

TDK DOLGOZAT

Három-qubit kevert állapotok összefonódása

Kökényesi Zoltán

Fizikus MSc

1. évfolyam

Témavezető:

Szalay Szilárd

doktorandusz

BME Fizika Intézet

Elméleti Fizika Tanszék

BME

2011

Kivonat

A kevert kvantumállapotok összefonódása a közelmúlt és napjaink aktívan kutatott területe. A legegyszerűbb eset két qubit kevert állapota, melynek összefonódása – köszönhetően néhány matematikai „véletlen” egybeesésnek – teljesen expliciten jellemezhető egyetlen valós függvénnyel, az úgynevezett Wootters-konkurrenciával. Ha a rendszer kicsit nagyobb, például nagyobb dimenziójú részrendszerek esetén, akkor az összefonódásra már nem ismert ilyen expliciten megadott függvény. A részrendszerek számának növelése pedig – mely a bonyolódás másik iránya, – magának az összefonódásnak a struktúráját teszi sokkal bonyolultabbá már tiszta állapotokra is. A három-qubit rendszer azért nagyon érdekes, mert itt már jelentkeznek ezek a „különböző módon összefonott” – különböző összefonódási osztályba tartozó – állapotok, és a tiszta állapotok osztályozása megfelelő expliciten megadott valós függvényekkel teljesen kidolgozott. Viszont kevert állapotokra csak az úgynevezett „convex roof extension” nevű módszerrel, implicit módon lehet megadni összefonódást jól jellemző függvényeket a tiszta állapotokat jellemző függvényekből. Ezeknek a függvényeknek a kiértékelésére néhány speciális egyszerű esettől eltekintve csak numerikus lehetőségeink vannak.

A dolgozatban áttekintjük a kvantum összefonódás elmélet alapjait, és ezek alacsony-dimenziós Hilbert-terekre való alkalmazását. Bemutatjuk a két- és három-qubit rendszerek összefonódását mind tiszta, mind kevert állapotokra. Áttekintjük az irodalomban található ezzel kapcsolatos fontosabb eredményeket, valamint három-qubit kevert állapotok több speciális kétparaméteres családján numerikus módszerekkel meghatározzuk a tiszta állapotokat jellemző fontosabb függvények kevert állapotokra való kiterjesztéseit, és ezeket összevetjük a különböző összefonódási osztályokat részben jellemző kritériumokkal.

Tartalomjegyzék

1. Bevezető	5
2. A kvantummechanika axiómái	5
2.1. Az állapot	6
2.1.1. Bloch-gömb	7
2.1.2. A Bloch-vektoros felírás magasabb dimenzióban	8
2.2. A fizikai mennyiség	9
2.3. Az összetett rendszer	9
2.4. A mérés	10
2.4.1. Neumann-féle vagy projektív mérés	11

2.4.2.	Pozitív operátor értékű mérés (POVM)	11
2.5.	Az időfejlődés	12
3.	Több részrendszer esete és összefonódásuk	12
3.1.	Két részrendszer összefonódása	13
3.2.	Az entrópia, mint összefonódási mérték	14
3.2.1.	A Shannon-entrópia	14
3.2.2.	Egy kvantummechanikai állapot entrópiája – Neumann-entrópia	16
3.2.3.	Összefonódás mértéke tiszta állapotokra	17
3.3.	Az összefonódás mértéke két részrendszer esetén	18
3.3.1.	Összefonódás mértéke két qubit tiszta állapotra	18
3.3.2.	Összefonódás mértéke kevert két qubit állapotokra	20
3.4.	Kettőnél több részrendszer összefonódása	20
3.4.1.	Szeparabilitási osztályok N részrendszer esetén	21
3.4.2.	Szeparabilitási osztályok három qubit esetén	22
3.5.	Összefonódási mértékek három qubit állapotokra	23
4.	Kvantum műveletek és SLOCC osztályok három qubites állapotok- ra	26
4.1.	Kvantum-műveletek	26
4.2.	Kvantum-műveletek osztályai két részrendszerre	28
4.2.1.	Lokális műveletek (LO)	28
4.2.2.	Lokális műveletek egyirányú klasszikus kommunikációval (<i>one- way LOCC</i>)	29
4.2.3.	Lokális műveletek kétirányú klasszikus kommunikációval (<i>LOCC</i>)	29
4.2.4.	Szeparábilis műveletek (SO)	29
4.2.5.	Ekvivalencia osztályok tiszta állapotokra a <i>LOCC</i> művelet alapján	30
4.2.6.	A <i>SLOCC</i> műveletek osztálya és a tiszta állapotok <i>SLOCC</i> ekvivalencia osztályai	30
5.	Három qubites állapotok összefonódásának numerikus vizsgálata	32
5.1.	A LibCreme programcsomag használata és kiegészítései	32
5.2.	Az számolási eredmények és interpretációi	34
5.2.1.	A $ \text{GHZ}\rangle$, $ \text{W}\rangle$ és $I/8$ állapotok keverése	34
5.2.2.	A $(011\rangle + 101\rangle + 110\rangle)/\sqrt{3}$, $ \text{W}\rangle$ és $ \text{GHZ}\rangle$ állapotok keverése	35
5.2.3.	A $ \text{GHZ}\rangle$, $ \text{W}\rangle$ és $ 0\rangle \psi^-\rangle$ állapotok keverése	36
5.2.4.	A $ 0_A\rangle \phi_{BC}^+\rangle$, $ 0_B\rangle \phi_{CA}^+\rangle$ és $ 0_C\rangle \phi_{AB}^+\rangle$ állapotok keverése	36

5.2.5. A $ \text{GHZ}\rangle$, $ \text{W}\rangle$ és $\mathcal{B}$ állapotok keverése	36
6. Végző	37
A. Függelék	40
A.1. Az 1. tétel bizonyítása	40
A.2. Számítási eredmények ábrái	41
A.2.1. A $ \text{GHZ}\rangle$, $ \text{W}\rangle$ és $I/8$ állapotok keverése	41
A.2.2. A $(011\rangle + 101\rangle + 110\rangle)/\sqrt{3}$, $ \text{W}\rangle$ és $ \text{GHZ}\rangle$ állapotok keverése	45
A.2.3. A $ \text{GHZ}\rangle$, $ \text{W}\rangle$ és $ 0\rangle \psi^-\rangle$ állapotok keverése	48
A.2.4. A $ 0_A\rangle \phi_{BC}^+\rangle$, $ 0_B\rangle \phi_{CA}^+\rangle$ és $ 0_C\rangle \phi_{AB}^+\rangle$ állapotok keverése	51
A.2.5. A $ \text{GHZ}\rangle$, $ \text{W}\rangle$ és $\mathcal{B}$ állapotok keverése	54

1. Bevezető

A kvantummechanikai állapotösszefonódás a kvantumfizika sajátos jellegzetessége, mely a klasszikus fizikai szemléletnek ellentmondó következményekre vezet. Csupán néhány példa erre az állapot mérésnél történő beugrása, mely lehetővé teszi az állapotteleportálást; a Bell-egyenlőtlenségek sérülésének magyarázata nem klasszikus korrelációval; és az a tény, hogy egy összetett rendszer teljes ismerete nem vonja maga után a részrendszerek ismeretét.

A kvantummechanikai állapotösszefonódás nem klasszikus viselkedését először Einstein, Podolsky, Rosen és Schrödinger ismerték fel. Akkoriban azonban a kutatók más gyakorlatiasabb irányokat vettek. A kvantumösszefonódást a Bell-egyenlőtlenségek publikálása hozta vissza a köztudatba. Azóta az elmélet letisztult és a kísérleti technika is fejlődött, mely lehetővé tette az összefonódás következményeinek kísérleti megfigyelését. Az állapotösszefonódás a kvantuminformációelmélet központi fogalma, ami a klasszikus információelmülethez képesti többletet jelenti, és lehetővé teszi a kvantumkriptográfiát, szupersűrű kódolást, polinomidejű prímszámfaktorizációt, állapot teleportálást és még sorolhatnánk. Így egyre nagyobb motivációt kapott az összefonódás mértékének kvantitatív vizsgálata.

Egy rövid kvantummechanikai bevezető után bemutatjuk a két és három qubit állapotok néhány lehetséges összefonódási mértékeit, majd egy rövid kvantumműveleti bevezetőben tárgyaljuk az állapotok *LOCC* és *SLOCC* ekvivalencia osztályait. A dolgozat második felében pedig numerikus módszerekkel kiszámolt összefonódási mértékeket mutatunk be.

2. A kvantummechanika axiómái

Tapasztalati úton állíthatjuk, hogy a fizika elméleti formalizmusának nyelve beágyazható a matematikába, ezért a matematikai egzaktság igényével összhangban szükséges a fizika, esetünkben a kvantummechanika, axiomatikus tárgyalása. Mivel a dolgozat ezzel az igénnyel lép fel, a továbbiakban ismertetjük a kvantummechanika axiómáit, ezek néhány elemi következményét és fizikai interpretációját.

A kvantummechanika axiómáit Neumann János fogalmazta meg [5]-ben¹, de most az [1]-ben leírtak tematikáját követjük.

¹Valójában 1932-ben, a könyv eredeti német verziójában fogalmazta meg, a *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*-ban.

2.1. Az állapot

1. Axióma Minden kvantummechanikai rendszerhez tartozik egy komplex, szeparábilis Hilbert-tér, és a rendszer állapotai a Hilbert-tér statisztikus operátorainak feleltethetők meg.

1. Definíció. A $\mathcal{H}$ Hilbert tér egy ρ önadjungált operátorát statisztikus operátornak² nevezzük, amennyiben ρ pozitív ($\langle x, \rho x \rangle \geq 0, \forall x \in \mathcal{H}$ esetén) és $\text{Tr} \rho = 1$. A statisztikus operátorok halmazát $\mathcal{D}(\mathcal{H})$ -val jelöljük.

1. Állítás. Egy ρ operátor akkor és csak akkor statisztikus operátor (vagyis állapot), ha felírható

$$\rho = \sum_{n=1}^{\infty} p_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|, \quad (1)$$

alakban, ahol $|\varphi_n\rangle \in \mathcal{H}$ egységvektorok és igaz, hogy $\sum_{n=1}^{\infty} p_n = 1$ és $p_n \geq 0$.

A bizonyítás megtalálható a [2]-ben.

Az (1) kifejezésben szereplő statisztikus operátorokat fizikailag úgy is interpretálhatjuk, hogy a kvantummechanikai rendszer p_n valószínűséggel a $|\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|$ állapotban van, ami egy rangú projekció. Az ilyen alakú állapotokat *tiszta állapotnak* nevezzük, és a komplex fázistól eltekintve megfeleltethetők egy egyre normált vektornak. Az elemi vagy egy rangú projekciók konvex kombinációját véve kapjuk a *kevert állapotokat*, amiket általánosan a $\rho = \sum_n p_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|$ alakban írhatunk fel. Az állapotok tehát egy konvex halmazt alkotnak, melynek extrémális pontjai a tiszta állapotok. Tehát, ha ρ_n extrémális pontokat jelöl, akkor $\forall \rho$ előáll a $\rho = \sum_n p_n \rho_n$ alakban, ahol $\sum_n p_n = 1, p_n \geq 0$, és a megfelelő ρ_n -ekhez tartozó p_n konvex kombinációs együtthetők egyértelműen megadják az állapotot. A konvex kombinációs felírás azonban nem egyértelmű, mert többféle módon is kikeverhetünk egy állapotot. Erre egy példát mutatunk be a következőkben.

A tiszta állapotok a projekciók, így megfeleltethetők a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér egy állapotvektorának, ami egyre normált és fázisfaktor invariáns. Ekkor az állapottér a Hilbert-tér sugarainak a tere: ekvivalensnek veszünk két vektort, ha csak egy komplex faktorban különböznek. Véges n dimenzió esetén az állapottér a $\mathbb{CP}^n = (\mathbb{C}^n \setminus \{0\}) / \sim \cong S^{2n+1} / S^1$ komplex projektív tér, ahol $S^k = \{(x_1, x_2, \dots, x_{k+1}) \in \mathbb{R}^{k+1} \mid |x_1|^2 + |x_2|^2 + \dots + |x_{k+1}|^2 = 1\}$ a $k+1$ dimenziós Euklideszi-tér k dimenziós egységgömbje³.

²Véges dimenzióban a statisztikus operátort sűrűségmátrixnak is nevezzük

³Erről bővebben olvashatunk a [3]-ban.

2.1.1. Bloch-gömb

A legegyszerűbb példa az állapotok szemléltetésére a kétállapotú kvantummechanikai rendszereket reprezentáló Bloch-gömb⁴. Legyen $\{|0\rangle, |1\rangle\} \in \mathcal{H} \cong \mathbb{C}^2$ ortonormált bázis. Ekkor a tiszta állapotok általánosan felírhatók a $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ alakban, ahol $|\psi\rangle$ normáltsága miatt igaz az $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ összefüggés⁵. Így a $|\psi\rangle$ állapot átírható a

$$|\psi\rangle = e^{i\gamma} \left(\cos \frac{\Theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\Theta}{2} |1\rangle \right)$$

formába, ahol $\Theta \in [0, \pi]$, $\varphi \in [0, 2\pi]$ és $\gamma \in [0, 2\pi]$ valós számok. Mivel az állapot a $\mathbb{CP}^1$ eleme, ezért az $e^{i\gamma}$ fázisfaktort elhagyhatjuk. Így a

$$|\psi\rangle = \left(\cos \frac{\Theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\Theta}{2} |1\rangle \right) \quad (2)$$

alakban fejezhetjük ki az általános qubit tiszta állapotát. Ez a felírás jól mutatja, hogy a tiszta állapotok tere izomorf egy háromdimenziós egységgömb felületével, ahol egy-egy pontja a felületnek egy-egy tiszta állapotot ad meg. Ez az izomorfia onnan is látható, hogy az állapotok tere most a $\mathbb{CP}^1 \cong S^3/S^1 \cong S^2$, ami pedig a háromdimenziós tér egységgömbje.

Az állapot statisztikus operátora általánosan felírható a

$$\rho = \frac{1}{2}(I + \mathbf{r}\boldsymbol{\sigma}) \quad (3)$$

alakban, ahol $\boldsymbol{\sigma}$ a Pauli-mátrixok vektora, I a 2×2 -es egység mátrix és $\mathbf{r}$ valós számtest feletti vektor, melyre ρ pozitivitása miatt igaz, hogy $|\mathbf{r}| \leq 1$. Ezt az $\mathbf{r}$ vektort Bloch vektornak hívjuk. Ez a Bloch vektor reprezentálható az euklideszi térben, ahogy az 1. ábrán is látható. Amennyiben $|\mathbf{r}| = 1$ az egységvektor, akkor az $\mathbf{r}$ vektor a gömb felületére mutat, így az állapot tiszta.

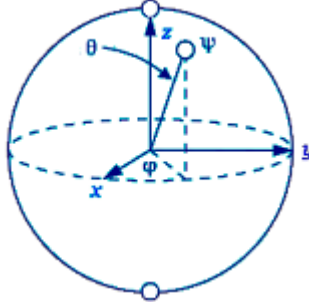
Ha az $\mathbf{r}$ helyvektort gömbi koordinátában paraméterezzük, akkor könnyen ellenőrizhető, hogy a tiszta állapotok a (3) egyenletben felírt alakban ugyan azon állapotok halmazát adják, mint a (2) egyenletben kifejezett alakban.

A kevert állapotok a tiszta állapotok konvex kombinációjaként állnak elő, így azok a gömb belső pontjai lesznek. Így sikerült az állapotok terét egy euklideszi struktúrába ágyazni úgy, hogy a beágyazás a konvex kombináció struktúráját is megtartja (ld.:1 ábra).

Látszik, hogy a gömb bármely belső pontja felületi pontok konvex kombinációjaként többféleképpen is előállhat, ezért ez az előállítás nem egyértelmű. A $\mathbb{C}^2$

⁴A Bloch-gömb leírása megtalálható [4]-ben.

⁵Egy ilyen kétállapotú rendszert a kvantuminformációelméleti vonatkozása miatt qubitnek hívunk.



1. ábra. A Bloch-gömb

Hilbert-tér egy speciális struktúra, mert a konvex halmaz határoló felülete és extrémális pontjai megegyeznek, pontosan azért, mert ha már az egyik konvex kombinációs együttható nulla, akkor már extrémális pontot kapunk, mert a tér kettő bázisvektor speciális szuperpozíciójaként áll elő.

2.1.2. A Bloch-vektoros felírás magasabb dimenzióban

Magasabb N dimenzióban is létezik a (3) egyenlethez hasonló Bloch vektoros felírás, ahol a Pauli-mátrixok helyét az $N^2 - 1$ dimenziós $SU(N)$ Lie-csoport generátorai veszik át, ami az $SU(N)$ Lie-algebrájának bázisa. Ezekre igaz, hogy önadjungált és nulla nyomú $N \times N$ -es mátrixok. Jelöljük ezeket σ_i -vel, ahol $i = 1 \dots N^2 - 1$. Választhatók úgy, hogy teljes ortonormált rendszert alkossanak a mátrixok vektorterén, továbbá⁶

$$\sigma_i \sigma_j = \frac{2}{N} \delta_{ij} + d_{ijk} \sigma_k + i f_{ijk} \sigma_k,$$

ahol f_{ijk} a teljesen antiszimmetrikus, d_{ijk} pedig a teljesen szimmetrikus és nulla nyomú tenzor ($\sum_i d_{iik} = 0$). Az $N = 2$ esetben a Pauli-mátrixokra esetén $d_{ijk} = 0$ és $f_{ijk} = \epsilon_{ijk}$. Továbbá igazak az alábbi összefüggések:

$$\begin{aligned} [\sigma_i, \sigma_j] &= 2i f_{ijk} \sigma_k, & \{\sigma_i, \sigma_j\} &= \frac{4}{N} \delta_{ij} + 2d_{ijk} \sigma_k, \\ \text{Tr} \sigma_i \sigma_j &= 2\delta_{ij}, & \text{Tr} \sigma_i \sigma_j \sigma_k &= 2d_{ijk} + 2i f_{ijk}. \end{aligned}$$

Ezen összefüggések ismeretében felírható egy tetszőleges véges N dimenziós Hilbert-tér egy állapota:

$$\rho = \frac{I}{N} + \sum_{i=1}^{N^2-1} \tau_i \sigma_i,$$

⁶Az összefüggések megtalálhatók a [3]-ben.

ahol τ_i -k egy $\boldsymbol{\tau}$ vektor komponensei, és igaz rájuk, hogy akkor és csak akkor lehet ρ tiszta állapot, ha $|\boldsymbol{\tau}|^2 = \frac{N-1}{2N}$ és $d_{ijk}\tau_i\tau_j = \frac{N-2}{N}\tau_k$. Mivel $|\boldsymbol{\tau}|$ állandó, ezért magasabb dimenzióban a tiszta állapotok tere megfeleltethető egy $N^2 - 1$ dimenziós gömb felületének egy másodfokú egyenlet által meghatározott részhalmazával. A kevert állapotok pedig ezeknek a konvex burka, ami a gömb belsejébe esik.

A dolgozatban három qubites állapotokkal foglalkoztam, amik egy $N = 8$ dimenziós Hilbert-téren ható sűrűségmátrixa, így ezek halmaza egy $N^2 - 1 = 63$ dimenziós tér $|\boldsymbol{\tau}| = \frac{\sqrt{7}}{4}$ sugarú gömbjén helyezkedik el.

2.2. A fizikai mennyiség

2. Axióma Minden valós értékű fizikai mennyiség a Hilbert tér egy A önadjungált operátorának feleltethető meg. Annak a valószínűsége, hogy A -t megmérve a mért érték a $\Delta \subset \mathbb{R}$ halmazba esik $\text{Tr} E_A(\Delta)\rho$, ahol $E_A(\Delta)$ a Δ halmazhoz tartozó spektrális projekció.

Legyen A önadjungált operátor, melynek spektrálfelbontása diszkrét spektrum esetén $A = \sum_n \lambda_n P_n$, általános esetben pedig $A = \int \lambda dE_\lambda$, ahol λ_n és P_n a megfelelő sajátértékek és a sajátvektorok alkotta projekciók és E spektrálprojektor mérték a $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ Borel-halmazon, ahol E tartója $\sigma(A)$, A spektruma. Annak a valószínűsége, hogy φ tiszta állapotban az A fizikai mennyiséget mérve a mért érték beleesik a $\Delta \subseteq \mathbb{R}$ halmazba $\int_\Delta \text{id}_{\mathcal{H}} d\langle \varphi, E_\lambda \varphi \rangle = \langle \varphi, E_A(\Delta) \varphi \rangle = \text{Tr} \left(E_A(\Delta) |\varphi\rangle \langle \varphi| \right)$. Ekkor A várható értékére az $\langle A \rangle_\varphi = \text{Tr} A \rho = \langle \varphi | A | \varphi \rangle$ -t kapjuk⁷.

2.3. Az összetett rendszer

3. Axióma Egy $\mathcal{H}^{(1)}$ és $\mathcal{H}^{(2)}$ kvantummechanikai rendszer összetett rendszerének leírására a $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ tenzorszorzat tér szolgál.

Ekkor definiálhatjuk az összetett rendszer $\rho \in \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ állapotának az egyes részrendszerekre vett redukált állapotait vagy marginálisokat.

2. Definíció. Legyen ρ statisztikus operátor a $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ tenzortéren, és a ρ állapot $\mathcal{H}^{(1)}$, illetve a $\mathcal{H}^{(2)}$ rendszerre vett redukált állapota vagy marginálisa ρ_1 , illetve ρ_2 , melyre teljesül, hogy

$$\begin{aligned} \text{Tr}((A \otimes I)\rho) &= \text{Tr}(A\rho_1) & \forall A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}^{(1)}),^8 \\ \text{Tr}((I \otimes B)\rho) &= \text{Tr}(B\rho_2) & \forall B \in \mathcal{B}(\mathcal{H}^{(2)}). \end{aligned}$$

⁷Id.: Neumann-féle mérés.

⁸ $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ a $\mathcal{H}$ Hilbert tér korlátos operátorainak a halmaza.

Megmutatható, hogy ezek a feltételek egyértelműen meghatározzák ρ_1 -et és ρ_2 -t. Ehhez be kell vezetnünk egy új műveletet, ami a statisztikus operátorok parciális nyomképezése.

3. Definíció. Legyen $\{e_i\} \subset \mathcal{H}^{(1)}$ és $\{f_j\} \subset \mathcal{H}^{(2)}$ ortonormált bázis, és T egy nyomoperátor⁹ a tenzortéren. Ekkor a Tr_1 parciális nyom a $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ tenzortér nyomoperátoraiból képez a $\mathcal{H}^{(2)}$ Hilbert-tér nyomoperátoraiba úgy, hogy

$$\text{Tr}_1 T = \sum_{i,k,l} \langle e_i \otimes f_k | T(e_i \otimes f_l) \rangle |f_k\rangle \langle f_l|,$$

és ugyanígy működik a Tr_2 leképezés is, ami a $\mathcal{H}^{(1)}$ Hilbert tér nyomoperátoraiba képez:

$$\text{Tr}_2 T = \sum_{i,j,k} \langle e_i \otimes f_k | T(e_j \otimes f_k) \rangle |e_i\rangle \langle e_j|.$$

Könnyen ellenőrizhető, hogy a parciális nyom állapotok elemi tenzorszorzatára a $\text{Tr}_2(\rho_1 \otimes \rho_2) = \rho_1 \text{Tr} \rho_2 = \rho_1$ alakban hat, és kielégíti a redukált állapotok definícióját:

$$\text{Tr}(\text{Tr}_1(T)B) = \text{Tr}(T(I \otimes B)),$$

$$\text{Tr}(\text{Tr}_2(T)A) = \text{Tr}(T(A \otimes I)),$$

ahol $T \in \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$, $A \in \mathcal{H}^{(1)}$ és $B \in \mathcal{H}^{(2)}$.

2.4. A mérés

4. Axióma A különböző $\{\lambda_k\}_{k=1}^n$ lehetséges értékeket felvevő mérés olyan $\{M_k\}_{k=1}^n$ operátorok halmazával írható le, amelyekre igaz, hogy $\sum_k M_k^\dagger M_k = I$. Ha a rendszer ρ állapotban volt eredetileg, akkor a mérés végrehajtása után a rendszer a $\sum_k M_k \rho M_k^\dagger$ kevert állapotba kerül. Ekkor a λ_k kimenetel valószínűsége $\mu(\lambda_k) = \text{Tr} M_k \rho M_k^\dagger$. Továbbá ha tudjuk, hogy a mérésnek λ_k kimenetele valósul meg, akkor a rendszer állapota a mérés végrehajtása után beugrik a

$$\rho_k = \frac{M_k \rho M_k^\dagger}{\text{Tr} M_k \rho M_k^\dagger}$$

állapotba.

A valószínűségek összege 1, hiszen

$$\sum_k \mu(\lambda_k) = \sum_k \text{Tr} M_k \rho M_k^\dagger = \sum_k \text{Tr} M_k^\dagger M_k \rho = \text{Tr} \rho = 1.$$

⁹Az angolszász irodalomban trace class, vagyis $\text{Tr}|A| < \infty$.

Ezért felírhatjuk a mérés utáni kevert állapotot a

$$\sum_k \text{Tr} M_k \rho M_k^\dagger \frac{M_k \rho M_k^\dagger}{\text{Tr} M_k \rho M_k^\dagger} = \sum_k \mu(\lambda_k) \rho_k$$

alakban. Amennyiben a kiinduló állapot $|\psi\rangle$ tiszta, a mérés utáni állapot

$$\frac{M_k |\psi\rangle}{\|M_k |\psi\rangle\|}.$$

2.4.1. Neumann-féle vagy projektív mérés

A Neumann-féle mérésnél¹⁰ a mérő operátorok $M_k = P_k$ páronként ortogonális projektorok. Úgy is mondhatjuk, hogy P_k egy projektor értékű mértéket definiál az $\{1, 2, \dots\}$ diszkrét számhalmazon. Ekkor $M_k^\dagger M_k = P_k$ és $\sum_k P_k = I$. Így a mérés λ_k -hoz tartozó valószínűsége $\mu(\lambda_k) = \text{Tr}(P_k \rho_k)$ és a mérés utáni állapot $\sum_k P_k \rho P_k$. Tiszta állapotok esetén a mérés előtti $|\psi\rangle$ állapot beugrik a P_k képterével párhuzamos egységvektorba, vagyis ha $P_k = |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|$, akkor a λ_k mérése utáni állapot $|\varphi_k\rangle$. Mivel a projekciók páronként ortogonálisak, ezért igaz, hogy $P_i P_j = \delta_{ij} P_i$. Ezért, ha egymás után többször ugyanazt a projektív mérést végezzük el, akkor az első mérés utáni állapot nem változik:

$$\sum_j P_j \left(\sum_i P_i \rho P_i \right) P_j = \sum_{i,j} P_j P_i \rho P_i P_j = \sum_i P_i \rho P_i.$$

Általános –nem Neumann-féle– esetben a mérés nem ismételhető.

Minden projektív mérés leírható egy A fizikai mennyiség várható értékével. Legyen A spektrálfelbontása $A = \sum_k \lambda_k P_k$, ahol λ_k -k a mérési eredmények és P_k -k a projektív mérő operátorok. Ekkor A várható értékére azt kapjuk, hogy

$$\mathbb{E}_\rho(A) = \sum_k \lambda_k \mu(\lambda_k) = \sum_k \lambda_k \text{Tr} P_k \rho = \text{Tr}(\rho \sum_k \lambda_k P_k) = \text{Tr} A \rho,$$

ami $|\psi\rangle$ tiszta állapot esetén $\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle A \rangle_\psi$. A 2. axiómában láttuk, hogy egy valós értékű fizikai mennyiség önadjungált operátorral reprezentálható. Tehát ennek a spektrálprojekciói veszik át a mérő operátorok szerepét.

Valójában a Neumann-féle mérés valósítható meg fizikailag, de ennél létezik általánosabb mérés is, a Pozitív operátor értékű mérés.

2.4.2. Pozitív operátor értékű mérés (POVM)

Ha nem számít, hogy mi lesz a mérés utáni állapot, hanem csak a mérés utáni kevert állapotok valószínűségére vagyunk kíváncsiak, akkor használhatjuk a pozitív operátor értékű mérést. Ekkor definiálhatjuk az $E_k \equiv M_k^\dagger M_k$ definíció szerint pozitív

¹⁰A Neumann-féle és a POVM mérés összefoglalása megtalálható [4]-ban.

operátort, ami egy pozitív operátor értékű mérték az $\{1, 2, \dots\}$ diszkrét számhalmazon. Igaz, hogy $\sum_k E_k = I$ és $\mu(\lambda_k) = \text{Tr} E_k \rho$. Látszik, hogy ha az E_k operátorok projektorok, akkor visszkapjuk a projektív mérést. Tehát a pozitív operátor értékű mérés a projektív mérés általánosítása.

Léteznek olyan különböző M_k mérő operátorok, amelyekhez ugyanaz a pozitív operátor tartozik. Ha $M'_k = U_k M_k$, ahol U_k egy tetszőleges unitér operátor, akkor

$$E'_k = M_k^{\dagger'} M'_k = M_k^{\dagger} U_k^{\dagger} U_k M_k = M_k^{\dagger} M_k = E_k.$$

Ezért az $\{E_k\}$ pozitív operátor értékű mérés aluldeterminálja az $\{M_k\}$ mérő operátorok halmazát.

Ha a Hilbert tér dimenziója n , akkor a Neumann-mérésnek maximum n kimenetele lehet. Egy pozitív operátor értékű mérésnek azonban véges dimenziós Hilbert-téren is lehet akár végtelen sok kimenetele is, ilyenkor a $\sum_k E_k = I$ összefüggés helyett $\int dE(\lambda) = I$ pozitív operátor értékű integrált kell alkalmazni.

A Naimark-tétel szerint bármely POVM megkapható egy nagyobb Hilbert-téren végzett nagyobb Neumann-féle mérésből ([3]).

2.5. Az időfejlődés

5. Axióma Egy zárt rendszer időfejlődését unitér operátorokkal adhatjuk meg. Jelölje ρ_t a t , ρ_s pedig az s időponthoz tartozó állapotot. Ekkor

$$\rho_t = U(t, s) \rho U(t, s)^{\dagger},$$

ahol az $U(t, s) \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ az *unitér propagátorok* olyan családja, hogy

$$U(t, s) U(s, r) = U(t, r).$$

Sok esetben autonóm rendszereket vizsgálunk, ekkor $U(t, s) = U(t - s)$ egyparaméteres unitér csoportábrázolás, amire igaz, hogy $\tilde{U}(t_1) \tilde{U}(t_2) = \tilde{U}(t_1 + t_2)$. Legyen a paraméter t . Ekkor az unitér csoportábrázolások generátorát Hamilton operátornak nevezzük¹¹:

$$\tilde{U}(t) = e^{-itH}$$

3. Több részrendszer esete és összefonódásuk

Az állapotösszefonódás a kvantummechanikai rendszerer egy olyan nem klasszikus korrelációkat mutató tulajdonsága, ami a kvantummechanika axiómáinak egy sajátos következménye. Ebből kiderül, hogy léteznek olyan állapotok, ahol egy összetett

¹¹A Planck-állandót egységnek vettük

rendszer részrendszerei egyenként kevesebb információt hordoznak, mint együtt. Ennek az állításnak az a matematikai háttére, hogy még tiszta állapotok esetén is egy tenzortér vektora általánosan nem egy elemi tenzor, ezért nem írható fel tenzorszorzatalakban. Az ilyen összefonódott állapot redukált állapotaiból nem határozható meg egyértelműen az eredeti összefonódott rendszer állapota.

Ezt az alábbi példán szemléltetjük. Tekintsük a $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ Hilbert tér

$$\begin{aligned} |\psi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle), \\ |\psi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle), \\ |\phi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle), \\ |\phi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle) \end{aligned} \tag{4}$$

vektorait, amiket Bell-állapotoknak nevezünk. Könnyen látható, hogy ortonormált bázist alkotnak. Amennyiben kiszámoljuk sűrűség operátoros felírásban az állapotok redukált állapotait, akkor mind a négy Bell-állapotra azt kapjuk, hogy az egyes részrendszerek maximálisan kevert $I/2$ állapotban vannak, annak ellenére, hogy a kezdő összetett rendszer tiszta állapotban volt. Tehát azt mondhatjuk, hogy ha mindent tudunk is az egész rendszerről, mégis akár az is lehetséges, hogy semmit sem tudunk egyenként a részrendszerekről.

3.1. Két részrendszer összefonódása

Ahhoz, hogy definiálhassuk, hogy mi is a kvantummechanikai összefonódás, először a szeparabilitást kell definiálnunk, ami az összefonódottság ellentéte.

4. Definíció. *Tekintsünk két kvantummechanikai állapotteret a $\mathcal{H}^{(A)}$ és a $\mathcal{H}^{(B)}$ Hilbert-tereken. Ekkor az összetett rendszer egy $|\psi_{AB}\rangle \in \mathcal{H}^{(A)} \otimes \mathcal{H}^{(B)}$ vektorral jellemzett tiszta állapotát szeparábilisnek nevezzük, ha felírható elemi tenzorként, vagyis létezik olyan $|\psi_A\rangle \in \mathcal{H}^{(A)}$ és $|\psi_B\rangle \in \mathcal{H}^{(B)}$ állapotvektorok, hogy*

$$|\psi_{AB}\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle.$$

Ez a definíció kiterjeszthető kevert állapotokra is, hiszen egy $|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ állapotvektor megfeleltethető egy $|\psi_A\rangle\langle\psi_A| \otimes |\psi_B\rangle\langle\psi_B|$ projekciónak, és így vehetjük a szeparábilis állapotok konvex burkát, amit egyértelműen meghatároznak a szeparábilis tiszta állapotok, mint a halmaz extrémális pontjai.

5. Definíció. Tehát egy általános ρ állapotot két részrendszer esetén szeparábilisnak nevezünk, ha felírható a

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i^{(A)} \otimes \rho_i^{(B)}$$

alakban, ahol $\{p_i\}$ konvex kombinációs együtthatók, illetve $\rho_i^{(A)} \in \mathcal{D}(\mathcal{H}^{(A)})$ és $\rho_i^{(B)} \in \mathcal{D}(\mathcal{H}^{(B)})$.

6. Definíció. Összefonódottnak nevezünk egy állapotot, ha nem szeparábilis.

1. Tétel. Egy $\mathcal{H}^{(1)}$ és egy $\mathcal{H}^{(2)}$ részrendszerekből álló $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ összetett rendszer esetén, ha $\rho_{12} \in \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ állapot redukált állapotaiból legalább az egyik tiszta, akkor $\rho_{12} = \rho_1 \otimes \rho_2$ szorzatalakú.

A tétel bizonyítása megtalálható a függelékben.

Ennek a tételnek a következménye, hogy két részrendszer összefonódott állapotának a redukált állapotai csak keverték lehetnek, ahogy a Bell-állapotok példáján is láttuk.

3.2. Az entrópia, mint összefonódási mérték

3.2.1. A Shannon-entrópia

7. Definíció. Diszkrét valószínűségi eloszlásnak nevezzük azt a $\{p_i\}_{i \in I}$ számhalmazt, amelyre igaz, hogy $|I| < \infty$, $p_i \geq 0 \forall i$ -re és $\sum_i p_i = 1$.

A diszkrét valószínűségi eloszlások kvantitatív jellemzésére az információelméletből ismert Shannon-entrópia szolgál.¹²

8. Definíció. Egy $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_n)$ n dimenziós valószínűségi eloszlás Shannon-entrópiájának nevezzük a

$$H(\mathbf{p}) = - \sum_i p_i \ln p_i$$

mennyiséget.

A $H(\mathbf{p})$ Shannon-entrópia szemléletes jelentése az, hogy átlagosan hány bit mennyiségű információ (kódszóhossz) szükséges ahhoz, hogy a $\mathbf{p}$ diszkrét valószínűségi eloszláshoz tartozó események bekövetkezésekor kapott információit rögzíteni tudjuk.

Könnyen belátható, hogy $H(\mathbf{p}) \in [0, \ln n]$, minden valószínűségi eloszlásra. Az így definiált entrópia egy valószínűségi eloszlás kevertségének a mértékét jellemzi,

¹²Bővebb irodalom található a Shannon-entrópiáról a [3]-ben.

hiszen ha valamelyik $p_i = 1$ és a többi nulla, vagyis biztos esemény esetén $H(\mathbf{p}) = 0$. Maximálisan kevert eloszlás esetén, ahol $p_i = 1/n$, ($i = 1 \dots n$) és $H(\mathbf{p}) = \ln n$. További tulajdonságai:

1. *Folytonos* függvény.
2. *Kiterjeszthető*, ami azt jelenti, hogy a $0 \ln 0 = 0$ feltételt kiróva (ami határértékben értelmes) $H(p_1, \dots, p_n) = H(p_1, \dots, p_n, 0)$ n dimenziós eloszlás esetén.
3. *Konkáv* függvény, ami azt jelenti, hogy $H(x\mathbf{p} + (1-x)\mathbf{p}') \geq xH(\mathbf{p}) + (1-x)H(\mathbf{p}')$, $\forall x \in [0, 1]$.
4. Schur-konkáv függvény. Ehhez be kell vezetnünk egy $\prec$ részben rendezést a diszkrét valószínűségi eloszlások között, ami azt jelenti, hogy $\mathbf{p} \prec \mathbf{q}$ ($\mathbf{q}$ majorálja $\mathbf{p}$ -t) akkor és csak akkor, ha $\forall k \leq n$ esetén igaz, hogy $\sum_{i=1}^k p_i^\downarrow \leq \sum_{i=1}^k q_i^\downarrow$, ahol a felsőindex nyíla azt jelenti, hogy csökkenő sorrendben vannak a valószínűségi eloszlások sorbarendevezve. Könnyen belátható, hogy ez permutáció erejéig részben rendezés, így a valószínűségi változókat elláthatjuk egy háló struktúrával, ahol a minimális elem az $(1/n, \dots, 1/n)$ egyenletes eloszlás, és a maximális elem a tiszta eloszlás, vagyis ahol az egyik $p_i = 1$. Tehát $\forall \mathbf{p}$ -re igaz, hogy $(1/n, \dots, 1/n) \prec \mathbf{p} \prec (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$.
Ekkor *Schur-konkávnak* nevezünk egy függvényt, ha $\mathbf{p} \prec \mathbf{q}$ esetén igaz, hogy $H(\mathbf{p}) \geq H(\mathbf{q})$.
5. Független eloszlásokra *additív*, ami azt jelenti, hogy ha $p_{ij}^{12} = p_i^1 p_j^2$, akkor $H(\mathbf{p}^{12}) = H(\mathbf{p}^1) + H(\mathbf{p}^2)$. Az additivitás mögött az a szemlélet van, hogy független eloszlások kevertisége összeadódik.
6. Általános eloszlásokra *szubadditív*, vagyis $H(\mathbf{p}^{12}) \leq H(\mathbf{p}^1) + H(\mathbf{p}^2)$, ahol $p_i^1 = \sum_j p_{ij}^{12}$. Az egyenlőség akkor és csak akkor teljesül, ha függetlenek. Ez azt is jelenti, hogy a független eloszlások kevertisége a legnagyobb, akkor amikor a marginálisok entrópiái megegyeznek.
7. *Rekurzív*, tehát ha feldaraboljuk r részre az n dimenziós eloszlást, melynek hosszúsága $k_1, \dots, k_r$ és összegyűjtjük úgy, hogy $(p_1, \dots, p_{k_1}, p_{k_1+1}, \dots, p_{k_1+k_2}, \dots)$ és ebből egy r dimenziós $\mathbf{q}$ eloszlást képzünk, ahol $q_1 = \sum_{i=1}^{k_1} p_i$ és $q_2 = \sum_{i=1}^{k_2} p_{k_1+i}$ és így tovább, akkor

$$H(\mathbf{p}) = H(\mathbf{q}) + q_1 H\left(\frac{p_1}{q_1}, \frac{p_2}{q_1}, \dots, \frac{p_{k_1}}{q_1}\right) + \dots + q_r H\left(\frac{p_{k_1+\dots+k_{r-1}+1}}{q_r}, \dots, \frac{p_n}{q_r}\right).$$

Látszik, hogy a $\mathbf{p}$ entrópiája nagyobb, mint az összegyűjtött $\mathbf{q}$ eloszlások entrópiája.

3.2.2. Egy kvantummechanikai állapot entrópiája – Neumann-entrópia

A Shannon entrópia definíciójának analógiájára definiálhatjuk egy kvantummechanikai állapot Neumann-entrópiáját¹³.

9. Definíció. *Egy véges dimenziós ρ sűrűségmátrixsal jellemzett állapot Neumann-entrópiájának nevezzük az*

$$S(\rho) = -\text{Tr} \rho \ln \rho = -\sum_i \lambda_i \ln \lambda_i = H(\boldsymbol{\lambda})$$

mennyiséget, ahol $\{\lambda_i\}$ a ρ sűrűségmátrix sajátértékei.

Ha tekintünk egy $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ állapotot tetszőleges diadikus felbontással, akkor a p_i diszkrét valószínűségi eloszlások Shannon-entrópiáját könnyen kiszámíthatjuk, viszont ez nem lesz egyértelmű egy állapotra, mert a diadikus felbontás sem egyértelmű. Ha viszont tekintjük a spektrálfelbontását a ρ állapotnak, akkor pontosan a Neumann-entrópiát kapjuk, ami így egyértelmű egy állapotra, és kitüntetett szerepe van. A különböző diadikus felbontásokból minimalizálással egyértelműen meghatározhatjuk a Neumann-entrópiát, erről szól a következő állítás.

2. Állítás. *Egy ρ állapot különböző $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ diadikus felbontásában szereplő konvex kombinációs együtthatóinak Shannon-entrópiáját minimalizálja a Neumann-entrópia:*

$$-\sum_i p_i \ln p_i \geq -\sum_i \lambda_i \ln \lambda_i = S(\rho).$$

A bizonyítás megtalálható a [3]-ben. Érdekes megjegyezni, hogy valóban az állapotok kevertségét jellemzi, mert a tiszta állapotokra, amik egy rangúak, nulla, a maximálisan kevert, identitással arányos állapotokra pedig $\ln n$ -et ad. A Neumann-entrópia további néhány tulajdonsága pedig a következő:

1. *Pozitív.*
2. *Konkáv.*
3. *Szubadditív*, ami azt jelenti, hogy $S(\rho_{12}) \leq S(\rho_1) + S(\rho_2)$. Az egyenlőség akkor és csak akkor igaz, ha az összetett rendszer szorzatalakú, vagyis ha $\rho_{12} = \rho_1 \otimes \rho_2$.
4. *Rekurziós tulajdonság* teljesül rá a következő formában: Amennyiben a ρ sűrűségmátrix $\mathcal{H}$ Hilbert-tere felbontható M különböző ortogonális altér $\mathcal{H} =$

¹³Erről is bővebb irodalom található [3]-ben

$\bigoplus_{i=1}^M \mathcal{H}_i$ direkt összegére úgy, hogy $\rho = \sum_{i=1}^M p_i \rho_i$, ahol ρ_i az alterek sűrűség-mátrixainak identitással tenzorszorozva az egész $\mathcal{H}$ térre kiterjesztett sűrűség-mátrixai, akkor a Neumann-entrópia felírható:

$$S(\rho) = H(p_1, \dots, p_M) + \sum_{i=1}^M p_i S(\rho_i)$$

alakban, vagyis egy kvantummechanikai állapot kevertége megegyezik valamilyen ortogonális felbontásban szereplő részállapotok kevertségeinek konvex kombinációjával és még a felbontás együttes kevertségével.

5. Teljesül rá az *Araki-Lieb egyenlőtlenség*, ami azt jelenti, hogy

$$|S(\rho_1) - S(\rho_2)| \leq S(\rho_{12}), \quad (5)$$

vagyis az egyes részrendszerek kevertségének különbsége sosem lehet nagyobb, mint az együttes rendszer kevertsége.

6. Három részrendszer esetén az *erős szubadditivitás* is teljesül rá

$$S(\rho_{123}) \leq S(\rho_{12}) + S(\rho_{23}) - S(\rho_2).$$

3.2.3. Összefonódás mértéke tiszta állapotokra

Egy általános összefonódási mértéktől több intuitív tulajdonság teljesülését várjuk el ([3]). Ezek közül talán a legfontosabb, hogy az összefonódást nem növelheti a részrendszereken végzett lokális művelet, kiegészítve a részrendszerek közötti klasszikus kommunikációval. Az ilyen műveleteket *LOCC* műveleteknek nevezik, amikről később, a 4.2.3 alfejezetben lesz szó. Vagyis egy f összefonódási mértéknek *LOCC* monotonnak kell lenni:

$$f(\Lambda(\rho)) \leq f(\rho),$$

ahol ρ egy tetszőleges állapot és Λ egy *LOCC* kvantum-művelet. Az 1. tétel alapján mondhatjuk, hogy egy két részrendszerből álló összetett rendszer tiszta összefonódott állapotainak redukált állapotai biztosan keverték. Ezek alapján kézenfekvőnek tűnik olyan összefonódási mértéket bevezetni, amely az egyes részrendszerek kevertsége szerint állít fel mértéket¹⁴.

10. Definíció. *A továbbiakban a $\mathcal{H}^{(AB)}$ összetett rendszerbeli tiszta $|\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}|$ állapot összefonódásának¹⁵ nevezzük az*

$$E(\psi_{AB}) = -\text{Tr}(\rho_A \log_2 \rho_A) = -\text{Tr}(\rho_B \log_2 \rho_B) = S(\rho_A) = S(\rho_B) \quad (6)$$

mennyiséget, ahol ρ_A és ρ_B az A és B rendszerhez tartozó marginálisok.

¹⁴A definíció megtalálható a [6]-ban.

¹⁵Az angolszász irodalomban "Entanglement" függvénynek nevezik

Az összefonódás *LOCC* monoton, ezért ez egy jó összefonódási mérték ([3]). Az (5) egyenlőtlenségből könnyen belátható, hogy a két különböző marginális alapján számolt összefonódások megegyeznek. A vektorok Schmidt-dekompozíciójával is bizonyítható ez az állítás:

3. Állítás. Egy $|\psi\rangle \in \mathcal{H}^{(AB)} = \mathcal{H}^{(A)} \otimes \mathcal{H}^{(B)}$ tiszta állapotot jellemző vektor kifejezhető a

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N \sqrt{\lambda_i} |e_i\rangle \otimes |f_i\rangle \quad (7)$$

alakban, ahol $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{N_A} \in \mathcal{H}^{(A)}$ és $\{|f_i\rangle\}_{i=1}^{N_B} \in \mathcal{H}^{(B)}$ ortonormált bázisok és $N \leq \min\{N_A, N_B\}$.

Általános alakban egy vektor a

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_B} \psi_{ij} |\hat{e}_i\rangle \otimes |\hat{f}_j\rangle \quad (8)$$

formában írható fel. Belátható, hogy ilyenkor a marginálisok

$$\rho_A = \sum_{ij} \left(\underline{\underline{\psi}} \cdot \underline{\underline{\psi}}^\dagger \right)_{ij} |\hat{e}_i\rangle \langle \hat{e}_j| \quad \rho_B = \sum_{ij} \left(\underline{\underline{\psi}}^T \cdot \underline{\underline{\psi}}^* \right)_{ij} |\hat{f}_i\rangle \langle \hat{f}_j|, \quad (9)$$

ahol $\underline{\underline{\psi}}$ a ψ_{ij} elemekből képzett mátrix és a csillag jel csak az elemenkénti komplex konjugálást jelenti, a $\sqrt{\lambda_i}$ Schmidt-dekompozíciós együtthatók pedig a $\underline{\underline{\psi}}$ mátrix szinguláris értékei¹⁶. A bizonyítások megtalálhatók [3]-ban.

A 3. állítást felhasználva a marginálisokra azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \rho_A &= \text{Tr}_B (|\psi\rangle \langle \psi|) = \sum_i \lambda_i |e_i\rangle \langle e_i|, \\ \rho_B &= \text{Tr}_A (|\psi\rangle \langle \psi|) = \sum_i \lambda_i |f_i\rangle \langle f_i|. \end{aligned} \quad (10)$$

Tehát a λ_i -k a marginálisok sajátértékei, így innen is látszik, hogy $S(\rho_A) = S(\rho_B)$. A (10) egyenlet alapján pedig azt kapjuk, hogy $\sum_i \lambda_i = 1$ és $\lambda_i \geq 0$, ami az állapotvektor normálásából is következik. Ez azt jelenti, hogy $\{\lambda_i\}$ egy diszkrét valószínűségi eloszlás.

3.3. Az összefonódás mértéke két részrendszer esetén

3.3.1. Összefonódás mértéke két qubit tiszta állapotra

Összefonódási mértéket definiálhatunk tiszta állapotokra a [6] alapján ahogy a 10 definícióban is megtettük. Két qubit esetén az állapottér a $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$. Ilyen speciális

¹⁶Egy M mátrix szinguláris értékei az $M^\dagger M$ mátrix sajátértékeinek gyökei.

téren a $|\psi\rangle$ állapotvektorhoz tartozó ρ_A redukált sűrűségmátrix 2×2 -es mátrix lesz, és a sajátértékei kifejezhetők a

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \sqrt{1 - \mathcal{C}^2(\psi)} \right)$$

alakban, ahol

$$\mathcal{C}^2(\psi) \equiv 4 \det \rho_A = 4 \det \rho_B, \quad (11)$$

és igaz rá, hogy $\mathcal{C}(\psi) \in [0, 1]$. A $\mathcal{C}(\psi)$ mennyiséget konkurenciának nevezzük.

Definiáljuk a következő műveletet¹⁷, ami N qubit tiszta állapotvektorát szintén N qubites tiszta állapotvektorba képi:

$$|\varphi\rangle \mapsto \sigma_y^{\otimes N} |\varphi^*\rangle,$$

ahol $|\varphi^*\rangle$ a $|\varphi\rangle$ komplex konjugáltja és

$$\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix},$$

az egyik Pauli-mátrix. Ezt a műveletet az irodalom "spin flipnek" nevezi, mert több qubit rendszer bármely egy qubit részrendszerén az állapotot jellemző $\mathbf{r}$ Bloch vektorból $-\mathbf{r}$ vektort képez. Ehhez hasonlóan definiálhatjuk egy sűrűségmátrixon vett hatását is:

$$\tilde{\rho} = \sigma_y^{\otimes N} \rho^* \sigma_y^{\otimes N}.$$

Ezekkel kifejezhető a konkurencia a $\mathcal{C}^2(\psi) = |\langle \psi | \tilde{\psi} \rangle|^2$ alakban, mert két részrendszer esetén

$$\langle \psi | \tilde{\psi} \rangle = -2 \det \underline{\underline{\psi}}^*,$$

ahol $\underline{\underline{\psi}}$ a (8) egyenletben definiált mátrix. A korábbi (9) egyenlet alapján azt kapjuk, hogy

$$|\langle \psi | \tilde{\psi} \rangle|^2 = 4 \det \rho_A = 4 \det \rho_B = \mathcal{C}^2(\psi).$$

Felhasználva az eddigi formulákat, felírható két qubit tiszta állapotokra az összefonódás:

$$E(\psi) = \mathcal{E}(\mathcal{C}(\psi)),$$

ahol bevezettünk két új függvényt:

$$\mathcal{E}(\mathcal{C}) = h \left(\frac{1 + \sqrt{1 - \mathcal{C}^2}}{2} \right),$$

$$h(x) = -x \log_2 x - (1 - x) \log_2 (1 - x).$$

Mivel $\mathcal{E}(\mathcal{C}) \in [0, 1]$, konkáv és monoton növekvő, továbbá $\mathcal{C} \in [0, 1]$, ezért $\mathcal{C}$ is használható összefonódási mértéknek. Elemi számolásokkal belátható, hogy a szeparábilis állapotokra 0, és a maximálisan összefonódott $|\psi^-\rangle$ Bell-állapotra 1.

¹⁷A most következő gondolatok megtalálhatók [6]-ben is.

3.3.2. Összefonódás mértéke kevert két qubit állapotokra

Ha már tiszta állapotokra definiáltunk egy tetszőleges f függvényt, akkor kézenfekvőnek tűnik egy általánosan kevert állapotra úgy kiterjeszteni ezt, hogy a dekompozíció alapján a különböző tiszta állapotokat a diszkrét valószínűségi eloszlással átlagoljuk. Mivel ez egy állapotra nem egyértelmű –a dekompozíció nem-egyértelműsége miatt– ezért vegyük az összes így kapott függvényérték minimumát az összes lehetséges dekompozícióra. Legyen $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$, ekkor¹⁸

$$f_{\text{OF}}(\rho) = \min \left\{ \sum_i p_i f(\psi_i) \mid \rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right\}, \quad (12)$$

A definíció alapján látszik, hogy $f_{\text{OF}}(|\psi\rangle\langle\psi|) = f(\psi)$. A speciális két qubit kevert állapotok összefonódására kimondhatjuk a következő állítást, ami a bizonyításával együtt megtalálható [6]-ban.

4. Állítás. $E_{\text{OF}}(\rho) = \mathcal{E}(\mathcal{C}_{\text{OF}}(\rho))$, ahol

$$\mathcal{C}_{\text{OF}}(\rho) = \max \left\{ 0, \lambda_1^\downarrow - \lambda_2^\downarrow - \lambda_3^\downarrow - \lambda_4^\downarrow \right\}$$

a Wootters-konkurrencia és $\left\{ \lambda_i^\downarrow \right\}$ a $\sqrt{\sqrt{\rho}\tilde{\rho}\sqrt{\rho}}$ mátrix sajátértékei csökkenő sorrendben.

Azért hasznos a későbbiekben ez az állítás, mert két qubit esetén minimalizálás helyett az E_{OF} mennyiség explicite felírható és numerikusan könnyen számolható. Ha az összefonódás mértékére vagyunk kíváncsiak a korábban említett $\mathcal{E}$ függvény tulajdonságai miatt itt is elég a konkurrenciát vizsgálni.

3.4. Kettőnél több részrendszer összefonódása

Általános, véges dimenziós N részrendszer esetén a teljes szeparabilitás definíciója a két részrendszer analógiájára történik.

11. Definíció. Egy N részrendszerből álló $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \dots \mathcal{H}^{(N)}$ összetett rendszer esetén teljesen szeparábilisnek hívunk egy ρ állapotot, ha felírható szorzatalakban, vagy azok konvex kombinációjaként:

$$\rho = \sum_{i=1}^N p_i \rho_i^{(1)} \otimes \dots \otimes \rho_i^{(N)},$$

ahol $\rho_i^{(k)} \in \mathcal{D}(\mathcal{H}^{(k)})$.

¹⁸Az angolszász irodalomban ezt konvex roof kiterjesztésnek és egy function nevű általános függvény esetén a kiterjesztettét "function of formation"-nek nevezik. Ezért az összefonódás kiterjesztettjét "Entanglement of formation"-nek, a hozzátartozó konkurrenciát pedig "Concurrence of formation"-nek hívják.

Ha egy állapot nem teljesen szeparábilis, akkor összefonódott, de a kérdés az, hogy egy ilyen sok részrendszerből álló összetett rendszer különböző részrendszerei hogyan fonódhatnak össze egymással.

3.4.1. Szeparabilitási osztályok N részrendszer esetén

A szeparabilitási osztályok N részrendszer esetén és három qubit állapotra megtalálhatók [7]-ben.

Az N részrendszert osszuk fel k darab partícióra, és nevezzük el ezt a felosztást $\alpha_k = (S_1, S_2, \dots, S_k)$ -nak, ahol S_n -ek az N részrendszert teljesen lefedő és diszjunkt részhalmazainak címkéi.

12. Definíció. Tekintsünk egy N részrendszerből álló állapotot. Ekkor α_k -szeparábilisnek nevezünk egy állapotot, ha létezik olyan felírása, hogy az α_k partíció alapján szeparált állapotok konvex kombinációjaként áll elő:

$$\rho \in \mathcal{D}_N^{\alpha_k} \iff \rho = \sum_i p_i \otimes_{n=1}^k \rho_i^{S_n},$$

ahol $\rho_i^{S_n}$ a $\bigotimes_{r \in S_n} \mathcal{H}^{(r)}$ Hilbert térhez tartozó állapot sűrűségmátrixa.

Általánosabban vehetjük a konvex kombinációját a különböző α_k állapotoknak.

13. Definíció. k -szeparábilisnek nevezünk egy állapotot, ha felírható tetszőleges α_k partíció alapján szeparált állapotok konvex kombinációjaként:

$$\rho \in \mathcal{D}_N^{k\text{-sep}} \iff \rho = \sum_i p_i \otimes_{n=1}^k \rho_i^{S_n^{(i)}}.$$

Ezek alapján látszik, hogy a teljesen szeparábilis állapotok a $\mathcal{D}_N^{N\text{-sep}}$ osztály¹⁹ elemei lesznek, továbbá mivel a definíció miatt igaz, hogy $\mathcal{D}_N^{k\text{-sep}} \supset \mathcal{D}_N^{k+1\text{-sep}}$, ezért tekinthetünk az osztályok rendszerére úgy, mint a szeparabilitás egy hierarchiájára.

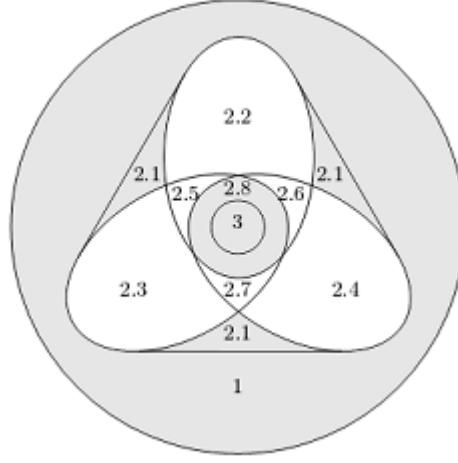
Az összefonódás hierarchiáját pedig úgy vezethetjük be, hogy tekintjük a $\mathcal{D}_N^{k\text{-sep}} \setminus \mathcal{D}_N^{k+1\text{-sep}}$ osztályt, amit úgy nevezünk, hogy k -szeparáltan összefonódott. Az elnevezés tükrözi a halmaz tulajdonságát, hiszen k -szeparálható az állapot, viszont nem $k+1$ -szeparálható. Ezen megfontolások mellett teljesen összefonódottnak nevezhetjük a $\mathcal{D}_N^{1\text{-sep}} \setminus \mathcal{D}_N^{2\text{-sep}}$ osztály elemeit, ahol $\mathcal{D}_N^{1\text{-sep}} \equiv \mathcal{D}_N$ a teljes állapothalmaz, a $\mathcal{D}_N^{2\text{-sep}}$ pedig azon állapotok halmaza, amik legalább két részre szeparálhatók.

Érdemes megjegyezni, hogy $\mathcal{D}^{\alpha_k}$ és $\mathcal{D}_N^{k\text{-sep}}$ is konvex halmazok, továbbá egy $\mathcal{D}_N^{k\text{-sep}}$ -beli állapot nem feltétlenül lesz valamilyen $\mathcal{D}^{\alpha_k}$ halmaz eleme.

¹⁹Az általunk osztálynak nevezett struktúra egy halmaz, nem a matematikai osztály fogalmat hangsúlyozzuk az elnevezéssel.

3.4.2. Szeparabilitási osztályok három qubit esetén

Három qubit esetén a három Hilbert tér címkéje A, B és C . Ekkor $\alpha_1 = ABC, \alpha_2 = A - BC, \alpha_3 = B - CA, \alpha_4 = C - AB, \alpha_5 = A - B - C$ partíciók lehetségesek, ahol a címkék partícióinak tagolása jelenti a részrendszerek szeparabilitási tagolását. Ekkor a következő szeparabilitási osztályokat különbözteti meg az irodalom, ahogy a 2. ábra is mutatja:



2. ábra. Szeparabilitási osztályok általános három qubit állapotokra. A permutációinvariáns állapotok a szürke részhalmazokban lehetnek.

3. *Osztály*: A teljesen szeparábilis állapotok osztálya: $\mathcal{D}_3^{3-szep} = \mathcal{D}_3^{A-B-C}$.

2.2-2.8. *Osztályok*: A most következő osztályok megkaphatók $\mathcal{D}^{\alpha_2}$ és $\mathcal{D}^{\alpha_3}$ osztályok halmazelméleti műveletei által. A 2.2 osztály a $\mathcal{D}_3^{A-BC} \setminus (\mathcal{D}_3^{B-CA} \cup \mathcal{D}_3^{C-AB})$, ami azt jelenti, hogy felírható olyan állapotok konvex kombinációjaként, hogy az első részrendszer a többitől szeparált, és nem írható fel olyan alakban, ahol bármelyik másik részrendszer szeparált lenne a többitől. Ezzel analóg módon a 2.3 osztály a $\mathcal{D}_3^{B-CA} \setminus (\mathcal{D}_3^{A-BC} \cup \mathcal{D}_3^{C-AB})$, a 2.4 osztály pedig a $\mathcal{D}_3^{C-AB} \setminus (\mathcal{D}_3^{B-CA} \cup \mathcal{D}_3^{A-BC})$. A 2.8 osztály a $(\mathcal{D}_3^{A-BC} \cap \mathcal{D}_3^{B-CA} \cap \mathcal{D}_3^{C-AB}) \setminus \mathcal{D}_3^{A-B-C}$, ami úgy is mondható, hogy az összetett rendszer állapota felírható olyan állapotok konvex kombinációjaként, hogy az egyik részrendszer szeparálható a többitől, viszont nem írható fel teljesen szeparábilis állapotok konvex kombinációjaként. A 2.5 osztály a $(\mathcal{D}_3^{A-BC} \cap \mathcal{D}_3^{B-AC}) \setminus \mathcal{D}_3^{C-AB}$, aminek az elemei

felírhatók olyan állapotok konvex kombinációjaként, amikre igaz, hogy csak az 1. vagy a 2. részrendszer szeparálható a másik kettőtől, a harmadik viszont nem. Ugyanígy a 2.6 osztály a $(\mathcal{D}_3^{A-BC} \cap \mathcal{D}_3^{C-AB}) \setminus \mathcal{D}_3^{B-AC}$, és a 2.7 osztály pedig a

$$(\mathcal{D}_3^{C-AB} \cap \mathcal{D}_3^{B-CA}) \setminus \mathcal{D}_3^{A-BC}.$$

2.1. Osztály: A $\mathcal{D}_3^{A-BC} \cup \mathcal{D}_3^{B-AC} \cup \mathcal{D}_3^{C-AB}$ nem konvex halmaz. Vegyük a konvex burkát, ami a $\mathcal{D}_3^{2-sep}$. A 2.1 osztályba pedig azok az állapotok tartoznak, amik nem elemei egyik $\mathcal{D}^{\alpha_2}$ -nek sem, viszont a sűrűségmátrixuk felírható valamilyen különböző módon két részrendszerre szeparált sűrűségmátrixok konvex kombinációjaként, vagyis a 2.1 osztály a $\mathcal{D}_3^{2-sep} \setminus (\mathcal{D}_3^{A-BC} \cup \mathcal{D}_3^{B-CA} \cup \mathcal{D}_3^{C-AB})$, ami nem üres.

1. Osztály: A teljesen összefonódott állapotokat pedig, amik egyik eddigi osztályban sincsenek benne, soroljuk az 1. osztályba. Ez az osztály pedig megegyezik a $\mathcal{D}_3^{1-sep} \setminus \mathcal{D}_3^{2-sep}$ halmazzal.

3.5. Összefonódási mértékek három qubit állapotokra

Láttuk, hogy három qubit állapotokra különböző összefonódási osztályok léteznek, ezért nem egy összefonódási mértéket szeretnénk bevezetni, hanem többet, ami jól jellemzi a különböző részrendszerek egymáshoz való viszonyát.

Ha egy általános három qubit állapot valamelyik két részrendszerét tekintjük, akkor ezeknek könnyen megnézhetjük az egymással való összefonódását, hiszen az általánosan két qubit kevert állapot lesz. Erre már láttuk, hogy a 4. állításban szereplő Wootters-konkurrencia jó összefonódási mérték. A részrendszer állapotát úgy kaphatjuk meg, ha elvégzünk egy parciális nyom műveletet az egyik részrendszeren. Legyen ez a részrendszer az összetett $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(A)} \otimes \mathcal{H}^{(B)} \otimes \mathcal{H}^{(C)}$ Hilbert tér $\mathcal{H}^{(C)}$ részrendszere. Ekkor megkapjuk a $\rho_{AB} = \text{Tr}_C \rho$ állapotot, ahol $\rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$ az összetett rendszer állapota. Jelöljük ezt a mennyiséget $\tau_{AB}(\rho) = \mathcal{C}_{\text{OF}}^2(\rho_{AB})$ -vel. Mivel háromféleképpen tudunk kiválasztani kettőt a három részrendszer közül, ezért három qubitre ebből a mennyiségből három különböző van: τ_{AB} , τ_{AC} és τ_{BC} .

Megvizsgálva a τ_{AB} és τ_{AC} mennyiségeket, a [8]-ban találhatók alapján kimondható a következő állítás.

5. Állítás. Egy $|\psi\rangle$ tiszta három qubit állapotra igaz, hogy

$$\tau_{AB}(\psi) + \tau_{AC}(\psi) \leq 4 \det \rho_A, \quad (13)$$

ahol $\rho_A = \text{Tr}_{BC} |\psi\rangle\langle\psi|$. Ugyanígy igaz a részrendszerek permutációjára is.

A két qubit tiszta állapot esetén az összefonódást –a részrendszer kevertségét– a részrendszer sűrűségmátrixának determinánsával tudtuk jellemezni. Igaz lesz ez akkor is ha egy qubit és tetszőleges másrmilyen (véges) dimenziós rendszer összetett rendszerét tekintjük, ekkor is a qubit részrendszer kevertsége (ami megegyezik a másik részrendszer kevertségével) fogja jellemezni az összefonódást. Definiáljuk ezt a mennyiséget az alábbi formában tiszta három qubit állapotra:

$$\tau_{A-BC}(\psi) = 4 \det \rho_A.$$

Ezzel analóg módon definiálhatók a τ_{B-CA} és a τ_{C-AB} mennyiségek is. Átírva (13) egyenlőtlenséget, a következő alakot kapjuk, amit *Coffmann-Kundu-Wooters egyenlőtlenségnek* hívunk tiszta állapotra:

$$\tau_{AB}(\psi) + \tau_{AC}(\psi) \leq \tau_{A-BC}(\psi)$$

Ezt szokták így mondani, hogy a qubitek összefonódása monogám²⁰, vagyis ha az A és B részrendszer teljesen össze van fonva, akkor A B -vel már nem lehet.

A kérdés az, hogy található-e olyan összefonódási mérték, amivel kiegészítve ezt az egyenlőtlenséget egyenlőséget kapunk. [8] alapján a válasz az, hogy tiszta állapotokra igen, mert ez a mennyiség *LOCC* monoton, nulla és egy közötti értékkészlete van. Erről szól a következő állítás:

14. Definíció. Vezessük be a következő mennyiséget egy tiszta három qubit

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^1 \sum_{j=0}^1 \psi_{ijk} |i\rangle |j\rangle |k\rangle$$

állapotra.²¹

$$\tau_{ABC}(\psi) = \tau_{A-BC}(\psi) - \tau_{AB}(\psi) - \tau_{AC}(\psi). \quad (14)$$

6. Állítás. Egy tiszta három qubit $|\psi\rangle$ állapotra igaz, hogy

$$\tau_{ABC}(\psi) = 4|\text{Det}(\psi)|,$$

ahol $\text{Det}(\psi) = d_1 - 2d_2 + 4d_3$ a Cayley-féle hiperdetermináns és

$$\begin{aligned} d_1 &= \psi_{000}^2 \psi_{111}^2 + \psi_{001}^2 \psi_{110}^2 + \psi_{010}^2 \psi_{101}^2 + \psi_{100}^2 \psi_{011}^2, \\ d_2 &= \psi_{000} \psi_{111} \psi_{011} \psi_{100} + \psi_{000} \psi_{111} \psi_{101} \psi_{010} + \\ &\quad \psi_{000} \psi_{111} \psi_{110} \psi_{001} + \psi_{011} \psi_{100} \psi_{101} \psi_{010} + \\ &\quad \psi_{011} \psi_{100} \psi_{110} \psi_{001} + \psi_{101} \psi_{010} \psi_{110} \psi_{001}, \\ d_3 &= \psi_{000} \psi_{110} \psi_{101} \psi_{011} + \psi_{111} \psi_{001} \psi_{010} \psi_{100}. \end{aligned}$$

²⁰Az angolszász irodalomban ezt "entanglement monogamy"-nak nevezik.

²¹Az angolszász irodalom a τ_{ABC} mennyiséget "Three-tangle"-nek hívja

Átrendezve (14) egyenletet, azt kapjuk, hogy

$$\tau_{AB}(\psi) + \tau_{AC}(\psi) + \tau_{ABC}(\psi) = \tau_{A-BC}(\psi). \quad (15)$$

Könnyen belátható, hogy a τ_{ABC} mennyiség permutáció invariáns, tehát el is hagyhatnánk a részrendszer indexeket, de a szemléletesség kedvéért megtartjuk őket. A (15) egyenletet úgy interpretálhatjuk, hogy egy tiszta állapot A részrendszerének a BC részrendszerrel való összefonódása megegyezik az A és B részrendszerének és az A és C részrendszerének, továbbá az ABC részrendszernek együttes összefonódásával.

Kevert állapotokra is kiterjeszthetők a három qubit összefonódását jellemző mennyiségek. A két részrendszer összefonódását jellemző

$$\tau_{AB}(\rho) = \mathcal{C}_{\text{OF}}^2(\rho_{AB}) \quad (16)$$

függvényt így definiáljuk, hiszen egy kevert állapotnak is ugyan úgy vehetjük a parciális nyomát, mint egy tisztának. A τ_{A-BC} mennyiség kiterjesztését [8] alapján, a (12) egyenlet analógiájára megkaphatjuk az összes $\rho = \sum_{i=1}^N p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ diadikus felbontás alapján vett $\tau_{A-BC}(\rho)$ mennyiség átlagának minimalizálásából, ahol a minimalizálás a különböző diadikus felbontásokra megy:

$$\tau_{A-BC}(\rho) = \min \left\{ \sum_i p_i \tau_{A-BC}(\psi_i) \mid \rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right\} \quad (17)$$

7. Állítás. *Egy ρ három qubit állapot esetén pontosan akkor igaz, hogy $\rho \in \mathcal{D}_3^{A-BC}$, ha $\tau_{A-BC}(\rho) = 0$. Ugyan ez igaz a részrendszerek permutálására.*

A bizonyítása triviális.

A [8]-ben belátták, hogy kevert állapotokra is igaz a Coffman-Kundu-Wooters egyenlőtlenség:

8. Állítás. *Egy általános ρ három qubites állapotra igaz, hogy*

$$\tau_{AB}(\rho) + \tau_{AC}(\rho) \leq \tau_{A-BC}(\rho).$$

A τ_{ABC} mennyiségnek is vehetjük a (17) egyenlethez hasonló kiterjesztését:

$$\tau_{ABC}(\rho) = \min \left\{ \sum_i p_i \tau_{ABC}(\psi_i) \mid \rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right\} \quad (18)$$

Ami különbség viszont adódik a kevert és tiszta állapotok τ összefonódási mértékei közt az, hogy ezzel a mennyiséggel nem tehető általánosan egyenlővé a Coffman-Kundu-Wooters egyenlőtlenség:

$$\tau_{A-BC}(\rho) \neq \tau_{AB}(\rho) + \tau_{AC}(\rho) + \tau_{ABC}(\rho). \quad (19)$$

A dolgozatomban különböző kevert három qubites állapotok τ összefonódási mértékeit vizsgáltam. Az állapotok kiválasztásánál nagy figyelmet fordítottam arra, hogy az összefonódás szempontjából tipikusan máshogy viselkedőek legyenek. Ezért a következő fejezetben egy olyan szempontot mutatunk be, ami alapján eredményesen tipizálhatjuk összefonódás alapján az állapotokat.

4. Kvantum műveletek és SLOCC osztályok három qubites állapotokra

4.1. Kvantum-műveletek

Eddig csak magukkal a kvantum állapotokkal foglalkoztunk, azzal a kérdéssel nem, hogy az állapotok közötti átmenet vagy állapotdinamika hogyan valósul meg. Azokat a tényleges fizikai operációkat, amik egy kvantummechanikai állapotot szintén állapotba visznek, *kvantum-műveletnek* nevezzük²². Nyílt rendszerekre négy csoportra oszthatjuk a lehetséges kvantum-műveleteket:

1. *Unitér transzformáció* leírható műveletek. Ezek egy $|\psi\rangle$ tiszta állapotot szintén egy $U|\psi\rangle$ tisztába visznek, ahol U unitér operátor. Általános állapotok esetén

$$\rho \mapsto U\rho U^\dagger.$$

Erre példa a zárt rendszer időfejlődése.

2. *Rendszer kiterjesztés*: A kiinduló $\mathcal{H}$ Hilbert tér egy állapotához egy másik rendszer $\mathcal{H}^{(\text{anc})}$ Hilbert tér²³ egy állapotát tenzorszorozza hozzá, vagyis ez egy olyan leképezés ami $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}^{(\text{anc})}$ képez úgy, hogy

$$\rho \mapsto \rho \otimes \rho_{\text{anc}}.$$

Ez szemléletesen azt jelenti, hogy az eddig vizsgált rendszerhez hozzávesszünk valamilyen segédrendszert, amivel kölcsönhathat.

3. *Parciális nyommal* megkaphatjuk a környezettől leválasztva az érdekelt rendszer állapotát. Tehát ez a leképezés $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}^{(\text{anc})} \rightarrow \mathcal{H}$ képez úgy, hogy

$$\rho \mapsto \text{Tr}_{\text{anc}}\rho,$$

²²A kvantum-műveletekről bővebben lehet olvasni [3]-ban és [4]-ben

²³A segédrendszert az angolszász irodalom ancilla rendszernek is szokta nevezni, ami "szolgálólány"-t jelent.

ahol a parciális nyom a második részrendszerre megy.

Az eddig felsorolt kvantum-műveletek által generált kvantum-műveleteket *valódi vagy determinisztikus kvantum-műveleteknek* vagy *kvantum csatornáknak* hívjuk. Könnyen belátható, hogy ezek a kvantum-műveletek őrzik a nyomot.

4. *Szelektív mérés*: Ebbe a csoportba tartoznak a 2.4. fejezetben tárgyalt mérések.

Ha a determinisztikus műveletek mellett a szelektív mérést is megengedjük, akkor kapjuk a *Sztochasztikus kvantum-műveleteket*, amik viszont általánosan nem nyomtartóak, így ahhoz, hogy állapotot kapjunk újra kell normálni.

Tekintsük csak a determinisztikus műveleteket. Először induljunk ki egy ρ állapotból és egy segédrendszerből. A segédrendszerrel feltehető, hogy tiszta állapotban van, mert ha nem akkor is egy nagyobb Hilbert-téren "kitisztítható"²⁴ ([4]). Ezt az együttes rendszert zárt rendszernek tekintve, egy unitér transzformációt hajtunk végre, majd az így kapott rendszernek vesszük a parciális nyomát a segédrendszerre, amivel megkapjuk az eredeti rendszer állapotát. Ezt tekintsük egy általános determinisztikus kvantum-művelet elemi lépésének, ami felírható

$$\rho \mapsto \rho' = \text{Tr}_{\text{anc}} [U (\rho \otimes |\nu\rangle\langle\nu|) U^\dagger] \quad (20)$$

alakban, ahol $|\nu\rangle\langle\nu|$ a $\mathcal{H}^{(\text{anc})}$ kezdőállapota és U az unitér transzformáció. Ezek generálják az összes determinisztikus kvantum-műveletet. Ezt a reprezentációt *környezeti reprezentációnak* hívják.

9. Állítás. *Egy determinisztikus kvantum-művelet felírható*

$$\rho \mapsto \sum_{i \in I} A_i \rho A_i^\dagger$$

alakban, ahol A_i operátorok a ρ állapot Hilbert-terén hatnak, amikre igaz, hogy $\sum_{i \in I} A_i^\dagger A_i = I$ (Ezt a reprezentációt operátor-összeg reprezentációnak hívják²⁵). A környezeti reprezentáció és az operátor-összeg reprezentáció ekvivalensek egymással.

A bizonyítás megtalálható [4]-ben.

Sztochasztikus műveletekre pedig szintén felírhatunk egy operátor-összeg reprezentációt, annyi módosítással, hogy a nyomtartást nem követeljük meg.

10. Állítás. *Egy általános kvantum-művelet felírható a*

$$\rho \mapsto \sum_{i \in I} A_i \rho A_i^\dagger$$

alakban, ahol $\sum_{i \in I} A_i^\dagger A_i \leq I$.

²⁴Az angolszász irodalomban "purification"-nek nevezik.

²⁵Az irodalom ezt a reprezentációt Kraus reprezentációnak, az A_i operátorokat Kraus-operátornak is szokta hívni.

Erre az állításra másik megközelítés alapján is eljuthatunk. Ehhez először definiáljuk az statisztikus operátorok közti, fizikailag releváns leképezést:

15. Definíció. Egy $\mathcal{D}(\mathcal{H})$ -n ható Φ lineáris transzformációt, teljesen pozitív leképezésnek nevezünk, ha teljesíti a következő tulajdonságokat:

1. $\Phi(\rho)^\dagger = \Phi(\rho^\dagger)$ (Hermiticitás őrző),
2. $\Phi(\rho) \geq 0$ (Pozitív),
3. $\Phi \otimes I \geq 0$ (Teljesen pozitív, tehát bármilyen környezettel is pozitív operátort pozitív operátorba visz),

ahol ρ statisztikus operátor.

2. Tétel. Egy leképezés akkor és csak akkor kvantum-művelet, ha teljesen pozitív, továbbá egy kvantum-művelet akkor és csak akkor determinisztikus, ha a teljesen pozitív leképezés és nyomtartó, vagyis igaz, hogy $\text{Tr}\Phi(\rho) = \text{Tr}\rho$.

A tétel megtalálható [3]-ban.

4.2. Kvantum-műveletek osztályai két részrendszerre

Egy két részrendszerből álló $\mathcal{H}^{(A)} \otimes \mathcal{H}^{(B)}$ összetett rendszer kvantum-műveletei a részrendszereken végzett kvantum-műveletek egymáshoz való viszonya alapján különböző osztályokba sorolhatók²⁶. A következőkben bemutatunk négy determinisztikus és egy sztochasztikus kvantum-művelet osztályt.

4.2.1. Lokális műveletek (LO)

Ha a Λ_{LO} kvantum-művelet felírható $\Lambda_{LO} = \Lambda_{LO}^{(A)} \otimes \Lambda_{LO}^{(B)}$ alakban, ahol a $\Lambda_{LO}^{(A)}$ műveletet operátor-összeg reprezentációban az $\{A_i\}_{i \in I}$ operátorok, a $\Lambda_{LO}^{(B)}$ műveletet pedig a $\{B_j\}_{j \in J}$ operátorok írják le, és igaz hogy $\sum_{i \in I} A_i^\dagger A_i = I_A$ és $\sum_{j \in J} B_j^\dagger B_j = I_B$ ($\Lambda_{LO}^{(A)}$ és $\Lambda_{LO}^{(B)}$ determinisztikusak), akkor Λ_{LO} lokális művelet.

Ekkor egy lokális művelet átírható az

$$\Lambda_{LO}(\rho) = \sum_{i \in I} \sum_{j \in J} A_i \otimes B_j \rho A_i^\dagger \otimes B_j^\dagger \quad (21)$$

alakba. A lokális műveletek determinisztikusak és teljesen független egymástól.

²⁶A kvantum-műveletek osztályairól egy összefoglaló található [10]-ben

4.2.2. Lokális műveletek egyirányú klasszikus kommunikációval (*one-way LOCC*)

Az *egyirányú LOCC műveletek* is szeparáltak, de itt megengedjük, hogy az egyik részrendszeren elvégzett determinisztikus kvantum-művelet után a másik részrendszeren végzett determinisztikus kvantum-művelet az első eredményétől függjön (ami egy nem szelektív mérés eredménye). Ez klasszikus kommunikációt jelent, mert a mérés eredménye klasszikus információt hordoz. Az egyirányú *LOCC* műveleteket következőképpen formalizálhatjuk ki:

$$\Lambda_{1-LOCC}^{A \rightarrow B}(\rho) = \sum_{i \in I} \Lambda_{LO}^{(B)}{}^i \left(A_i \otimes I_B \rho A_i^\dagger \otimes I_B \right) = \sum_{i \in I} \sum_{j \in J_i} A_i \otimes B_{ij} \rho A_i^\dagger \otimes B_{ij}^\dagger, \quad (22)$$

ahol $\sum_{i \in I} A_i^\dagger A_i = I_A$ és $\sum_{j \in J_i} B_{ij}^\dagger B_{ij} = I_B$, $\forall i$ -re. Ezek a kvantum-műveletek is determinisztikusak. Tipikus példa az egyirányú *LOCC* műveletre a kvantum teleportálás.

Hasonlóan létezik a másik irányba történő klasszikus kommunikációra is egyirányú *LOCC* művelet

4.2.3. Lokális műveletek kétirányú klasszikus kommunikációval (*LOCC*)

Ebbe az osztályba azok a determinisztikus kvantum-műveletek tartoznak, amik előállnak különböző irányú klasszikus kommunikációt tartalmazó műveletek egymásutánjaként. Ezeknek a műveleteknek a formális alakja túl bonyolult, ezért mellőzzük a bemutatását.

4.2.4. Szeparábilis műveletek (*SO*)

Azokat a determinisztikus kvantum-műveleteket, amiknek az operátor-összeg reprezentációjában szereplő Kraus-operátorok elemi tenzor alakúak, *szeparábilis műveleteknek* nevezzük:

$$\Lambda_{SO}(\rho) = \sum_{i \in I} A_i \otimes B_i \rho A_i^\dagger \otimes B_i^\dagger,$$

ahol $\sum_{i \in I} A_i \otimes B_i A_i^\dagger \otimes B_i^\dagger = I_A \otimes I_B$.

Az *LO* műveletek egyben *LOCC* műveletek is, ha úgy tekintünk az *LO* műveletekre, hogy olyan klasszikus kommunikáció valósul meg, ami nem befolyásolja a műveletet. Ezt úgy tehetjük meg, hogy a (22) egyenletben szereplő B_{ij} mátrixokat átindexeljük úgy, hogy $B_{ij} \equiv B_j$, $\forall i$ -re. Nyilván a két irányú klasszikus kommunikációt is megengedő lokális műveletek speciális esetként tartalmazzák az egyirányú *LOCC*-ot. Belátható, hogy az *SO* műveletek tartalmazzák a *LOCC*-ot.

4.2.5. Ekvivalencia osztályok tiszta állapotokra a $LOCC$ művelet alapján

A [12] alapján két részrendszerből álló rendszer $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ tiszta állapotaira igaz, hogy akkor és csak akkor lehet átjutni a $LOCC$ művelettel $|\psi\rangle$ -ből $|\phi\rangle$ -be, ha a $|\phi\rangle$ vektorhoz tartozó Schmidt-együtthatók majorálják²⁷ a $|\psi\rangle$ vektorhoz tartozókat:

$$|\psi\rangle \xrightarrow{LOCC} |\phi\rangle \iff \eta_\psi \prec \eta_\phi$$

Ez azt jelenti, hogy a részrendszereket a $LOCC$ művelet tisztítja, vagyis az entrópia alapján az együttes rendszert szeparálja.

Mivel ez alapján léteznek olyan tiszta állapotok, amik $LOCC$ művelettel nem vihetők át egymásba, ezért van értelme definiálni egy ekvivalencia relációt a tiszta állapotok terén. Legyen két állapot $\sim^{LOCC}$ ekvivalens, ha átvihetők egymásba $LOCC$ művelettel. Mivel a majorálás a permutáció erejéig egy részben rendezés, ezért igaz a következő állítás:

11. Állítás. *Két részrendszerből álló összetett rendszer $|\psi\rangle$ és $|\phi\rangle$ állapota esetén $|\psi\rangle \sim^{LOCC} |\phi\rangle$ akkor és csak akkor, ha a Schmidt együtthatók halmaza megegyezik:*

$$\{\eta_i^\psi\} = \{\eta_i^\phi\}$$

Mivel a Schmidt-együtthatók a redukált állapotok sajátértékei, ezért a részrendszereken ható unitér transzformációkra invariánsak. Igaz az n részrendszerre való általánosítás is.

12. Állítás. *Legyen $|\psi'\rangle$ és $|\phi'\rangle$ két n részrendszerből álló összetett rendszer állapota. Ekkor a $LOCC$ műveletek kiterjeszthetők n részrendszer esetére is, és igaz, hogy $|\psi'\rangle \sim^{LOCC} |\phi'\rangle$ akkor és csak akkor, ha lokálisan unitér invariánsak az állapotok, vagyis léteznek olyan $\{U_i\}_{i=1}^n$ unitér mátrixok, hogy $|\phi'\rangle = U_1 \otimes \dots \otimes U_n |\psi'\rangle$.*

A $LOCC$ ekvivalencia osztályok végtelen sokan vannak, mert egy jellemző paraméterük a (6) egyenletben definiált összefonódás, ami szintén lokálisan unitér invariáns, ezért különböző $LOCC$ ekvivalencia osztályokra különböző értéket vesz fel.

4.2.6. A $SLOCC$ műveletek osztálya és a tiszta állapotok $SLOCC$ ekvivalencia osztályai

16. Definíció. *Kevert állapotokra a Sztochasztikus LOCC (SLOCC)²⁸ műveletek olyan LOCC műveletek, ahol a részrendszereken végzett műveletek közt van szelektív mérés is. Ezek nyomcsökkentők.*

²⁷A majorálás definíciója megtalálható a 3.2.1. alfejezetben.

²⁸Az ebben a alfejezetben tárgyalt vázlat megtalálható a [10]-ben is.

13. Állítás. *Legyenek $|\psi\rangle$ és $|\phi\rangle$ egy n részrendszerből álló rendszer tiszta állapotai. Ekkor $|\psi\rangle$ átvihető SLOCC művelettel $|\phi\rangle$ -be, ha $|\psi\rangle$ átvihető LOCC művelettel egy olyan kevert állapotba, ami nem nulla konvex kombinációs együtthatóval tartalmazza a $|\phi\rangle$ állapotot.*

Belátható, hogy ha $|\psi\rangle$ átvihető SLOCC-cal $|\phi\rangle$ -be, akkor ez visszafelé is igaz. Bevezethetünk egy új $\stackrel{SLOCC}{\sim}$ ekvivalencia relációt, ami akkor tekint két tiszta állapotot SLOCC ekvivalensnek, ha az egyik átvihető a másikba SLOCC művelettel. Ez alapján beszélhetünk SLOCC ekvivalencia osztályokról.

14. Állítás. *Legyenek $|\psi\rangle$ és $|\phi\rangle$ egy n részrendszerből álló rendszer állapotai. Ekkor igaz, hogy pontosan azok az állapotok SLOCC ekvivalensek, amik egy normálási faktortól eltekintve lokálisan invariánsak az egy determinánsú lineáris csoportra ($\text{Sl}(\mathcal{H})$), vagyis igaz, hogy*

$$|\psi\rangle = \frac{S_1 \otimes S_2 \otimes \dots \otimes S_n |\phi\rangle}{\|S_1 \otimes S_2 \otimes \dots \otimes S_n |\phi\rangle\|},$$

ahol $S_i \in \text{Sl}(\mathcal{H}^i)$.

Két qubit esetén két SLOCC ekvivalencia osztály van, a szeparálhatók és az összefonódottak. Minden ekvivalencia osztályból választhatunk egy reprezentánst. A szeparálhatók közül ilyen például a $|00\rangle$, az összefonódottak közül pedig valamelyik Bell-állapot, például a $|\phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$.

Három qubit esetén hat ekvivalencia osztály van²⁹. Az első a szeparábilisek osztálya, a következő három osztály a biszeparábilisek osztálya (amik két részrendszerre szeparálhatók), a maradék két osztály pedig két nem szeparálható osztály. Az osztályok reprezentánsai a következők:

1. $|00\rangle$ (Szeptarábilisek osztálya)
2. $\frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |110\rangle)$ (C-AB biszeptarábilisek osztálya)
3. $\frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |101\rangle)$ (B-CA biszeptarábilisek osztálya)
4. $\frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |011\rangle)$ (A-BC biszeptarábilisek osztálya)
5. $|W\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|001\rangle + |010\rangle + |100\rangle)$ (A $|W\rangle$ állapot osztálya)
6. $|\text{GHZ}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |111\rangle)$ (A Greenberger-Horne-Zeilinger állapot osztálya)

²⁹Három qubit SLOCC ekvivalencia osztályairól bővebben olvashatunk [13]-ban.

A 2.,3.,4. osztályokban található állapotok azért biszeparábilisek, mert kiemelhető a $|\phi^+\rangle$ állapot, ami két részrendszerre összefonódott.

A τ összefonódási mértékekre ezen osztályok esetén igazak az alábbiak:

	τ_{A-BC}	τ_{B-CA}	τ_{C-AB}	τ_{ABC}
A-B-C	0	0	0	0
A-BC	0	$\neq 0$	$\neq 0$	0
B-CA	$\neq 0$	0	$\neq 0$	0
C-AB	$\neq 0$	$\neq 0$	0	0
W	$\neq 0$	$\neq 0$	$\neq 0$	0
GHZ	$\neq 0$	$\neq 0$	$\neq 0$	$\neq 0$

Az összefonódás szempontjából kitüntetett szerepet kap az, hogy különbséget tegyünk a GHZ és a W osztálybeli tiszta állapotok közt, ezért a dolgozatomban nagy hangsúlyt helyeztem arra, hogy a $|W\rangle$ és a $|GHZ\rangle$ állapotokat vizsgáljam, mint az osztályok reprezentánsait. Választhattam volna egyéb reprezentánsokat, de az irodalom ezekkel az állapotokkal többen foglalkozott, és ezért alkalmam nyílik néhány korábbi eredménnyel összevetni a számolásaim.

A kevert állapotok osztályozását a [14]-ban adták meg. Ehhez az állapotok 3.4.2. fejezetben megadott k -szeparálható és α_k -szeparálható részhalmazai mellé három qubit esetén definiáljuk még a $\mathcal{D}_3^W$ halmazt, mely a 2-szeparálható és a W osztályba tartozó tiszta állapotok konvex burka. Az összes állapot halmazát analóg módon $\mathcal{D}_3^{GHZ}$ -nak jelöljük. Ekkor igaz az alábbi tartalmazás:

$$\mathcal{D}_3^{3-szep} \subset \mathcal{D}_3^{2-szep} \subset \mathcal{D}_3^W \subset \mathcal{D}_3^{GHZ} \equiv \mathcal{D}_3$$

Ekkor a kevert három qubit állapotok esetén ezek az osztályok invariánsak lesznek lokális invertálható transzformációkra.

15. Állítás. *Egy ρ három qubites állapot pontosan akkor $\rho \in \mathcal{D}_3^W$, ha $\tau_{ABC}(\rho) = 0$.*

5. Három qubites állapotok összefonódásának numerikus vizsgálata

5.1. A LibCreme programcsomag használata és kiegészítései

Láttuk, hogy a korábban általános három qubitre definiált³⁰ τ_{AB}, τ_{A-BC} és τ_{ABC} mennyiségek jó összefonódási mértékek, ezért ezeket a mennyiségeket számoltam ki

³⁰a (16),(17) és (18) egyenletekben definiált mennyiségek

néhány kevert állapotra. Mindig három állapot konvex kombinációját vettem, ami a teljes állapottér egy konvex két dimenziós szelete. A konvex kombináció a három paraméteren add egy kényszert, így egy ilyen általánosan kevert állapot két paraméterrel jellemezhető. Ezen a kétdimenziós paraméterterén ábrázoltam a számolt mértékeket úgy, hogy a sík két Descartes-koordinátája a két paraméter. Így az értelmezési tartomány egy háromszög a konvex kombinációs kényszer miatt.

A τ_{A-BC} és τ_{ABC} mennyiségeket konvex-roof kiterjesztéssel definiáltuk (12), és ezek kiszámolásához a Matlab programot használtam kiegészítve LibCreme programcsomaggal ([9]).

A LibCreme programcsomag úgy működik, hogy konjugált gradiens módszerrel minimalizál a különböző diadikus felbontásokra, amit iterációval végez addig, amíg a felbontás, vagy a függvény érték, vagy a függvény érték gradiense nem változik egy határon túl. Ezt a határt nevezem tolerancia szintnek. Ez esetben a program úgy tekinti, hogy az iteráció bekonvergált egy pontra, és az így kapott függvényértékkel tér vissza. Ha az iteráció meghalad egy kezdetben beállított számot, akkor a program visszatér azzal, hogy nem sikerült a minimalizálás határértékét megtalálnia. Még egy lehetséges visszatérési mód van, ha a konjugált gradiens módszer nem tudott további haladást elérni, annak ellenére, hogy nem konvergált. Ekkor egy hibás értékkel tér vissza.

A LibCreme program készítői a τ_{ABC} mennyiségen tesztelték a programcsomagot, így ez a mennyiség már le volt programozva, viszont ők csak két rangú állapotra tesztelték. Az általam vizsgált állapotok viszont akár nyolc rangúak is voltak, ezért némi módosításra szorult a programcsomag. Meg kellett növelni az iteráció számát, mert egyes pontoknál sokkal lassabban konvergált. Az iterációnál a sűrűségmátrix egy kezdő diadikus felbontásból indultunk ki, amit 2π szórású és 0 várható értékű normális eloszlás által generált pszeudo-véletlen számok definiáltak. Előfordult, hogy lokális minimumot talált globális minimum helyett. Ekkor a véletlen kezdést kihasználva, azonos pontokon, különböző számolásokra előfordult, hogy más eredményt kaptam. Ezért minden pontot négyszer, esetekben nyolcszor számoltam ki, és a különböző függvényértékeknek vettem a minimumát.

A 10^{-8} -nál kisebb függvényértékeket nullának tekintettem, és leállítottam az iterációt. Az iteráció tolerancia szintjét is lecsökkentettem a véges gépidő miatt, mert a számolásokat a saját gépemen végeztem, és némelyik mennyiséget a teljes paraméterterén több mint egy napig számolta.

Mivel néhány állapotnál sokkal nagyobb valószínűséggel jött elő olyan eset, ahol az iterálás sikertelen volt, ezért ilyenkor a minimalizálást újratekinttem maximum annyiszor, amit egy általam meghatározott (tipikusan 6) felső korlát szabott meg.

Ez az újratekés a korábban említett globális minimum keresésétől független volt.

Előfordult, hogy a függvény értéke az iterálás során értelmezhetetlen lett, amit a Matlab NaN-nak jelölt (Not-A-Number, ami tipikusan nullával való osztásnál fordul elő). Ilyenkor leállítottam az iterálást, és újratekédtem, mert az iteráció további haladást már nem tud ilyenkor elérni.

A τ_{AB} típusú mennyiségeknél nem volt szükség konvex-roof kiterjesztésre, így azokat a LibCreme programcsomag nélkül programoztam le és számoltam ki. A τ_{A-BC} típusú mennyiségeknél szükség volt a parciális nyom elvégzésére, amit egzaktul számoltam ki. Egy $|\psi\rangle = \sum_{i=0}^1 \sum_{j=0}^1 \psi_{ijk} |i\rangle |j\rangle |k\rangle$ tiszta állapot esetén

$$\begin{aligned} \tau_{A-BC}(\psi) &= 4 \det \rho_A = \\ &= (|\psi_{000}|^2 + |\psi_{001}|^2 + |\psi_{010}|^2 + |\psi_{011}|^2) (|\psi_{100}|^2 + |\psi_{101}|^2 + |\psi_{110}|^2 + |\psi_{111}|^2) - \\ &(\psi_{000}\psi_{100}^* + \psi_{001}\psi_{101}^* + \psi_{010}\psi_{110}^* + \psi_{011}\psi_{111}^*) (\psi_{000}^*\psi_{100} + \psi_{001}^*\psi_{101} + \psi_{010}^*\psi_{110} + \psi_{011}^*\psi_{111}) \end{aligned}$$

Szükség volt még a τ_{A-BC} gradiensére, ami a $\text{Re}\psi_{ijk}$ és $\text{Im}\psi_{ijk}$ változók szerinti deriválásból áll. Ezt szintén egzaktul számoltam ki. A τ_{B-CA} és τ_{C-AB} mértékekre hasonlóan jártam el.

Készítettem egy összefoglaló programot, ami bemenő paraméterként megkapja a három állapotot, aminek veszi a konvex kombinációit, és szintén bemenő paraméterként kapja azt az értéket, hogy milyen sűrű legyen a felosztása a paraméterternek, ahol mintavételez.

5.2. Az számolási eredmények és interpretációi

Öt különböző módon kevertem össze állapotokat és számoltam ki az összefonódásokat.

5.2.1. A $|\text{GHZ}\rangle$, $|\text{W}\rangle$ és $I/8$ állapotok keverése

Ahogy már említettük a GHZ és W állapotok két különböző $SLOCC$ osztályból származó állapotok, így két különböző típusú összefonódással rendelkeznek. Az őket jellemző mértékek:

	τ_{AB}	τ_{A-BC}	τ_{ABC}
$ \text{GHZ}\rangle$	0	1	1
$ \text{W}\rangle$	$\frac{4}{9}$	$\frac{8}{9}$	0

A $|\text{GHZ}\rangle$ és $|\text{W}\rangle$ állapotok konvex keverését expliciten kiszámolták [11]-ben. Én az $I/8$ maximálisan kevert³¹, teljesen szeparábilis állapottal kevertem a $|\text{GHZ}\rangle$ és

³¹Az identitással arányos állapotot fehér zajnak is szokták nevezni.

$|W\rangle$ állapotokat. Mivel bármilyen keverés mellett a részrendszerek permutációjára invariáns az állapot, ezért elég csak a τ_{AB} -t, τ_{A-BC} -t és τ_{ABC} -t kiszámolni. A 3. ábrán látható a számolt τ_{AB} mennyiség³². Csak a $|W\rangle$ állapot közelében nem nulla, a $|GHZ\rangle$ és az $I/8$ állapotok közelében nulla.

A τ_{A-BC} mennyiség a 4. ábrán látható. Igaz, hogy az A részrendszer mind a $|W\rangle$, mind a $|GHZ\rangle$ állapotoknál össze van fonódva a másik kettővel, és a permutációinvariancia miatt ugyanez igaz a másik két részrendszerre is. Ott nulla ez az érték, ahol az $I/8$ állapot "dominál" a másik kettőhöz képest. Ahol $g + w = 1$, vagyis az $I/8$ állapot konvex kombinációs együtthatója nulla, kis numerikus eltérésektől eltekintve visszakapjuk a [11]-ben közölt értéket. Az a tartomány, ahol τ_{A-BC} nulla, körülbelül egy $0 \leq g \leq 0,2$ és $0 \leq w \leq 0,2$ négyzet alakú tartomány. Tehát ez a tartomány a permutációinvariancia miatt mondhatjuk, hogy a 3.4.2. alfejezetben tárgyalt osztályok közül vagy a 3. vagy a 2.8. osztályban található, vagyis a $\mathcal{D}_3^{A-BC} \cap \mathcal{D}_3^{B-CA} \cap \mathcal{D}_3^{C-AB}$ része, mivel itt minden τ összefonódásuk nulla. Azon a tartományon pedig, ahol τ_{A-BC} nem nulla, ott 2.1 vagy 1. osztálybeli állapotokat kapunk.

A harmadik jellemző összefonódási mérték a τ_{ABC} , ami az 5. ábrán látható. Jól látszik, hogy csak a $|GHZ\rangle$ állapot körül lesz nem nulla, és a g paraméterrel szigorúan monoton nő. Tehát ahol nem nulla a τ_{ABC} , ott $\mathcal{D}_3^{GHZ} \setminus \mathcal{D}_3^W$ halmazbeli állapotokat kapunk. Ha tekintjük a két szélsőséges paraméterezést, amikor csak a $|W\rangle$ és $|GHZ\rangle$, vagy csak az $I/8$ és $|GHZ\rangle$ állapotok keverékét vesszük, akkor azt vesszük észre, hogy a $|W\rangle$ állapottal alacsonyabb g paraméter értéknél lesz a τ_{ABC} nem nulla. Tehát nem csupán az számít, hogy mennyi a $|GHZ\rangle$ állapot konvex kombinációs együtthatója, hanem az is, hogy milyen más állapotok vannak mellette, még akkor is ha ennek a másik állapotnak a τ_{ABC} mennyisége nulla. Itt is visszakapjuk $g + w = 1$ esetről a [11]-ben közölt értéket.

Érdekes kérdés lehet még megvizsgálni a (19) egyenlőtlenséget kevert állapotokra. A 6. ábrán látható a $\tau_{A-CB} - \tau_{AB} - \tau_{AC} - \tau_{ABC}$ mennyiség a g és w paraméterek függvényében. Jól látható, hogy a 6. ábra sehol se negatív és a korábban megállapított $\mathcal{D}_3^{A-BC} \cap \mathcal{D}_3^{B-CA} \cap \mathcal{D}_3^{C-AB}$ résztartományán kívül csak a tiszta $|GHZ\rangle$ állapotnál nulla. Ez azt jelenti, hogy más mennyiségek is közrejátszanak az A részrendszer a másik kettővel vett összefonódása során, amit még kevert állapotokra nem sikerült megtalálni. Fontos kritérium lenne olyan mennyiségekkel kifejezni τ_{A-BC} -t, amik szintén $LOCC$ monotonok és létezik fizikai jelentésük.

³²Az ábrák a függelékben találhatók.

5.2.2. A $(|011\rangle + |101\rangle + |110\rangle)/\sqrt{3}$, $|W\rangle$ és $|GHZ\rangle$ állapotok keverése

Legyen $|\nu\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|011\rangle + |101\rangle + |110\rangle)$, ami lokálisan unitér transzformációkkal áttranszformálható $|W\rangle$ -be. Ekkor a 12. állítás miatt ugyanabba a *LOCC* ekvivalencia osztályba tartoznak, így a τ összefonódási mértékek ugyanazok. A következőkben kiszámoltam a τ összefonódási mértékeket ennek a három állapotnak keverésére. Mivel ez az állapot is permutáció invariáns, ezért itt is elég a τ_{AB} , τ_{A-BC} és τ_{ABC} mennyiségekkel foglalkozni.

A 7. ábrán látható a τ_{AB} mennyiség. Látszik a két paraméter szerinti szimmetrikusság és az, hogy a $|GHZ\rangle$ állapot környezetében nulla a τ_{AB} .

A 8. ábrán a τ_{A-BC} mennyiség látható. Itt is jól látszik a szimmetrikusság, továbbá sehol se tűnik el a τ_{A-BC} mennyiség, ami azt jelenti, hogy ezek $\mathcal{D}_3^{GHZ} \setminus \mathcal{D}_3^W$, vagy $\mathcal{D}_3^W \setminus \mathcal{D}_3^{2-sep}$ halmazbeli, vagy a 2.1 osztálybeli állapotok, attól függően, hogy τ_{ABC} hol nulla. Ez a mennyiség a 9. ábrán található. Ahol $\tau_{ABC} = 0$, ott az állapot vagy $\mathcal{D}_3^W \setminus \mathcal{D}_3^{2-sep}$ halmazbeli, vagy a 2.1 osztálybeli, ahol pedig $\tau_{ABC} \neq 0$, azok az állapotok biztos, hogy $\mathcal{D}_3^{GHZ} \setminus \mathcal{D}_3^W$ halmazbeliek.

5.2.3. A $|GHZ\rangle$, $|W\rangle$ és $|0\rangle|\psi^-\rangle$ állapotok keverése

A $|0\rangle|\psi^-\rangle$ egy $A - BC$ szeparálható állapot, ahol $|\psi^-\rangle$ a (4) egyenletben definiált Bell-állapot, ami a két részrendszerében maximálisan összefonódott. A részrendszerek nem mind permutáció invariánsak, csak a B és C részrendszerek sűrűségmátrix reprezentációban, hiszen a $|0\rangle|\psi^-\rangle$ vektor egy -1 -es fázist vesz fel a B és C részrendszerek felcserélése esetén. A 10. ábrán látható a τ_{A-BC} , a 11. ábrán pedig a τ_{C-AB} mennyiség. Ezen ábrák alapján mondhatjuk, hogy egyedül a $g = 0$ és $w = 0$ pontban biszeparálható az egyik rendszer esetén a vizsgált kétparaméteres állapot, vagyis ez része a 2.2 osztálynak. Ez a tiszta $|0\rangle|\psi^-\rangle$ állapot. A többi értéknél vagy a 2.1 osztály része, vagy pedig az 1. osztály része, amin belül, még lehet a $\mathcal{D}_3^W$ osztály része is, attól függően, hogy τ_{ABC} –amit a 12. ábrán láthatunk– hol nulla és hol nem.

5.2.4. A $|0_A\rangle|\phi_{BC}^+\rangle$, $|0_B\rangle|\phi_{CA}^+\rangle$ és $|0_C\rangle|\phi_{AB}^+\rangle$ állapotok keverése

Tekintsük a $|\phi^+\rangle$ Bell-állapot és a $|0\rangle$ állapot permutációit. Az így megadott három vektor általános keverés mellett nem permutációinvariáns, de az egyenletes keverésnél igen. Ezek az állapotok definíció szerint $\mathcal{D}_3^{2-sep}$ halmaz részei, tehát igaz rájuk, hogy a τ_{ABC} mennyiség nulla. A 13. ábra mutatja a τ_{A-BC} , a 14. ábra mutatja a τ_{B-CA} és a 15. ábra mutatja a τ_{C-AB} mennyiséget. Az ábrák alapján azt mondhatjuk, hogy a keverésünk konvex halmazainak az extrémális pontjai természetesen biszeparálhatók, de az összes többi pontja a 2.1 osztályban van, mert se τ_{A-BC} , se

τ_{B-CA} , se τ_{C-AB} nem nulla, és definíció szerint $\mathcal{D}_3^{2-sep}$ részei.

5.2.5. A $|\text{GHZ}\rangle$, $|\text{W}\rangle$ és $\mathcal{B}$ állapotok keverése

Legyen $\mathcal{B}$ a $|0_A\rangle|\phi_{BC}^+\rangle$, $|0_B\rangle|\phi_{CA}^+\rangle$ és $|0_C\rangle|\phi_{AB}^+\rangle$ állapotok egyenletes keverése, ahol mindegyiket $\frac{1}{3}$ konvex kombinációs együthatóval tekintjük. Látszik, hogy $\mathcal{B}$ állapot permutációinvariáns, ezért $\tau_{A-BC}(\mathcal{B}) = \tau_{B-CA}(\mathcal{B}) = \tau_{C-AB}(\mathcal{B})$. Utoljára ezt az állapotot kevertem a $|\text{GHZ}\rangle$ és $|\text{W}\rangle$ állapotokkal, ami így bármilyen keverés mellett permutáció invariáns, vagyis elég csak a τ_{ABC} , τ_{A-BC} és τ_{AB} mennyiségeket vizsgálni. A 16. ábrán látható a τ_{A-BC} mennyiség. Ez sehol sem nulla, ami azt jelenti, hogy az állapot vagy a 2.1 vagy az 1. osztályban van. Az 1. osztályon belül pedig itt is, hogy $\mathcal{D}_3^W$ osztály része-e, a τ_{ABC} mennyiség dönti el, ami a 17. ábrán látható.

6. Végző

A dolgozatban bemutatott elméleti háttér –úgy, mint az összefonódási mértékek, és az állapotok osztályozása– és a partikuláris számítások szépen illusztrálják, hogy egy olyan "egyszerű" kvantummechanikai rendszer, mint a három qubites is az összefonódás meglepően tág és színes vonatkozásaival rendelkezik.

Továbbiakban lehetne még foglalkozni az általam bemutatott kétparaméteres állapot szeparabilitási családok osztályba tartozásának pontosításával, hiszen azok az összefonódási mértékek –amiket számoltam– nem mindenhol egyértelműsítették ezt. Másik kutatási irány lehetne az irodalomból ismert szeparabilitási kritériumok alkalmazásával vizsgálni ezeknek az állapotoknak a különböző szeparabilitási osztályait.

Érdekes és jóval nehezebb kérdés, hogy létezik-e kevert állapotok különböző részrendszereinek összefonódását jellemző összefonódási mértékei közt fennálló összefüggés, vagy függetlenek egymástól. A dolgozatomban mutattam példát arra, hogy kevert állapotok esetén a τ összefonódási mértékek közt nincs olyan egyenlőség, mint a tiszta állapotok esetén.

Köszönetet szeretnék mondani Szalay Szilárdnak a dolgozat elkészítésében való segítségéért.

Hivatkozások

- [1] Petz D., *Lineáris analízis* Műegyetemi Kiadó, Budapest, 2001.
- [2] Pitowsky, I., *Quantum Probability-Quantum Logic*, Lecture Notes in Physics 321, Springer, 1989
- [3] I. Bengtsson, K. Życzkowski, *Geometry of Quantum States*, Cambridge University Press, Cambridge, 2006
- [4] Nielsen, M. A., és I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press, Cambridge, 2000
- [5] Neumann J., *A kvantummechanika matematikai alapjai* Akadémiai kiadó, Budapest, 1932
- [6] William K. Wootters, "Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits", *Phys. Rev. Lett.*, 80, 2245 (1998)
- [7] Szalay Szilárd, "A study of separability criteria for mixed three-qubit states", *Phys. Rev. A* 83, 062337, 2011, eprint: arXiv, 1101.3256 [quant-ph]
- [8] V. Coffman, J. Kundu, és W. K. Wootters, "Distributed entanglement" *Phys. Rev. A* 61, 052306 (2000).
- [9] B. Röthlisberger, J. Lehmann, és D. Loss, "libCreme: An optimization library for evaluating convex-roof entanglement measures" eprint: arXiv, 1107.4497v1 [quant-ph]
- [10] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, K. Horodecki "Quantum entanglement" 2009, *Rev. Mod. Phys.* 81:865-942, eprint: arXiv, 0702225v2 [quant-ph] (2007)
- [11] R. Lohmayer, A. Osterloh, J. Siewert és A. Uhlmann "Entangled Three-Qubit States without Concurrence and Three-Tangle", *Phys. Rev. Lett.* 97, 260502 (2006)
- [12] M. A. Nielsen, "Condition for a Class of Entanglement Transformations", *Phys. Rev. Lett.* 83, 436 (1999)
- [13] W. Dür, G. Vidal és J. I. Cirac "Three qubits can be entangled in two inequivalent ways", *Phys. Rev. A*, 62, 062314

- [14] A. Acin, D. Bruß, M. Lewenstein és A Sanpera, "Classification of Mixed Three-Qubit States", *Phys. Rev. Lett.* 87, 040401 (2001)

A. Függelék

A.1. Az 1. tétel bizonyítása

Legyen $\Gamma = \rho_{12} - \rho_1 \otimes \rho_2$. Látszik, hogy $\text{Tr}\Gamma = 0$, $\text{Tr}_1\Gamma = 0_2$, $\text{Tr}_2\Gamma = 0_1$ és $\Gamma^\dagger = \Gamma$. Legyen $\rho_1 = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ tiszta állapotban, ekkor $\rho_{12} = |\varphi\rangle\langle\varphi| \otimes \rho_2 + \Gamma \geq 0$. Ekkor $\forall \varphi_\perp \in \mathcal{H}^{(1)}$, $\langle\varphi|\varphi_\perp\rangle = 0$ -ra és $\forall \psi \in \mathcal{H}^{(2)}$ -re igaz, hogy

$$\begin{aligned} \langle\varphi_\perp \otimes \psi|\rho_{12}(\varphi_\perp \otimes \psi)\rangle &= \langle\varphi_\perp|\varphi\rangle\langle\varphi|\varphi_\perp\rangle\langle\psi|\rho_2\psi\rangle + \langle\varphi_\perp \otimes \psi|\Gamma(\varphi_\perp \otimes \psi)\rangle = \\ &= \langle\varphi_\perp \otimes \psi|\Gamma(\varphi_\perp \otimes \psi)\rangle \geq 0. \end{aligned}$$

Tekintsük $\{e_i\} \in \mathcal{H}^{(1)}$ és $\{f_j\} \in \mathcal{H}^{(2)}$ ortonormált bázisokat. Ekkor

$$0 = \langle\varphi_\perp|0_1\varphi_\perp\rangle = \langle\varphi_\perp|\text{Tr}_2\Gamma\varphi_\perp\rangle = \sum_j \langle\varphi_\perp \otimes f_j|\Gamma(\varphi_\perp \otimes f_j)\rangle.$$

Mivel $\langle\varphi_\perp \otimes f_j|\Gamma(\varphi_\perp \otimes f_j)\rangle \geq 0$, $\forall f_j$, ezért $\langle\varphi_\perp \otimes \psi|\Gamma(\varphi_\perp \otimes \psi)\rangle = 0$, $\forall \psi$.

$$0 = \langle\psi|0_2\psi\rangle = \langle\psi|\text{Tr}_1\Gamma\psi\rangle = \sum_i \langle e_i \otimes \psi|\Gamma(e_i \otimes \psi)\rangle.$$

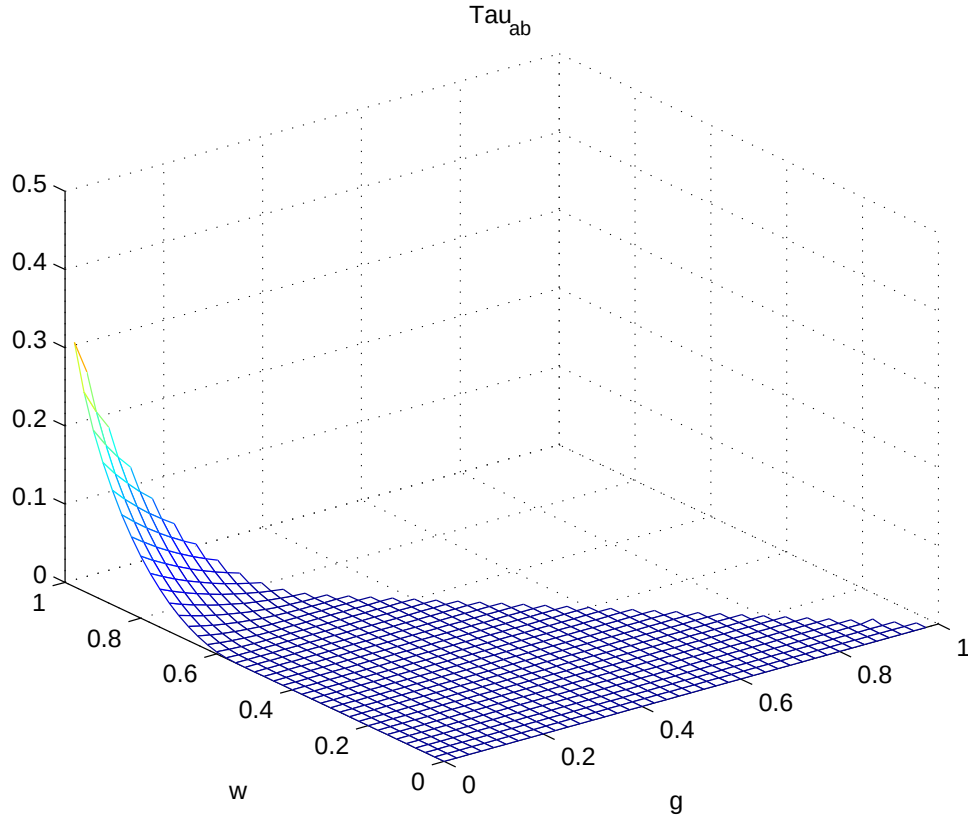
Kihasználva, hogy a φ által kifeszített altér komplementerére eltűnik a skalárszorzat tag, azt kapjuk, hogy

$$\langle\varphi \otimes \psi|\Gamma(\varphi \otimes \psi)\rangle = 0, \quad \forall \psi \in \mathcal{H}^{(2)}.$$

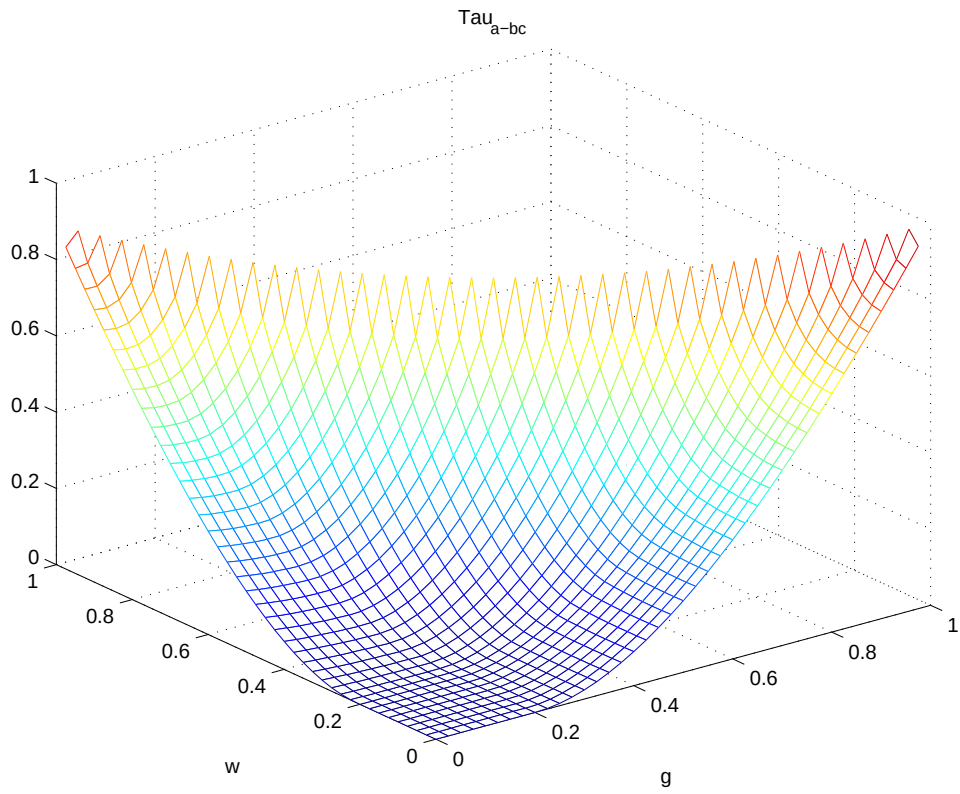
Mivel Γ önadjungált és összes sajátértéke nulla, ezért a spektrálfelbontásából látszik, hogy $\Gamma = 0$. Ezzel az állítást bizonyítottuk.

A.2. Számítási eredmények ábrái

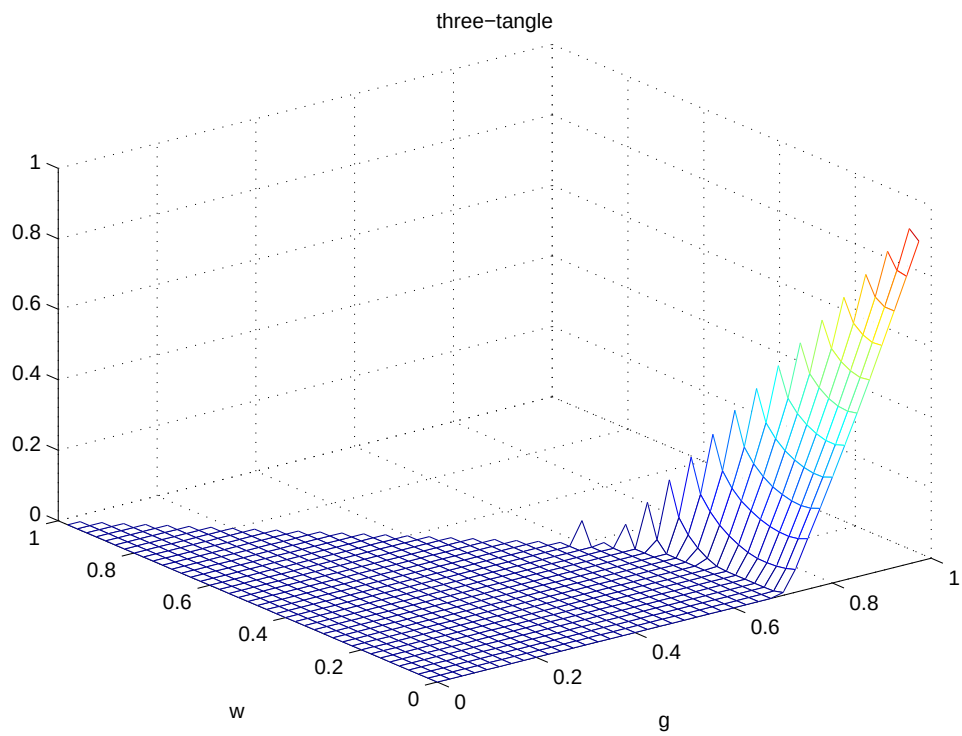
A.2.1. A $|\text{GHZ}\rangle$, $|\text{W}\rangle$ és $I/8$ állapotok keverése



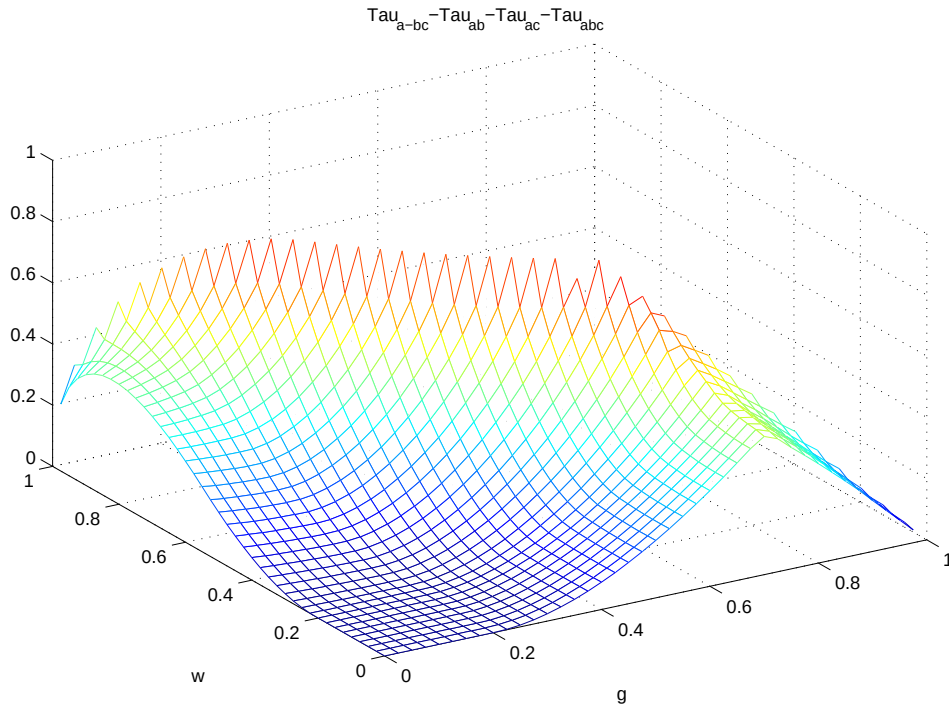
3. ábra. A τ_{AB} mennyiség a g és w paraméter függvényében, ahol g a $|\text{GHZ}\rangle$, w pedig a $|\text{W}\rangle$ állapot konvex kombinációs együtthatója és a harmadik állapot pedig az $I/8$.



4. ábra. A τ_{A-BC} mennyiség a g és w paraméter függvényében, ahol g a $|\text{GHZ}\rangle$, w pedig a $|\text{W}\rangle$ állapot konvex kombinációs együtthatója és a harmadik állapot pedig az $I/8$.

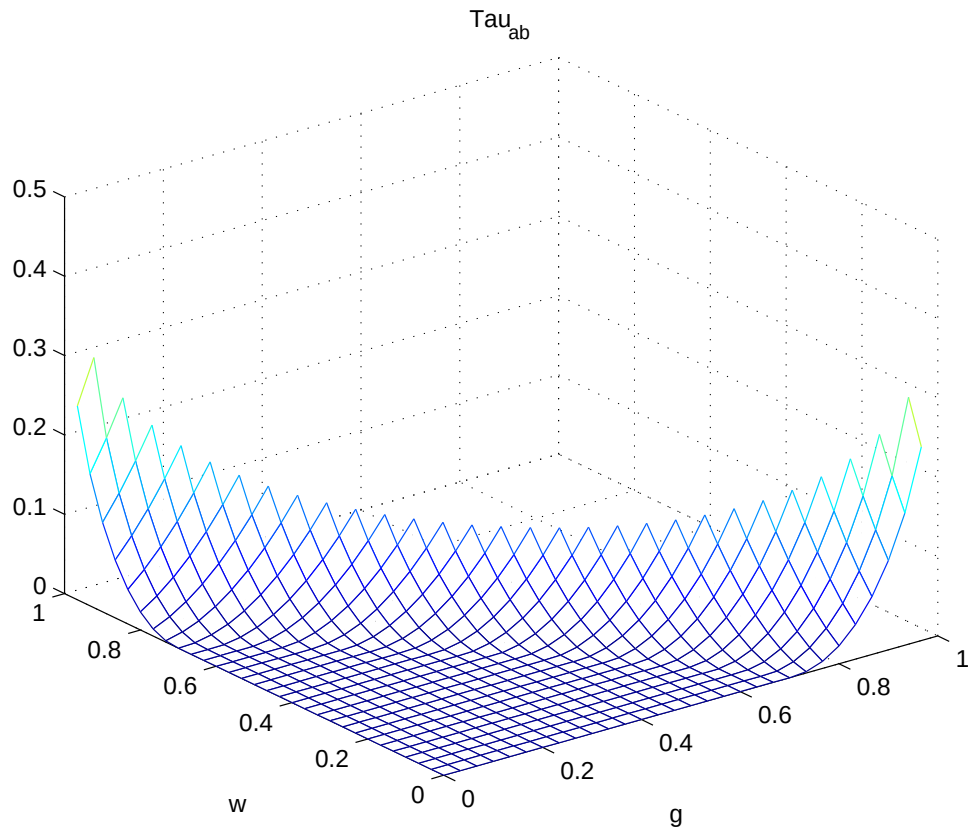


5. ábra. A τ_{ABC} mennyiség a g és w paraméter függvényében, ahol g a $|\text{GHZ}\rangle$, w pedig a $|\text{W}\rangle$ állapot konvex kombinációs együtthatója és a harmadik állapot pedig az $I/8$.

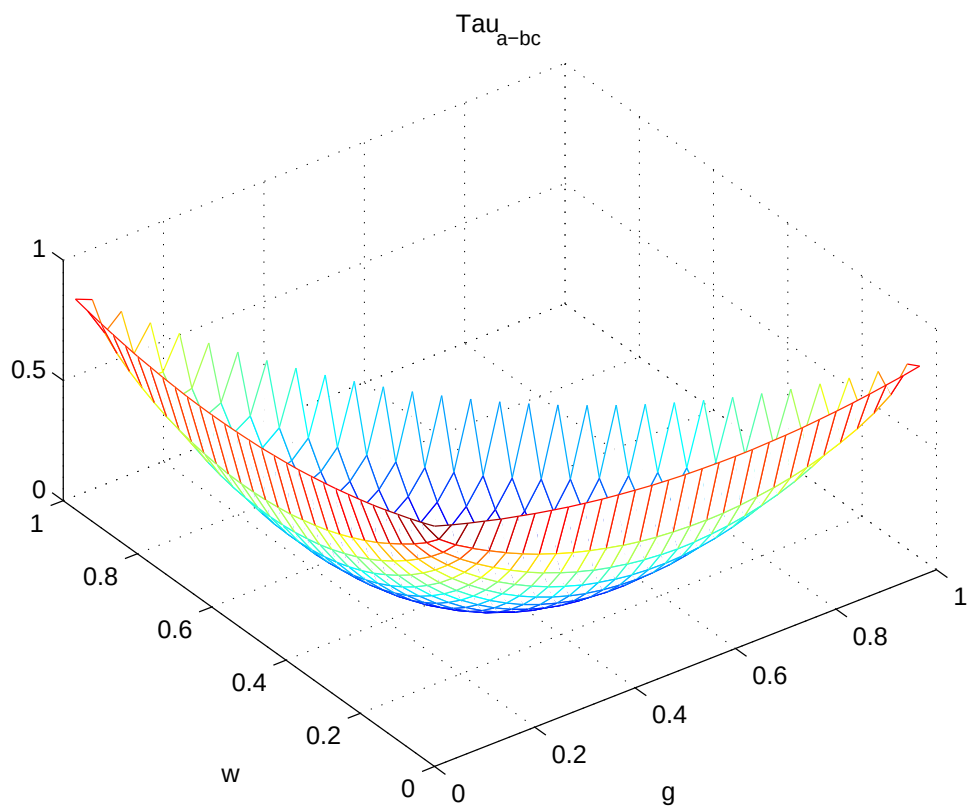


6. ábra. A $\tau_{A-BC} - \tau_{AB} - \tau_{AC} - \tau_{ABC}$ mennyiség a g és w paraméter függvényében, ahol g a $|\text{GHZ}\rangle$, w pedig a $|\text{W}\rangle$ állapot konvex kombinációs együtthatója és a harmadik állapot pedig az $I/8$.

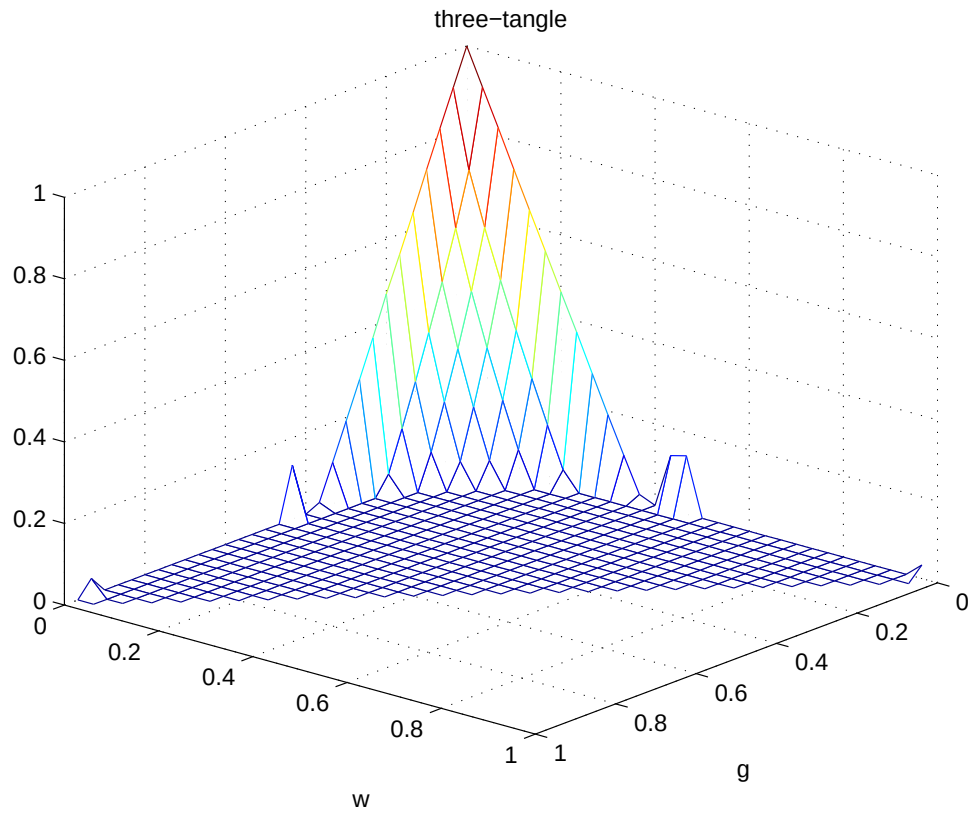
A.2.2. A $(|011\rangle + |101\rangle + |110\rangle)/\sqrt{3}$, $|W\rangle$ és $|GHZ\rangle$ állapotok keverése



7. ábra. A τ_{AB} mennyiség a g és w paraméter függvényében, ahol g a $|\nu\rangle$, w pedig a $|W\rangle$ állapot konvex kombinációs együtthatója és a harmadik állapot pedig a $|GHZ\rangle$.

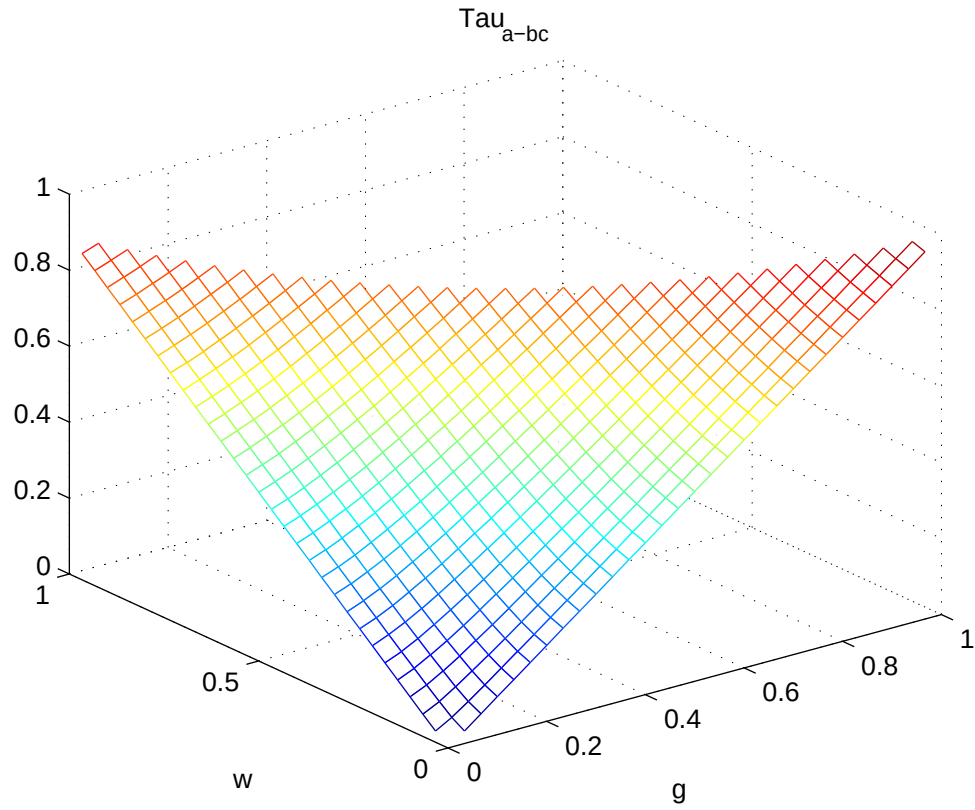


8. ábra. A τ_{A-BC} mennyiség a g és w paraméter függvényében, ahol g a $|\nu\rangle$, w pedig a $|W\rangle$ állapot konvex kombinációs együtthatója és a harmadik állapot pedig a $|GHZ\rangle$.

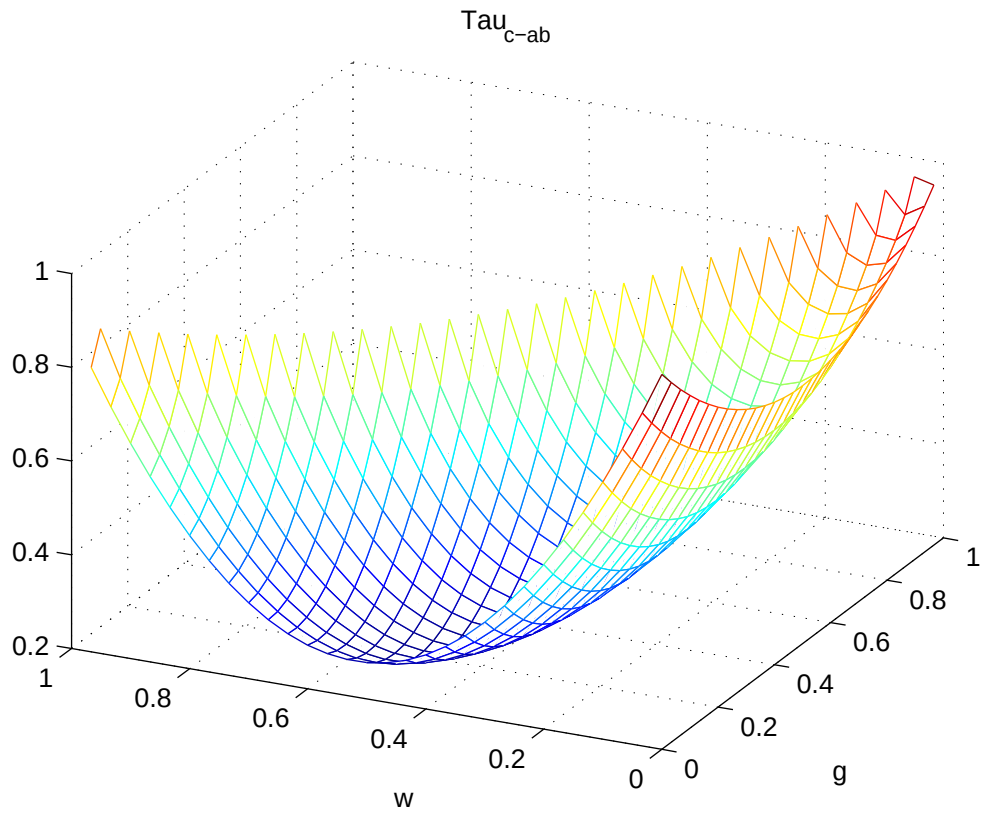


9. ábra. A τ_{ABC} mennyiség a g és w paraméter függvényében, ahol g a $|\nu\rangle$, w pedig a $|W\rangle$ állapot konvex kombinációs együtthatója és a harmadik állapot pedig a $|\text{GHZ}\rangle$.

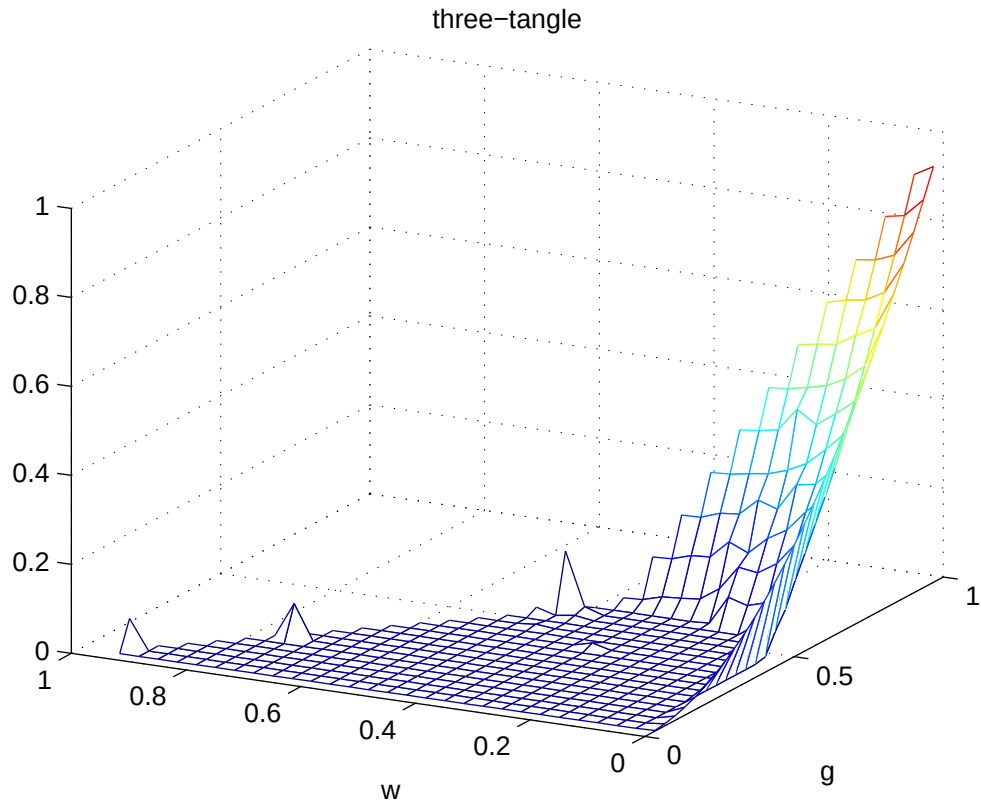
A.2.3. A $|\text{GHZ}\rangle$, $|\text{W}\rangle$ és $|0\rangle|\psi^-\rangle$ állapotok keverése



10. ábra. A τ_{A-BC} mennyiség a g és w paraméter függvényében, ahol g a $|\text{GHZ}\rangle$, w pedig a $|\text{W}\rangle$ állapot konvex kombinációs együtthatója és a harmadik állapot pedig a $|0\rangle|\psi^-\rangle$.

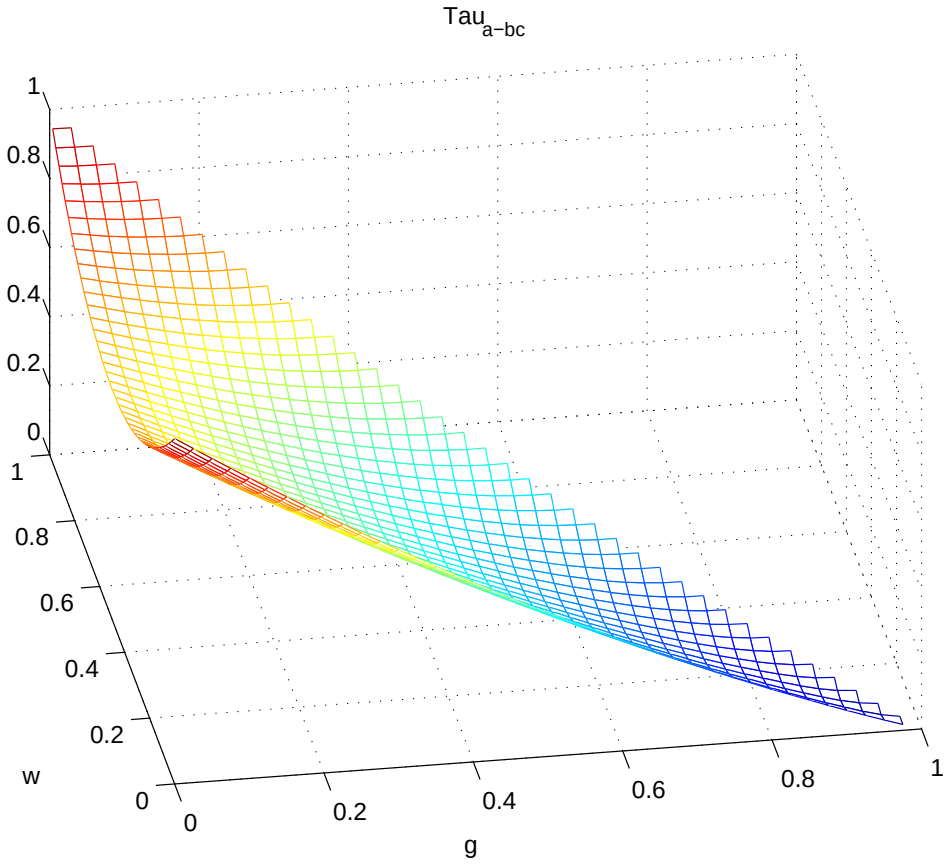


11. ábra. A τ_{C-AB} mennyiség a g és w paraméter függvényében, ahol g a $|\text{GHZ}\rangle$, w pedig a $|\text{W}\rangle$ állapot konvex kombinációs együtthatója és a harmadik állapot pedig a $|0\rangle|\psi^-\rangle$.

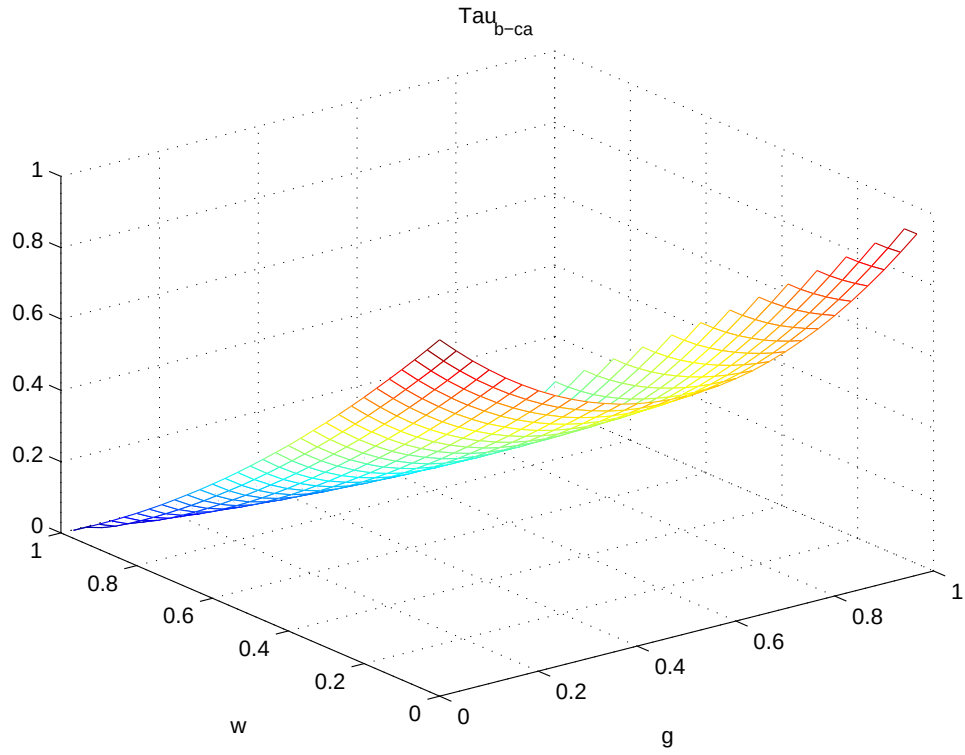


12. ábra. A τ_{ABC} mennyiség a g és w paraméter függvényében, ahol g a $|\text{GHZ}\rangle$, w pedig a $|\text{W}\rangle$ állapot konvex kombinációs együtthatója és a harmadik állapot pedig a $|0\rangle|\psi^-\rangle$.

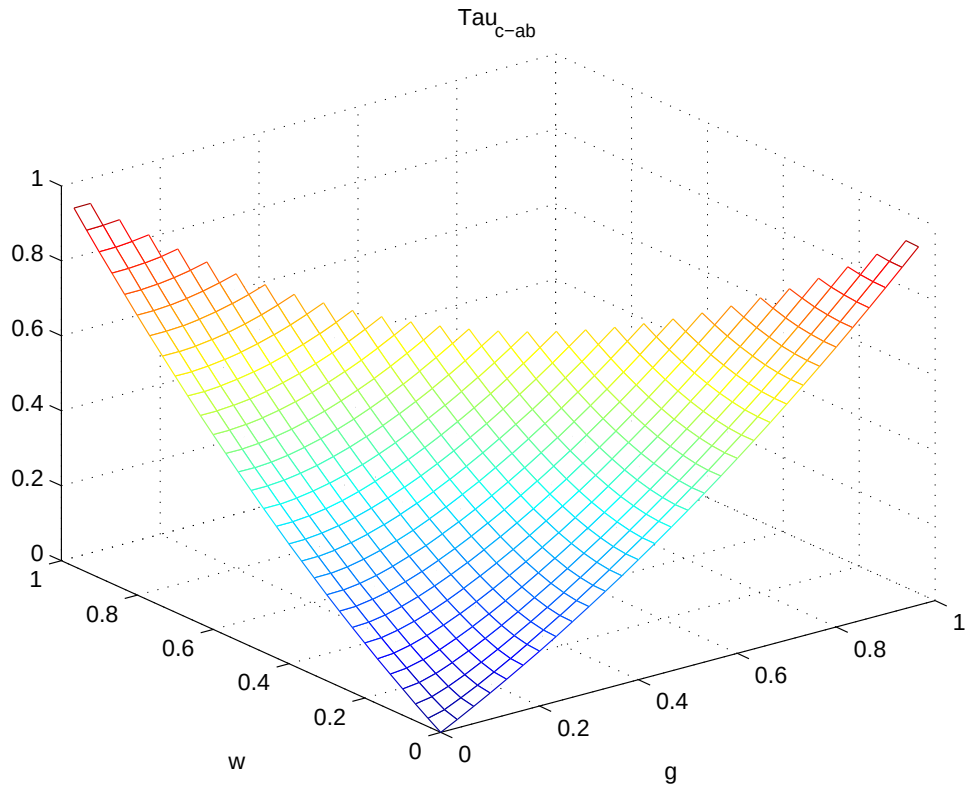
A.2.4. A $|0_A\rangle|\phi_{BC}^+\rangle$, $|0_B\rangle|\phi_{CA}^+\rangle$ és $|0_C\rangle|\phi_{AB}^+\rangle$ állapotok keverése



13. ábra. A τ_{A-BC} mennyiség a g és w paraméter függvényében, ahol g a $|0_A\rangle|\phi_{BC}^+\rangle$, w pedig a $|0_B\rangle|\phi_{CA}^+\rangle$ állapot konvex kombinációs együtthatója és a harmadik állapot pedig a $|0_C\rangle|\phi_{AB}^+\rangle$.

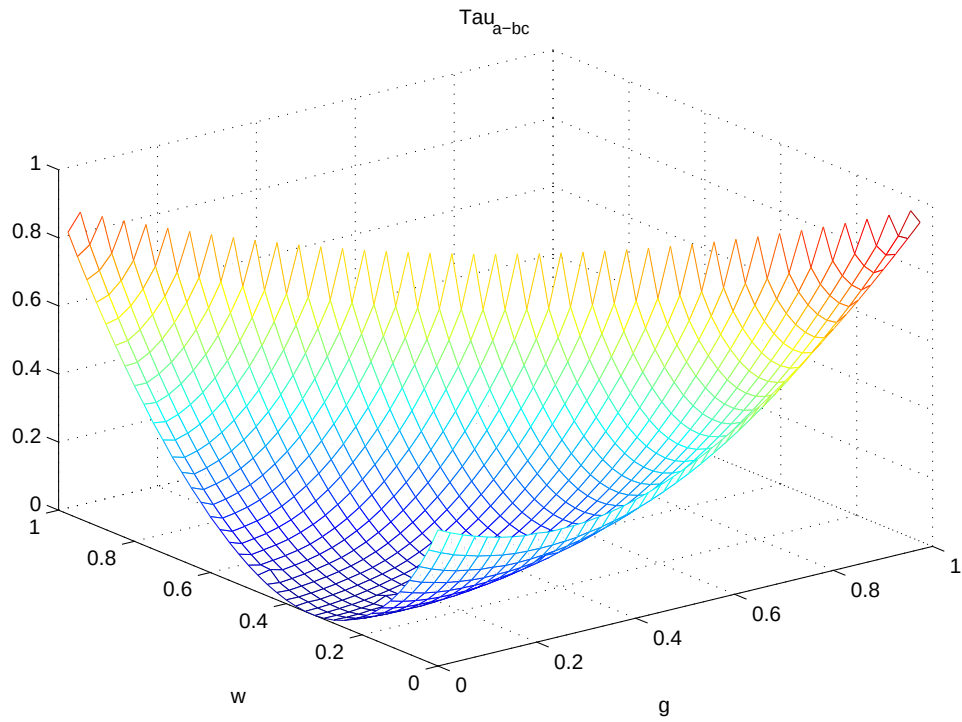


14. ábra. A τ_{B-CA} mennyiség a g és w paraméter függvényében, ahol g a $|0_A\rangle|\phi_{BC}^+\rangle$, w pedig a $|0_B\rangle|\phi_{CA}^+\rangle$ állapot konvex kombinációs együtthatója és a harmadik állapot pedig a $|0_C\rangle|\phi_{AB}^+\rangle$.

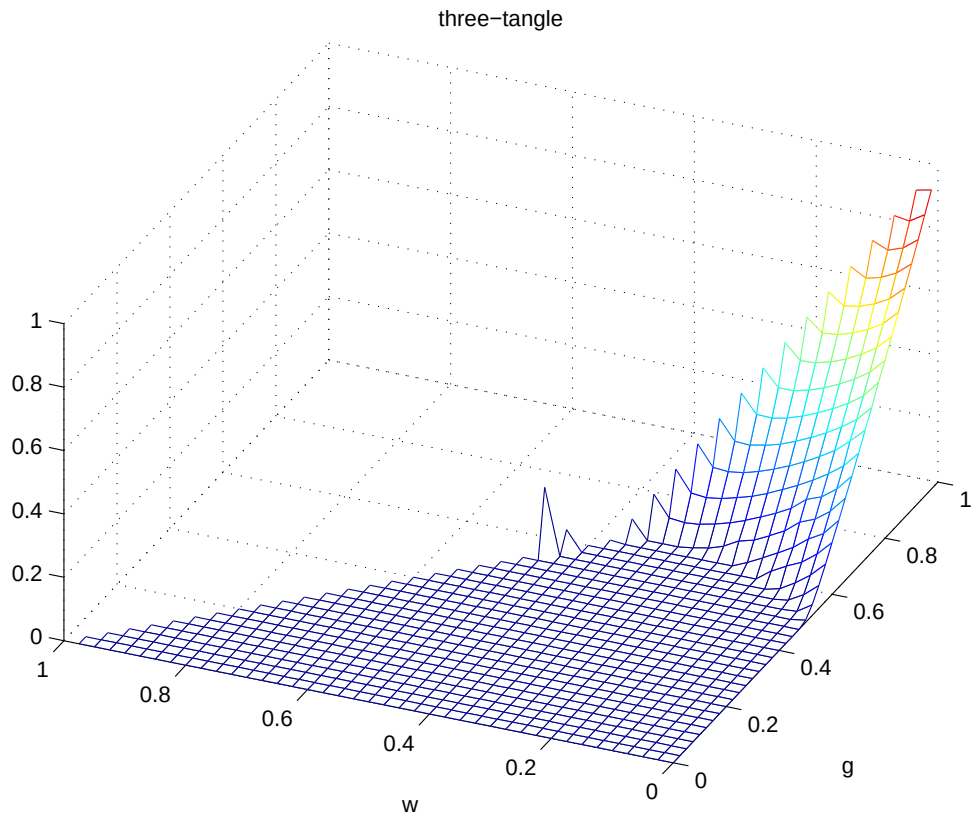


15. ábra. A τ_{C-AB} mennyiség a g és w paraméter függvényében, ahol g a $|0_A\rangle|\phi_{BC}^+\rangle$, w pedig a $|0_B\rangle|\phi_{CA}^+\rangle$ állapot konvex kombinációs együtthatója és a harmadik állapot pedig a $|0_C\rangle|\phi_{AB}^+\rangle$.

A.2.5. A $|\text{GHZ}\rangle$, $|\text{W}\rangle$ és $\mathcal{B}$ állapotok keverése



16. ábra. A τ_{A-BC} mennyiség a g és w paraméter függvényében, ahol g a $|\text{GHZ}\rangle$, w pedig a $|\text{W}\rangle$ állapot konvex kombinációs együtthatója és a harmadik állapot pedig a $\mathcal{B}$.



17. ábra. A τ_{ABC} mennyiség a g és w paraméter függvényében, ahol g a $|\text{GHZ}\rangle$, w pedig a $|\text{W}\rangle$ állapot konvex kombinációs együtthatója és a harmadik állapot pedig a $\mathcal{B}$.