

## Viikon 4, maanantain esitehtävä:

**Systemin tila pallolla on tällöin pallon huipulla, mutta eikö mittaaminen tee pallon tarkastelusta aika tylsää?**

:D Minusta yksinkertainen vastaus (=pallon huipulla) on mukavan simppeleä mutta voihan sitä tylsäksikin kutsua :) Mutta toki Blochin pallon käytännöllisyys tulee paremmin esiin aikakehityksessä, kun tilavektori kiertää pallon pinnalla suunnasta toiseen.

**Hyödynnetäänkö Blochin palloa myös käytännön sovelluksissa vai onko se nimen omaan tarkoitettu teoreettisesti malliksi visualisoimaan systemin tilaa?**

Kyllä se varmasti joka tapauksessa on visualisoinnin työkalu mutta tämä varmaan vähän riippuu siitä mitä tarkoitetaan "käytännöllä" :) Blochin palloa ja sen laajennoksia useampien kubittien tilojen kuvaamiseen (eräänlainen kvanttirekisteri) toki käytetään kvanttilgoritmien hahmottamisessa. Lisäksi se on ihan hyödyllinen kuva jos tarkastellaan esimerkiksi atomin virittymistä sähkömagneettisessa kentässä.

**Mittaamme systemin tilan ja se on  $|0\rangle$ , tällöin systemin tila Blochin pallolla on pallon pohjois-puolella. Kuvaako Blochin pallo tällöin esimerkiksi elektronin spinin ylös ja alas? Esimerkiksi kun  $|0\rangle$ , voidaan todeta, että elektronin spini on ylös?**

Elektronin spinin z-komponentti olisi yksi hyvä esimerkki tällaisesta kaksitilaisesta systemistä jolle tuo Blochin pallo-kuvaus toimii. Eli juu, esimerkiksi juuri noin.

**Kun  $\psi(x)=|0\rangle$  tällöin systemissä  $\theta=0$  eli systemi on positiivisella z-akselilla etäisyydellä 1 origosta (0,0,1). Onko tila vakaa mittauksen jälkeen?**

Tuo tilan  $|0\rangle$  vakaus riippuu itse asiassa siitä mikä se tila oikeastaan on. Jos kyseessä on ns. stationaarinen tila, niin silloin se säilyttää tilansa mutta muutoin se voi hyvinkin muuttua.

**kuinka tarkka tämä Schrödingerin yhtälö tosiaan on? Avaruudessahan on muitakin atomeja yksielektronisen vedyn lisäksi, puhumattakaan molekyyleistä (erityisesti kompleksiset molekyylit, kuten proteiinit). Proteiinin Schrödingerin yhtälö vaikuttaa olevan todella hankala lasku.**

Schrödingerin yhtälö on tarkka, paitsi että suurilla nopeuksilla se pitää korvata relativistisella teorialla (esim. Diracin yhtälö). Mutta olet oikeassa että se mitä videolla tehtiin riittää vain yhden hiukkasen esittämiseen. Luennolla esitetään Schrödingerin yhtälö hitusen yleisemmässä muodossa ja mietitään sitä miten sillä voitaisiin kuvata jotakin monimutkaisempaa. Tällä kurssilla (ja syksyn kvanttimekaniikan kurssilla) kuitenkin suurimmaksi osasi rajoitutaan vain yhden hiukkasen ilmiöihin, jolloin videolla esitetyt jutut ovat ihan riittävät.

Jo pienien molekyylien kuvaaminen täsmällisesti Schrödingerin yhtälön avulla on käytännössä mahdoton ongelma puhumattakaan isommista molekyyleistä kuten proteiineista. Kemisteillä on

omat menetelmänsä sitten approksimoida tuota monen hiukkasen Schrödingerin yhtälöä siten, että siitä pystyy ratkaisemaan edes jotakin hyödyllistä. Fyysikot tyytyvät ratkaisemaan vetyatomin jotakuinkin täsmällisesti ja sen jälkeen heiluttelemme kovasti käsiä ja sanomme että muut atomit ovat 'vähän niinkuin vetyatomi' ;)

**Jäin miettimään mitä eroa Bra-Ket merkinnöillä  $\langle 1|$  ja  $|1\rangle$ ? Mietin myös sitä, että miksi kvanttibitin tilan kuvaamiseen tarvitaan kolme ulottuvuutta? Jos systeemillä on vain kaksi mahdollista tilaa, niin miksi ei kaksiulotteinen yksikköympyrä riitä kaikkien tilojen kuvaamiseen?**

Bra-ket-notaatio tulee paremmin tutuksi syksyn kvanttimekaniikan kurssilla. Mutta  $\langle 1|$  on nimeltään bra-vektori ja  $|1\rangle$  on nimeltään ket-vektori. Kvanttimekaniikassa lasketaan jatkuvasti erilaisia tilojen odotusarvoja, jotka ovat käytännössä projektioita eri tilojen välillä.

Vektoriavaruuksissa tätä vastaa vektorin projektio toiselle, joka tehdään laskemalla sisätulo (tai pistetulo, jos se on tutumpi termi). Braket-notaatiossa sisätulo on bra- ja ket-vektorien tulo, eli  $\langle A|B\rangle$ .

Syy siihen miksi tarvitsemme kaksi 'erilaista' (mutta silti hyvin samankaltaista) vektorimerkintää, on että bra-vektorit ovat ket-vektorien niin kutsuttuja 'duaaleja'. Eli ket-vektorit ovat jonkinlaisen vektoriavaruuden otuksia, kun taas bra-vektorit ovat tuon saman duaaliavaruuden vektoreita. Käytännössä noiden kahden duaaliavaruuden ero on vain se, että ket-vektorit voi ajatella sarakevektoreina jolloin bra-vektorit olisivat rivivektoreita mutta joista lisäksi on otettu kompleksikonjugaatti. Nämä jutut tulevat aikanaan vastaan matikan kursseilla – meidän kurssilla emme uppoudu näihin sisätuloavaruuksien ongelmiin kovinkaan syvälle.

Kvanttibitin kuvaamiseen tarvittaisiin periaatteessa neljä ulottuvuutta koska molempien tilojen  $|0\rangle$  ja  $|1\rangle$  etukertoimet ovat kompleksiarvoisia lukuja. Kompleksiluvun esittämiseen tarvitaan kaksi ulottuvuutta jolloin kahden kompleksiluvun esittämiseen tarvitaan neljä. Mutta yhdestä ulottuvuudesta päästään eroon siksi että globaalivaihe ei ole oleellinen (mikä tehtiin videollakin). Periaatteessa Blochin pallossa on kuitenkin yksi ylimääräinenkin dimensio, sillä tilavektorin normin pitää olla yksi. Tämä aiheuttaa sen, että kaikki tilavektorit ovat aina ykkösen pituisia, eli ne ovat aina siellä Blochin pallon pinnalla. Ja pintahan on toki kaksiulotteinen.

**Toisaalta jos mittaamme systeemin tilan, eikö se tarkoita, että mahdolliset superpositiotilat (ja siten myös aaltofunktio) romahtavat yksittäiseksi mitatuksi tilaksi eli systeemin tila pallolla ennen mittausta saattoi olla missä tahansa kohdassa sen pintaa?**

Ennen mittausta aaltofunktion tila saattoi tosiaan olla (miltei) mitä vaan, eli kubitin tila saattaa olla missä vain Blochin pallolla. Mutta se missä kubitin tila on, määrää mittaustodennäköisyydet, eli millä todennäköisyydellä saat tilan  $|0\rangle$  ja millä tilan  $|1\rangle$ . Jos haluat tuon yksittäisen mittaustuloksen sijasta saada selville nuo mittaustodennäköisyydet niin joudut toistamaan kokeen monesti.

**Mietityttää se, kuinka aaltofunktio on löydetty, ts jos systeemin tila voidaan mitata vain yhdessä kohdassa, mistä tiedämme että sen tila muuttuu juuri aaltofunktion mukaan?**

Jos nyt yksinkertaisuuden vuoksi tarkastellaan vain tuota kaksitilaista kubittia, niin jos mittaus kertoo että sen tila on esimerkiksi  $|0\rangle$ , niin silloin sinä tiedät sen tilan täsmällisesti. Schrödingerin yhtälö kertoo sitten miten sen tila kehittyy ajassa, ja myös se on ihan täsmällistä eli kubitin tilan aikakehitys on täysin determinististä ja hyvin määriteltyä. Jos kyseessä on jotakin monimutkaisempaa, esimerkiksi elektorni joka viuhkoo vapaasti avaruudessa, niin mittaamalla sen paikan tiedät taas tarkasti sen aaltofunktion (noh, mittaustarkkuuden rajoissa!)

**Ymmärsin kyllä sen, että liikuttaessa pohjoisnavalta etelänavalle tai toisinpäin muuttuu todennäköisyys sille, että kubitti on 1 tai 0, mutta mitä tuo toinen muuttuja tässä kohti kuvaa?**

Kiertokulma ympäri etelä-pohjois-akselin on (ominais)tilojen  $|0\rangle$  ja  $|1\rangle$  vaihe-ero, eli noiden kahden (ominais)tilan kompleksisten painokertoimien vaiheiden ero. Tuo vaihe-ero käytännössä määrää sen miten nuo tilat interferoivat, jos tehdään jonkinlaisia mittauksia – jos mitataan voin tilaa  $|0\rangle$  tai  $|1\rangle$ , niin tuo vaihe-ero ei ole merkittävä, mutta me voimme suorittaa mittauksen myös jossakin toisessakin kannassa samaan tapaan kuin fotonin polarisaatiota voitiin filteroida vaaka- ja pystypolarisaatiolla mutta myös 45 asteen kulmassa.

**En ymmärtänyt, miksi 1. videon paikka noudattaa sinifunktiota matalimmalla energiatasolla. Olisin oletanut, että paikka on tasajakautunut. Vai onko kenties niin, että kaikkien energiatilojen paikkafunktioiden summa on tasajakautunut?**

Itse asiassa kaikkien energiatilojen paikkafunktioiden summa on Diracin delta-distributio :) Mutta tuo sinifunktio on tavallaan niin tasajakautunut kuin on mahdollista. Laatikkopotentialissa ainoastaan kineettisellä energialla on merkitystä, ja se puolestaan riippuu aaltofunktion kaarevuudesta. Alimmalla tilalla kaarevuus on siis pienin mahdollinen. Voisi toki ajatella että se tarkoittaisi vakiofunktioita, mutta reunaehdot määräävät että aaltofunktion menee nolnaan laatikon reunoilla. Yhdistelmä siis tätä reunaehto ja kaarevuuden minimointia antaa sinifunktion.

**Ehkä hölmö kysymys, mutta onko interferenssikuvio, joka nähdään kaksoisrakokokeessa tuon schrödingerin yhtälössä olevan aaltofunktion interferenssikuvio itsensä kanssa, vai liittyvätkö nämä jotenkin muuten toisiinsa.**

Kysymys on erinomaisen tärkeä. Ne ovat hyvin läheisessä yhteydessä mutta sama asia ne eivät toki ole. Aaltofunktion interferenssikuvio itsensä kanssa antaa kaksoisrakomaisen todennäköisyysjakauman, Mutta tuo interferenssikuvio on todennäköisyysjakauma joka kertoo mistä yksittäinen hiukkanen löydetään mitattaessa. Kaksoisrakokokeen interferenssikuvio näyttää ihan samalta, mutta siinä on kyse toistoista. Eli samaa koetta yksittäisillä hiukkasilla on toistettu ziljoona kertaa, jolloin havaitsemamme interferenssikuvio on hyvä tilastollinen kuvaus tuosta aaltofunktion muodosta. Mutta edelleenkin emme suoranaisesti pysty siis mittaamaan tuota itse aaltofunktiota. Ja tarkennettakoon vielä, että toistomittauksella saadaan selville

todennäköisyysjakauma, joka on kuitenkin vain tuon aaltofunktion itseisarvon neliö. Eli itse kompleksiarvoinen aaltofunktio ei ole suoraan mitattavissa.

**Tää saattaa mennä asiasta vähän ohi, mutta mä en oikein vieläkään ymmärrä, että miten se, että elektronin liike ytimen ympäri on seisova aalto, aiheuttaa sen, että se ei lähetä sähkömagneettista säteilyä?**

Hehheh, erinomainen kysymys! Palaamme asiaan viikolla 5.

**Mikä merkitys tuolla  $e^{i\phi}$  kertoimella on?**

Se on vaihe-ero noiden tilojen  $|0\rangle$  ja  $|1\rangle$  välillä ja sieltä tulee kaikki interferenssi-ilmiöt.

**Onko Blochin pallolle käyttöä myöhemmillä kursseilla? Se vaikuttaa toimivalta keinolta!**

Noo, en voi luvata että sitä käytetään muilla kursseilla. Hyvin yleinen se on ja paljon käytetty ainakin kvanttioptiikan ja kvanttilaskennan puolella.

**En ymmärrä kompleksilukuja hyvin joten muunnos  $\alpha = r_\alpha e^{i\phi_\alpha}$  jäi mietityttämään. Mitä kaavaa tässä on käytetty?**

Kyseessä on vain kompleksilukujen yksi esitystapa. Siihen monesti liitetään Eulerin kaava, eli voidaan kirjoittaa

$$\alpha = r e^{i\phi} = r \cos \phi + i r \sin \phi = \operatorname{Re} \alpha + i \operatorname{Im} \alpha.$$

Mutta tuo  $r e^{i\phi}$  on kyllä ehdottomasti tärkeä muoto, sillä sen avulla pystyy laskemaan tosi paljon asioita kompleksiluvuilla (eksponentteja, logaritmeja, potensseja, juuria jne.)

**Kysymyksenä Blochin pallosta olisi, onko tämä järkevä tapa käsitellä qubitien ominaisuuksia tieteellisellä tasolla vai käytetäänkö yleensä kahden kompleksiluvun neliulotteista systeemiä kolmiulotteisen yksinkertaistuksen sijaan?**

Laskuissa emme toki käytä Blochin palloa vaan ihan vain laskemme. Mutta kaksitilaisen systeemin aikakehityksen hahmottamiseen se on aika hyvä tai ainakin paljon käytetty. Ihan kvanttilaskennassa tuota ei kai paljoa enää käytetä, koska se on rajoittunut vain yhden kubitin tilan esittämiseen. Siihen onkin sitten tehty jonkinlaisia yleistyksiä, joskaan en tunne niitä kovin hyvin. Mutta opetellaan ensin helpot asiat! ;)

**Miksi matalin energiataso on juuri sinifunktion muotoinen? Voiko tämän johtaa jostakin?**

Joo, me johdamme sen luennolla ja se on tehty myös kirjassa. Mutta sen voi ymmärtää myös ihan fysikaalisesti. Aaltofunktioon liittyy kineettistä energiaa, ja tuo kineettinen energia saadaan tuon aaltofunktion toisesta paikkaderivaatasta. Toinen paikkaderivaatta kuvaa funktion kaarevuutta. Mitä enemmän funktiossa on nollakohtia ja niiden myötä merkinvaihtoja, niin sitä enemmän sen täytyy kaareutua ja energia on siis suurempi. Pienin energia on kun nollakohtia on niin vähän kuin mahdollista.

**Onko thetan arvolla siis mitään merkitystä, jos tarkastellaan vain etäisyyttä navoilta?**

**Miksi piti ottaa  $\theta/2$ , eihän nyt siltikään käytetä koko palloa. Onko, sillä jotain tekemistä  $e^{i\pi}$  kanssa?**

Itse asiassa tuolla kulman puolituksella saadaan nimenomaan kaikki suunnat käyttöön, sillä pallokoordinaatiston kulmat ovat määritelty välillä  $\theta \in [0, \pi]$  ja  $\phi \in [0, 2\pi]$ . Tuo kulma  $\theta$  määrää nimenomaan tuon etäisyyden navoilta, mutta jos tarkoitat tuota kulmaa  $\phi$ , niin se ei tosiaan suoraan vaikuta yksittäisen kubitin mittaustulostodennäköisyyksiin. Tuo  $\phi$  on kuitenkin noiden kahden tilan välinen vaihe-ero, ja vaihe-ero on se mikä antaa meille ne interferenssieffektit.

**Ainakin Paulin kieltoäännön nojalla atomiorbitaaleilla näiden vastaavien tilojen todennäköisyydet ovat  $1/2$  ja  $1/2$ ; jos siis tarkasteltaisiin satunnaisia elektroneja, olisiko jakauma spin-tilojen välillä suurin piirtein  $1/2$  ja  $1/2$ ? Vai onko edes olemassa tällaisia "satunnaisia" elektroneja, ja pilaisiko toisaalta tämä mittaaminen itsessään tällaisen jakauman löytämisen?**

Vapaalla elektronilla ei ole mitään syytä miksi sen spin osoittaisi johonkin tiettyyn suuntaan, joten ne ovat varmasti 50%-50% jakautuneet. Atomin tapauksessa tilanne on hieman toinen, sillä elektronin spin vuorovaikuttaa muiden elektronien, ytimen ja jopa oman sähkömagneettisen kenttensä kanssa (ns. spin-rata-vuorovaikutus). Tällaisissa tapauksissa voi olla jotain suuntariippuvuutta.

**Vähän jäi epäselväksi kuitenkin tästä videosta, että miksi  $|\psi\rangle$  on täysin ekvivalentti kun sitä ollaan kerrottu  $\exp(-i\phi)$ . Eikö tästä kuitenkin tulisi  $\exp(-i\phi)|\psi\rangle$  eikä pelkkä  $\psi$ .**

Kyse on siitä, että aaltofunktion globaalivaihe, eli vaihekerroin joka kertoo kaikkia tilan termejä samalla tavalla, ei vaikuta mittaustuloksiin. Tämä taasen johtuu siitä, että mittaustodennäköisyydet saadaan ottamalla noista kustakin todennäköisyysamplitudista se itseisarvon neliö, jolloin vaihekerroin katoaa. Globaalivaihe ei vaikuta myöskään mahdolliseen interferenssiin, koska interferenssissä oleellista ovat vaihe-erot, ja globaalivaihe ei siis aiheuta mitään vaihe-eroja. Blochin pallossa on kuitenkin tärkeä taustaoletus, nimittäin että olemme kiinnostuneita vain yksittäisestä kaksitilasysteemistä. Jos tarkastelemme kahta kvanttibittiä, niin silloin yksittäisen kvanttibitin 'globaalivaihe' ei olekaan enää 'globaali' jos se ei koske myös toista kvanttibittiä.

**Toimiiko tämä Blochin pallo myös siis niin, että systeemin tila on jossain pallon pinnalla, ja kun tila mitataan, se on joko ylös tai alas? Voidaanko todennäköisyysjakaumasta sanoa tässä mitään, onko esim niin, että kun tila on pallon ylemmällä puolikkaalla, se mitatessa romahtaa ylös ja päinvastoin alemmalla puolikkaalla?**

Juurikin näin: Blochin pallon etelä- ja pohjoisnavat vastaavat niitä mahdollisia mittaustuloksia, joten jompaan kumpaan se tila romahtaa mitattaessa. Todennäköisyydet eri mittaustuloksille saadaan siitä vektorin  $\theta$ -kulmasta, eli siitä kuinka 'pohjoisessa' tai 'etelässä' vektorin kärki on. Päiväntasaajalla ollaan juuri puolivälissä eli mittaustodennäköisyydet ovat 50%-50%.

**Onko jossain tilanteissa mahdollista, että todennäköisyyksien summa on vähemmän kuin 1? Johtuuko se dekoherenssista (systeemi ikään kuin toimii tuntemattomana tilana)?**

Todennäköisyyksien summan täytyy olla yksi paitsi jos on joitain tiloja joita emme vain huomioi. Esimerkiksi jos kysymme kahdesta rasiasta että kummassa rasiassa kolikko on, niin todennäköisyyksien summa ei ole yksi jos onkin mahdollista että kolikko ei ole kummassakaan rasiassa. Mutta jos tällaiset 'häviöprosessit' voimme jättää huomiotta niin silloin todennäköisyyksien summan täytyy olla yksi -- mittauksen pitää antaa jokin tulos.

**En ihan ymmärtänyt miksi tarvitsemme kahta lukua kaksitilaisen kvanttisysteemin tilan esittämiseen. Jos todennäköisyysamplitudien summa on yksi, eikö meille riittäisi yksi luku  $p$  (esim ensimmäisen tilan todennäköisyys? Toinen olisi vain  $\sqrt{1-p^2}$ ).**

Kaksi kompleksilukua riittää kyllä (ne todennäköisyysamplitudit), mutta yhden kompleksiluvun esittämiseen tarvitaan neljä reaali lukua. Olet oikeassa tuosta normista, eli se että todennäköisyyksien summa on 1 asettaa reunaehtojen jonka avulla voisimme päästä eroon yhdestä luvusta. Jäljelle jäisi silti kolme.

Huomaa, että Blochin pallossa ei varsinaisesti hyödynnetä tuota todennäköisyyksien summautumisehtoa. Tuo summautumisehto näkyy siinä, että tuon Blochin tilavektorin pituus on koko ajan yksi, eli kvanttisysteemin tila on koko ajan tuossa Blochin pallon pinnalla. Periaatteessa voisimme vähentää esityksen dimensiota vielä hieman, mutta tuo Blochin pallon kuva on havainnollisempi sillä siitä näkyy selvemmin se, että kvanttisysteemin tilan kehityksessä/muutoksessa on kyse tilavektorin kierroista. Tästä enemmän luennolla.

**En ihan ymmärtänyt sitä, että miksi  $r_\alpha = \cos(\theta/2)$  ja  $r_\beta = \sin(\theta/2)$ . Mikseivät ne vain ole  $\cos(\theta)$  ja  $\sin(\theta)$ ? Ja tarkoittivatko siis  $r_\alpha$  ja  $r_\beta$  aaltofunktion alphan ja betan reaaliosia?**

Nuo kulmien puolitukset tehdään vain siksi, jotta saamme vaihe- ja kiertokulmalle ( $\phi$  ja  $\theta$ ) pallokoordinaateista tutut määrittelyalueet. Ja nuo  $r_\alpha$  ja  $r_\beta$  olivat niiden todennäköisyysamplituden  $\alpha$  ja  $\beta$  pituudet eli normit:  $r_\alpha = r_\alpha \exp^{i\phi_\alpha}$  jne.

**Venyttääkö seisova aaltoliike väliainemateriaalia?**

Jos seisovalla aaltoliikkeellä viittaat tässä esimerkiksi kitaran kieleen, niin kyllä, seisova aaltoliike venyttää kitaran kieltä. Mutta kaikilla aaltoliikkeillä 'venytys' ei toki ole hyvin määritelty. Esimerkiksi valolla voidaan synnyttää seisovaa aaltoliikettä esimerkiksi laserin ja peilin avulla,

mutta väliainettahana se ei varsinaisesti vaadi. Mutta kaikissa materiaalin elastisiin ominaisuuksiin liittyvä aaltoliike tavalla tai toisella täytyy materiaalia venyttää, kiertää tai puristaa.

### **Mitä eroa on ekvivalentilla ja yhtäsuuruudella?**

Hyvä kysymys, vaikka tämä meneekin nyt enempi matematiikan kuin fysiikan puolelle. Ekvivalentti on vahvempi vaatimus, koska se edellyttää että kaksi asiaa ovat yhtäsuuria 'kaikkialla' kun taas pelkkä 'yhtäsuuruus' tarkoittaa että kaksi asiaa ovat yhtäsuuria jossakin tietyssä tilanteessa. Vähän konkreettisempi (mutta matemaattinen) esimerkki olisi vaikka kaksi funktiota  $f(x)$  ja  $g(x)$ . Jos  $f(x) = g(x)$  kaikilla  $x$ :n arvoilla, ovat funktiot ekvivalentit. Jos taas  $f(x) = g(x)$  jollakin  $x$ :n arvolla, ovat nuo funktiot yhtäsuuret  $x$ :ssä (mutta ei siis välttämättä kaikilla mahdollisilla  $x$ :n arvoilla).

### **Onko siis bra-ket notaatio käytössä ainoastaan kun mittaamme kappaleen diskreettiä 1-0 ominaisuutta?**

Ei toki, mutta se on kyllä käytännöllisin tilanteissa joissa tilat ovat ainakin diskreettejä. Esimerkki jossa tulemme kurssillammekin bra-ket notaatiota käyttämään on vetyatomin elektronin tilat, esim.  $|n, l, m\rangle$  ( $n$ =pääkvanttiluku (kuori),  $l$ =pyörimismääräkvanttiluku ja  $m$ =pyörimismäärän  $z$ -komponentin kvanttiluku). Mutta tämä on vasta viikon 5 asioita.

### **Eri energiatilojen kuvaaminen seisovina aaltolina ilmeisesti kuvaa energian kvantittumista aaltoluonteen kautta? Ovatko eri energiat sitten perustilan aallonpituuden monikertoja?**

Seisovat aallot liittyvät tosiaan suoraan energian kvantittumiseen, mutta tilanne on toki ihan tuttu arkipäiväisestä värähtelevästä kitaran kielestä tai slinkystä. Tuo aallonpituuden ja energian yhteys riippuu kuitenkin tilanteesta: kitarassa taajuudet ovat tosiaan aallonpituuden käänteisluvun moninkertoja, mutta tämä yksinkertainen yhteys liittyy kitaran kielessä etenevien aaltojen dispersiorelaatioon. Yleisemmin tuo dispersiorelaatio voi olla monimutkaisempi, jolloin tuo taajuuden (tai energia) ja aallonpituuden yhteys pitää ratkaista kussakin tapauksessa erikseen.

**Minua mietityttää se, miksi hiukkasten paikkojen amplitudeista käytetään sanaa *todennäköisyysamplitudi*. Olen itse aina ymmärtänyt todennäköisyyksien kuvaavan epävarmuutta jostakin ilmiöstä, eli se ei ole osa tutkittavaa ilmiötä. Kvanttimekaniikassa ns. todennäköisyysamplitudit interferoivat keskenään, mutta yleensä todennäköisyydet eivät interferoi samalla tavalla. Ehkä hiukkanen oikeasti toteuttaa kaikki reitit, jotka aaltofunktiossa kuvataan? Sitä on vain käteväntä ajatella todennäköisyytenä. Tämä taitaa kuvastaa vain kieleemme puutteellisuutta, sillä sitä ei ole suunniteltu kvanttimekaanisten ilmiöiden selittämiseen.**

Juurikin näin. Kielemme on puutteellinen, koska makromaailman ilmiöissä ei ole mitään mikä käyttäytyisi samalla tavalla. Siksi meillä onkin näitä hieman outoja käsitteitä kuten superpositio ja todennäköisyysamplitudi. Ne ovat tavallaan 'jargonia', mutta toisaalta se on sellaista jargonia

jolle ei oikein ole vaihtoehtoa sillä kaikki arkipäivän sanat olisivat harhaanjohtavia. Mutta täytyy sanoa että tuo *todennäköisyysamplitudi*-termi on kuitenkin käytännön työssä aika harvoin käytettävä termi. Ihan me puhutaan vain aaltofunktion amplitudista tai jostakin ihan muusta.

**Muutenkin jäi mietityttämään Blochin pallossa xy-tason merkityksellisyys, sillä muutos pallon xy-tason suuntaisessa halkaisijassa ei muuta todennäköisyyttä mitata nolla tai yksi. Ehkä kyseessä on jokin vaihejuttu.**

Aivan oikein! Kyseessä on tosiaan 'vaihejuttu'. Pelkän yksittäisen kubitin tilan mittauksen kannalta se ei ole merkittävää, mutta tuo vaihe on merkittävä interferenssin kannalta.

## **Viikon 4, keskiviikon esitehtävä:**

**En ole vielä kukaan ihan varma, miten aaltofunktiosta saadaan todennäköisyys. Esim. videolla näytetään laatikossa yksiulotteisesti liikkuvan hiukkasen eräs aaltofunktio, joka reaaliakselia tarkasteltaessa heiluu ylös ja alas, kuin trampoliini. Silloinhan amplitudi on jollain ajan hetkellä aina nolla, eli yhtäkkiä hiukkanen ei olisikaan enää laatikossa. Vai hetkinen, otetaanko tässä siis imaginaariosa myös huomioon, eli amplitudi on vakio, mutta aallon pyöriminen x-akselin suhteen synnyttää illuusion amplitudin muuttumisesta, jos tarkastelee vain xy-tasoa?**

Juuri näin! Sinun pitää huomioida myös imaginaariosa koska todennäköisyys saadaan siitä itseisarvon neliöstä. Videon lopulla kaksiulotteisen aaltofunktion sekä kolmiulotteisten orbitaalien tapauksissa esitettiin lisäksi pelkkää aaltofunktio reaaliolosuhteissa, joten siitä voi tulla kuva että todennäköisyystiheys jotenkin muuttuu mutta itse asiassa kyseessä oli stationaariset tilat. Imaginaariosa siis kasvaa samalla kun reaaliolosuhteissa pienenee ja toisinpäin. Se kaikki 'aikadynamiikka' mitä niissä esitettiin oli vain ja ainoastaan vaiheen muuttumista.

**Toinen kysymys: Jos oikein ymmärsin, summaamalla eri taajuuksisia aaltofunktioita yhteen, saadaan uusi aaltofunktio, jolla on selkeämpiä piikkejä, ja näin saadaan selvitettyä hiukkasen paikka paremmalla todennäköisyydellä. Mistä/miten näitä eri taajuuksisia aaltofunktioita saadaan? Onko se niin, että selvitetään sellaisten hiukkasten hiukkasten aaltofunktioita, joilla on eri energiat, ja summataan ne yhteen? Ja sitten ei enää ollakaan varmoja, mikä uuden aaltofunktion kuvaaman hiukkasen energia on.**

Tarkastelemme tässä vain yhtä hiukkasta. Eri energiatilojen superpositiotila voidaan luoda monella tavalla mutta yksi helppo tapa on yksinkertaisesti mitata hiukkasen paikka. Videolla esitettiin Heisenbergin epätarkkuusperiaatetta, eli mitä tarkemmin tiedät hiukkasen paikan, sitä huonommin tiedät sen liikemäärän mikä tarkoittaa että hiukkasen tila on monen liikemäärätilan superpositiossa.. Vapaalle hiukkaselle kineettinen energia saadaan suoraan sen liikemäärän neliöstä (jaettuna  $2 \cdot \text{massalla}$ ), joten nyt myös sen energiatila on superpositiossa.



**Eräs kysymys videosta heräsi: kun esimerkiksi tiedetään liikemäärä yksiulotteisessa tapauksessa, käyrä kiertää vakiokulmataajuudella eli sen energia on sidottu. Onko aaltofunktio silloin varmasti summa aaltoyhtälöiden ratkaisuksista, jotka vastaavat keskenään samaa energiaa (koitin etsiä parempaa termistöä netistä, mutta en löytänyt. Pitänee katsoa edellinen luento uudelleen)? Kävisi järkeen, koska jos liikemäärä tiedetään niin varmaankin tiedetään myös energia.**

Hyvä kysymys mutta vastaus riippuu tilanteesta. Videon tilanteessa kun tarkastellaan yksittäistä hiukkasta liikkumassa vapaassa avaruudessa on hiukkasen aaltofunktion liikemäärällä ja sen kineettisellä energialla suora vastaavuus, aivan kuten uumoilitkin. Sanomme, että liikemääräoperaattori ja energiaoperaattori (=Hamiltonin operaattori) 'kommutoivat', eli niillä on yhteiset ominaistilat.

Tuo kommutaatiorelaatio ei ole kuitenkaan välttämätön. Jos hiukkanen esimerkiksi liikkuu jonkinlaisessa potentiaalienergiakentässä (esimerkiksi elektroni protonin läheisyydessä), niin liikemääräoperaattori ja Hamiltonin operaattori eivät kommutoikaan enää, eikä yksinkertainen yhteys enää toimi vaan mikä tahansa liikemäärätila on itse asiassa useamman energiatilan superpositio.

**Jos hiukkasen aaltofunktio on yhdistelmä kahdesta erienergisestä perusaallosta (energiat vaikka 1 ja 2), ja se mitataan, tila romuttuu jommaksi kummaksi aalloksi. Mutta mihin häviää tai mistä tulee se energian erotus? Alkuperäisen aallon energian on keskimäärin 1,5 yksikköä?**

Hmm. Nämä energiansäilymisjutut herättävät monesti kysymyksiä ja erityisesti mittaukseen liittyen. Energia säilyy kvanttimekaniikassa mutta se edellyttää sitä, että tarkastelemme kaikkia tarpeellisia ilmiöitä. Ongelmana mittauksen kanssa onkin se, että lähes poikkeuksetta mittauksessa on kyse systeemin tilan kietoutumisesta makroskooppisen määrän vapausasteita kanssa mikä tekee täsmällisen kvanttimekaanisen kuvauksen mahdottomaksi.

Mutta lyhyt vastaus kysymykseesi on, että jos systeemi on kahden tai useamman energian ominaistilan superpositiossa, ei sillä ole hyvin määriteltyä energiaa. Energian keskiarvo ei ole systeemin energiaa sen paremmin kuvaava arvo kuin mikään yksittäinen systeemin energioista, vaan sinun pitää vain hyväksyä että sen on noiden energiatilojen superpositiossa. Aivan samaan tapaan kun et voi 'keskiarvoistaa' hiukkasen paikkaa kun se on kahden tai useamman paikan superpositiossa.

**Kaksiulotteisessa mallissa käytettiin neliönmuotoista laatikkoa, jonka reunojen mukaan aallot määräytyivät. Pystyykö monimutkaisemmille kuvioille määrittämään aaltojen muotoja helposti?**

Kyllä. Nämä yhden hiukkasen ongelmat, joissa potentiaali on kiinteä eli ajasta riippumaton, ovat aika helppoja. Eivät ne monesti ratkea kynällä ja paperilla, mutta ovat nuo differentiaaliyhtälöt aika helppoja tietokoneille ratkaista numeerisesti. Vaikeaksi kvanttimekaniikan tekee monen hiukkasen ilmiöt.

**Ehkä hieman jäi mietityttämään aaltofunktion "reaalisuus". Onko aaltofunktio vain tapa mallintaa kvanttitilaa ja josta saadaan todennäköisyys helposti, vai onko se jotenkin syvemmin kytkeytynyt "tosi maailmaan"? Kuinka aaltofunktiota voidaan tarkastella jos se "romahtaa" mitattaessa? (Useilla tilojen mittauksilla ja sijainnin todennäköisyyksiä yhdistellenkö?)**

Se että onko aaltofunktio todellinen vaiko ei menee kvanttimekaniikan tulkintojen puolelle. Kööpenhaminalainen tulkinta sanoo, että emme voi puhua hiukkasen tilasta mittausten välillä, koska määritelmän mukaan emme sitä voi silloin havaita. Aaltofunktio on siis vain matemaattinen apukeino ennusteiden tekemiseen. Mutta eri tulkinnoissa on erilaisia näkemyksiä :)

En ole varma mitä tarkoitat aaltofunktion tarkastelulla. Jos mittaat hiukkasen tilan, romahtaa aaltofunktio tosiaan mutta se ei tarkoita että se jotenkin 'tuhoutuisi'. Sen sijaan aaltofunktiosta tulee mittaustulosta vastaava uusi aaltofunktio. Tämä aaltofunktio voi sitten lähteä kehittymään ajassa ja sitä voidaan toki mitata uudestaan.

**Jos aaltofunktion amplitudi pisteessä  $x$  kuvaa hiukkasen todennäköisyyttä olla siellä, ja aallonpituus kuvaa liikemäärää, eikö riitä että esitetään visualisaatio ihan normaalisti 2d-funktiona? Mihin tarvitsemme imaginääriakselin? Miksi esim. 1d-laatikon sisällä olevan hiukkasen aaltofunktio pyörii? Kaikki informaatiohan saadaan pelkästään paikallaan seisovasta sinifunktiosta (amplitudi ja aallonpituus).**

Syynä on se, että amplitudi (vaiheineen päivineen) ei ole suoraan mitattavissa vaan sen itseisarvon neliö. Tuo itseisarvoistus hävittää tuon vaiheinformaation, jota emme siis suoraan havaitse. Se kuitenkin vaikuttaa taustalla, koska vaihe ja vaihe-ero määrää kaikki interferenssi-ilmiöt.

Jos hiukkasen aaltofunktio on jokin stationaarisista tiloista, niin silloin sen aaltofunktio vain 'pyörii' kompleksitasossa ilman että sen muoto muuttuu. Tällöin tuo imaginaariosa on periaatteessa turha. Mutta yleisesti ottaen hiukkanen voi olla monen stationaarisen tilan superpositiossa, ja tällöin tuo amplitudin vaihe määrää miten nuo tilat interferoivat ja siis yhdistyvät tuoksi kokonaisaaltofunktioksi.

**Videolla sanottiin, että aaltofunktion tulee olla nolla laatikon reunoilla, mutta videolla näytettiin funktioita, joissa oli myös useampia nollakohtia. Mistä nämä ylimääräiset nollakohdat tulevat ja tarkoittaako se sitä, että partikkeli ei jostain syystä voi olla esim. keskellä laatikkoa, jos nollakohta on keskellä?**

Kyllä. Siellä missä amplitudi menee nolliin myös todennäköisyystiheys menee nolliin eikä hiukasta voi siis sellaisesta kohdasta löytää. Mutta tämä riippuu siis täysin siitä millä tilalla hiukkanen on.

**Kohdassa, jossa aaltofunktio oli levitetty ja esitetty trampoliinimaisena, oli aaltofunktion amplitudi aina hetkellisesti kaikkialla nolla. Tarkoittaako tämä, että hetkellisesti partikkeli vain katoaa laatikosta ja sitten ilmestyy taas heti takaisin jostain?**

Tuossa kohdassa kuvattiin ainoastaan aaltofunktion amplitudin reaali-osaa. Hiukkanen ei voi kadota ja ilmestyä, vaan sen todennäköisyystiheysjakauman täytyy kaiken aikaa toteuttaa normitusehto. Jos reaaliosa katoaa, niin silloin imaginaariosa, jota ei vain kyseisessä kohdassa esitetty, täytyy kasvaa.

**Siinä kuitenkin oli hetkiä, jolloin aaltofunktion amplitudi oli kaikkialla nolla. Liittykö tämä siihen, että siinä oli kuvattu vain reaaliakseli, vai onko kyseessä jokin muu seikka?**

Kyllä, juuri siitä oli kyse. Mehän emme erikseen pysty havaitsemaan reaali- ja imaginaariosia vaan mittaamme näistä muodostuvan todennäköisyysamplitudin itseisarvon neliötä.

**Miksi kompleksiluvut ovat niin tärkeässä roolissa aaltofunktion kuvaamisessa?**

No tuo on kyllä hyvä kysymys. Periaatteessa ihan normaalinkin aaltoliikkeen voi (ja itse asiassa kannattaa) esittää kompleksisen amplituden avulla. Se mitä me vain havaitsemme on sitten sen amplitudin reaaliosa. Kvanttimekaniikassa on erona se, että havaitsemme sen amplitudin itseisarvon neliön, eli se imaginaariosa vaikuttaa suoraan havaintoihimme (vaikka emme suoraan tuota vaihetta pystykään havaitsemaan).

**Videon lopussa puhuttiin orbitaaleista. Menemmekö vielä syvällisemmin atomien rakenteeseen ja orbitaaleihin kurssilla?**

Ei niin syvälle kuin haluaisin :)

**2D-visualisoinnissa ihmettelin sitä, miten neliskanttisessa tilassa oli suorakulmion muotoisia kohoumia - ajattelisin, että se olisi molempien akselien suhteen symmetrinen?**

Osa stationaarisista tiloista voivat noudattaakin systeemin reunaehtojen symmetrioita, mutta yleisesti ottaen on myös symmetrioita rikkovia tiloja. Symmetriat ovat kuitenkin tärkeitä, mutta tällä kurssilla emme kovin syvälle niihin pääse (voi olla että ensi viikolla vetyatomien kohdalla hyödynnämme pallosymmetriaa, en ole vielä päättänyt ;)).

**Jos hiukkasella on eri energia eri vapausasteiden (videossa 2-ulotteinen paikka) suhteen, tarkoittaako se että hiukkasen kokonaisenergia on energioiden summa? Vai onko hiukkasen energia aina jonkun yhden energiatilan mukainen, johon se myös romahtaa mitattaessa?**

Tässä on nyt kaksi asiaa, jotka on syytä pitää erillään. Kahdessa ja korkeammassa ulottuvuudessa kineettinen energia tavallaan jakaantuu eri komponentteihin, vaikka kyseessä onkin skalaarisuure. Nämä kineettiset energiat lasketaan yhteen aivan kuten klassisessakin mekaniikassa. Toki energiamuotoja muitakin, potentiaalienergia nyt ehkä tärkeimpänä. Energia itsessään ei välttämättä ole hyvin määritelty, eli hiukkanen voi olla monen energiatilan superpositiossa. Mutta kuten sanoit, jos hiukkasen energia mitataan, niin sitten se romahtaa

johonkin energian ominaistilaan, tai stationaariseen tilaan kuten kurssilla olemme niitä toistaiseksi kutsuneet.

### **Onko videon kompleksisen vaiheen kiertonopeus jotenkin samankaltainen Blochin pallola olevan kaksitilaisen systeemin kiertoon?**

Erinomainen huomio! Kyllä vain! Blochin pallossa tarkastellaan kahta tilaa  $|0\rangle$  ja  $|1\rangle$ . Molempiin liittyy jokin energia ja siis kulmanopeus ja molempien amplitudien vaiheet kiertävät siis tuon kulmanopeutensa määräämällä tahdilla. Se on sama kuin Khutoryanskyn kompleksisen vaiheen kiertonopeudet. Erona vain Blochin pallossa on se, että siinä se vaiheen kierto on itse asiassa noiden kahden vaiheen kiertojen erotus eli vaihe-ero. Tämä johtuu siitä, että aaltofunktiosta on poistettu globaali vaihekerroin, mikä tarkoittaa geometrisesti sitä että pyöritämme itse Blochin palloa, jolloin tilavektorin pyörimisnopeus (suhteessa Blochin palloon) on globaalin vaihekierron verran muuttunut.

### **En ymmärrä mikä olisi kompleksisen vaiheen kiertonopeus... eikö realivaiheella ja kompleksivaiheella ole sama kulmanopeus?**

Hyvä kysymys, sillä se vähän avaa minulle sitä mikä kompleksiluvuissa on haasteena opiskelijoilla. Kompleksiluvulla on vain yksi vaihe, ja se vaihe määräytyy sen luvun imaginaariosan ja reaariosan suhteesta. Käsitellään tätä vähän luennolla, sillä useammassa vastauksessa olen jäänyt vähän pohtimaan että onko kompleksiluvun ja vaiheen yhteys ihan kirkkaana mielessä.

### **Johtuuko suljetun laatikon mallissa hiukkasen paikan todennäköisyysjakauman muutokset eri energiatilojen superpositiosta?**

Kyllä, juuri näin. Käsittelemme tuota aaltofunktion (ja samalla siis todennäköisyysjakauman) aikakehitystä keskiviikon luennolla. Mutta kyse on nimenomaan siitä, että aaltofunktio on lineaarikombinaatio seisovista aalloista (tai energiatiloista, kuten kirjoitit), joiden jokaisen kompleksinen vaihe pyörii eri taajuudella (ja taajuuden määrää tilan energia).

### **Onko oikeasti niin että ei tiedetä yhtään millään tarkkuudella missä tämä partikkeli on jos ollaan mitattu partikkelin liikemäärä? tuntuu todella vieraalta tämä ajatus, kai sitä kuitenkin tietää ettei partikkeli ole 1000 km päässä tai toisella puolella universumia vai miten tätä oikein ajatellaan.**

:D Tässä pitää muistaa se, että liikemäärän mittaaminen ei itsessään ole tarkka, vaan siinäkin on jokin epätarkkuus aina mukana. Tämän epätarkkuuden ja paikan epätarkkuuden tulon pätee tuo epätarkkuusperiaate. Aivan samoin kuin paikkaa ei voida määrittää täydellisen tarkasti -- jos haluat tietää paikan vaikka femtometrin tarkkuudella ( $10^{-15}$  m), niin silloin sinun pitää havainnoida se esimerkiksi Heisenbergin mikroskoopin hengessä käyttäen fotonia jonka aallonpituus on luokkaa  $10^{-15}$  m. Tämä olisi jo hyvin voimakas gammasäteilyn fotoni, jolla on hyvin suuri liikemäärä, jolloin hiukkasen rekyylinä sama liikemäärä on hyvin suuri (ja lopullinen

liikemäärän epätarkkuus siis hyvin suuri). Mutta edelleen tiedät paikan 'vain'  $10^{-15}$  metrin tarkkuudella.

En tiedä miten hiukkasen liikemäärän voisi suoraan mitata, mutta jos siihen jonkin menetelmän keksii niin sitten pystyy ehkä vakuuttavammin perustella miksi paikan epätarkkuus kasvaa liikemäärää määrittäessä. Heisenbergin mikroskoopin ajatuskoehan selittää paikan ja liikemäärän epätarkkuuden yhteyden vain toiseen suuntaan.

**Mitä en ymmärrä lainkaan on se, että mikäli aallon amplitudi seinän vieressä on aina nolla, niin tarkoittaako se sitä, ettei hiukkanen voi löytyä tällaisesta pisteestä, vai onko nyt mennyt jotain ratkaisevaa ohi?**

Juuri näin. Todennäköisyystiheys on  $|\psi(x)|^2$ , ja jos todennäköisyysamplitudi on nolla (kuten aivan seinän vieressä on aaltofunktion jatkuvuuden nojalla) niin todennäköisyys löytää hiukkanen siitä paikasta on nolla. Se on itse asiassa aika jännä, koska se eroaa klassisesta laatikossa edestakaisin kimpoilevasta pallosta aika lailla. Kyseessä on toki interferenssi-ilmiö, kuten seisovassa aallossa yleensäkin.