registers to store the names and 10 number registers to store the numbers. We search through the number registers until we find 7, and then we read off the name in the corresponding name register.

In the quantum computer we represent the directory entries, A6 to J1, by orthonormal state vectors $|\mathrm{A6}\rangle$ to $|\mathrm{J1}\rangle$. In the state $|\mathrm{A6}\rangle$, for example, the name register is in the state $|\mathrm{A}\rangle$ and the number register in the state $|6\rangle$. If we then measure the name register we will get the name A as a measurement result, and if we measure the number register we will get the number 6 as a measurement result.

In a quantum computer we need only one name register and one number register, because we may represent the whole telephone directory by the superposed state

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}} \left(|\mathrm{A6}\rangle + |\mathrm{B5}\rangle + |\mathrm{C9}\rangle + |\mathrm{D3}\rangle + |\mathrm{E7}\rangle + |\mathrm{F4}\rangle + |\mathrm{G2}\rangle + |\mathrm{H8}\rangle + |\mathrm{I0}\rangle + |\mathrm{J1}\rangle\right) . \qquad (1)$$

Every time we prepare this state and measure both the name register and the number register, we find a name and the corresponding phone number, for example D and 3, or H and 8. We say that the two registers are in an entangled state.

a) The simplest search method is to prepare the state $|\phi\rangle$ and measure the number register. The problem is that the probability to find the wanted number 7 is then rather small, and in addition we destroy the quantum state by measuring.

What is the probability to read out the number 7 in the first try?

If we use this method, how many times on the average (approximately) will we have to repeat the preparation and measurement before we find the number we are looking for?

Compare with a search on a classical computer.

Grover's algorithm is more clever. We assume that we have a quantum processor (we may think of it as a "black box" or an "oracle") to read the telephone number n from the number register and decide whether or not it equals 7. We describe the processor mathematically as a unitary operator U acting as follows,

$$U|n\rangle = \begin{cases} |n\rangle & \text{if} \quad n = 7 \, , \\ -|n\rangle & \text{if} \quad n \neq 7 \, . \end{cases}$$

Furthermore, we use the state vector $|\phi\rangle$ defined in equation (1) to define an operator

$$V = I - 2\,|\phi\rangle\langle\phi| \, ,$$

where I is the identity operator.

b) Show that the operator V is both hermitian and unitary, that is, $V = V^\dagger = V^{-1}$.

We also assume that our quantum computer has a quantum processor to execute the operation V, that is (at least theoretically) possible because V is unitary.

c) Define

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \frac{1}{3} \left(|\mathrm{A6}\rangle + |\mathrm{B5}\rangle + |\mathrm{C9}\rangle + |\mathrm{D3}\rangle + |\mathrm{F4}\rangle + |\mathrm{G2}\rangle + |\mathrm{H8}\rangle + |\mathrm{I0}\rangle + |\mathrm{J1}\rangle\right) , \\ |\psi_2\rangle &= |\mathrm{E7}\rangle \, , \end{aligned}$$

so that $\langle\psi_1|\psi_1\rangle = \langle\psi_2|\psi_2\rangle = 1$, $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$, and

$$|\phi\rangle = \frac{3}{\sqrt{10}}\,|\psi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{10}}\,|\psi_2\rangle = \cos\alpha\,|\psi_1\rangle + \sin\alpha\,|\psi_2\rangle \, ,$$

where this equation defines the angle α.

Show that if $|\psi\rangle = \cos\beta\,|\psi_1\rangle + \sin\beta\,|\psi_2\rangle$, then

$$VU\,|\psi\rangle = \cos\gamma\,|\psi_1\rangle + \sin\gamma\,|\psi_2\rangle \qquad \text{with} \qquad \gamma = \beta + 2\alpha \, .$$

d) We saw above that if we measure the number register in the state $|\phi\rangle$, the probability of the wanted result 7 is small. The question is whether we may prepare another state than $|\phi\rangle$ in which the probability of the measurement result 7 is larger.

With our quantum computer we may for example prepare the state $|\phi_1\rangle = VU\,|\phi\rangle$.

If we measure the number register in this state, what is then the probability of the measurement result 7?

Or we may prepare the state $|\phi_2\rangle = VU\,|\phi_1\rangle = (VU)^2|\phi\rangle$.

If we measure the number register in this state, what is then the probability of the measurement result 7?

The probability is always smaller than 1, but if it is close to 1 and we do not measure 7 the first time we try, we may just prepare the same state and measure once more.

e) Quite generally, if the telephone directory contains N names, approximately how many times will we have to perform the unitary operation VU in order to get a probability close to 1 for finding the telephone number we are looking for?

Comments?

Some physical constants and formulas

The speed of light in vacuum:	$c = 299\,792\,458\,\mathrm{m/s}$
The permeability of vacuum:	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}\,\mathrm{N/A^2}$
The permittivity of vacuum:	$\epsilon_0 = 1/(\mu_0 c^2) = 8.854 \times 10^{-12}\,\mathrm{F/m}$
The reduced Planck's constant:	$\hbar = h/(2\pi) = 1.055 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$
The elementary charge:	$e = 1.602 \times 10^{-19}\,\mathrm{C}$
The fine structure constant:	$\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) = 1/137.036$
The electron mass:	$m_\mathrm{e} = 9.109 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg} = 0.511\,\mathrm{MeV}/c^2$
The proton mass:	$m_\mathrm{p} = 1.6726 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg} = 938.28\,\mathrm{MeV}/c^2$
The neutron mass:	$m_\mathrm{n} = 1.6749 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg} = 939.57\,\mathrm{MeV}/c^2$
The atomic mass unit:	$\mathrm{u} = 1.660\,54 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg} = 931.46\,\mathrm{MeV}/c^2$
The Bohr radius for hydrogen:	$a_0 = \hbar/(\alpha m_\mathrm{e} c) = 0.529\,\text{Å}$

Canonical commutation relations:

$$[x, p_x] = [y, p_y] = [z, p_z] = \mathrm{i}\hbar\ , \qquad [x, p_y] = [x, p_z] = \cdots = [z, p_y] = 0\ .$$

Ground state energy of the hydrogen atom:

$$E_1 = -\frac{\alpha^2 m_\mathrm{e} c^2}{2} = -\frac{\hbar^2}{2 m_\mathrm{e} a_0^2}\ .$$

Potentially useful integrals:

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\; r^n\, \mathrm{e}^{-\lambda r} = \frac{n!}{\lambda^{n+1}} \qquad \text{for} \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \qquad \text{and} \qquad \mathrm{Re}\,\lambda > 0\ .$$

$$\int_0^\infty \mathrm{d}u\, \frac{u^2}{(1+u^2)^4} = \int_0^\infty \mathrm{d}u\, \frac{u^4}{(1+u^2)^4} = \frac{\pi}{32}\ .$$