



Szerkezeti entrópia és komplexitás vizsgálata
kvantum-rendszerekben
TDK-dolgozat, 2012/2013/I.

Németh Márton, BME Fizikus Msc. III. évf.

Témavezető: Dr. Varga Imre, docens, Elméleti Fizika Tanszék, BME

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés, módszerek	4
1.1. Információ-elméleti fogalmak	5
1.2. A komplexitás mérőszáma	6
1.3. Szerkezeti entrópia	8
1.4. Áttérés a folytonos eloszlásokra	10
1.5. Fázistér-beli vizsgálatok: Husimi- és Wigner-függvények	11
2. Eredmények	12
2.1. Dobozba zárt részecske	12
2.2. Harmonikus oszcillátor egy dimenzióban	14
2.3. A két-delta potenciál	17
2.4. Harmonikus oszcillátor három dimenzióban	21
2.5. Hidrogénatom	24
3. Kvantumoptikai alkalmazás	26
3.1. Koherens állapot	26
3.2. Schrödinger-macska állapot	27
3.3. A squeeze vákuum-állapot	29
3.4. Gerjesztett squeeze vákuum-állapotok	31
3.5. A Jaynes-Cummings modell	34
3.6. Újjáéledés (revival)	39
4. Kvantuminformatikai alkalmazás: A qubitek	40
4.1. Hamilton-operátor	42
4.2. 2- és 3-qubit	43
4.3. n -qubit, Werner-állapotok	44
4.4. Hibás qubit-kapuk	45
4.5. Zajjal terhelt csatorna	46
4.6. Depolarizáló-csatorna	47
4.7. Bit-flip-csatorna	48
5. Konklúzió	48
6. Irodalom	52

7. Függelék	54
7.1. Numerikus módszerek	54
7.2. Ábrák	56
7.3. Önállósági nyilatkozat	57
7.4. Ábrák jegyzéke	58

1. Bevezetés, módszerek

A fizika tudományának területén a komplexitás mérése jelentős kérdés, azonban általánosan elfogadott definíciója máig nem áll rendelkezésre. Egy általános komplexitás definícióra azért van szükség, mert az segít megérteni egyes modellek, fizikai rendszerek összetettségét, amivel képesek vagyunk megállapítani a rendszerben tárolt használható információ mennyiségét. Általánosságban elmondható, hogy a tudományterület azokat a rendszereket nevezi komplexnek, amelyek bonyolultak, illetve amelyek közötti kölcsönhatások sokrétűek, nehezen áttekinthető tulajdonságokkal rendelkeznek. A komplexitás objektív bevezetése ugyanakkor az azt mérő mennyiségen keresztül lehetséges. A mérőszámmal szemben elvárásokat támaszthatunk. Az elvárások egyik csoportját képezik a peremfeltételek, vagyis az az elvárás, hogy a mérőszám a legkisebb értékeit a legegyszerűbbnek vélt rendszerek esetén vegye fel. A másik csoportba olyan tulajdonságok tartoznak, amelyek a mérőszám viselkedését rögzítik a vizsgált rendszer valamilyen megváltoztatásával szemben. Az alábbi dolgozat célja egy olyan mérőszám megtalálása, amelyre teljesül a következő feltétel: több, diszjunkt, megegyező rendszer komplexitása, amelyek semmilyen hatással nincsenek egymásra, azonos egyetlen ilyen rendszer komplexitásával. Ilyen rendszert kapunk például, ha oszcillátorokat helyezünk el oly módon, hogy azok nem hatnak egymásra. Ebben az esetben azt várjuk el, hogy a teljes rendszer komplexitása ne tartalmazza az oszcillátorok számát. A komplexitást mérő számmal szemben további elvárásunk az a fent bemutatott peremfeltétel, hogy a legegyszerűbb rendszerek esetén értéke minimális legyen. A dolgozat további részében tárgyaljuk azt a kérdést, hogy mely rendszereket nevezünk általánosan legegyszerűbbnek. A dolgozat fontos célja továbbá, hogy a komplexitás definiálása és mérőszámának megállapítása révén vizsgálhatóvá váljon az információ mennyiségének környezet hatására történő csökkenése is. A hagyományos adattovábbítás, adattárolás diszkrét, kétállapotú rendszereken keresztül történik. Ezzel szemben a kvantummechanikai adattovábbítás és adattárolás olyan fizikai rendszereken keresztül valósul meg, amely két szélső állapota között bármilyen állapotot felvehet. Nyilvánvaló, hogy ez utóbbi adat-kezelés szignifikánsan több információt képes tárolni és feldolgozni. Egy ilyen rendszert nevezük kvantumszámítógépnek. A nehézséget az okozza, hogy a környezeti hatások a preparált fizikai rendszer információtartalmát gyorsan elmosás. A TDK-dolgozat éppen azzal foglalkozik, hogy az adat tárolása, optikai továbbítása közben környezeti hatásra miként tűnik el az információ használható (azaz szerkezeti) része a rendszerből. Fontos leszögezni, hogy információnak csak a szerkezeti részt tekinthetjük, mivel a fizikai rendszerek számát, méretét nem tekinthetjük adatnak. Azok az eszközök ugyanis, amelyek az adatfeldolgozást végzik, valós időben, fix halmazzal képesek befogadni, illetve műveleteket végezni rajtuk. A komplexitás-definíció egyik sarokköve tehát a

replikációval szembeni invariancia.

A dolgozat felépítése

Az első fejezetben azokat a mérőszámokat vezetjük be, amelyeket a dolgozat további részében vizsgálni fogunk. Ezek egyik része régóta használt információ-elméleti mérőszám, másik része pedig az ezekből képzett komplexitás-jellegű mennyiség. A mennyiségeket egyre bonyolultabbnak tűnő, de megoldható kvantummechanikai rendszerekre alkalmazzuk. A vizsgálat eredményeként az egyes mennyiségek előnyeire, korlátaira is rávilágítunk. A dolgozat első felében a statikus kvantummechanikai rendszereket, az úgynevezett kvantummechanikai-állapotokat tanulmányozzuk. E rendszereken keresztül a komplexitást mérő mennyiségek megismerhetőekké válnak. A térbeli harmonikus oszcillátor és a hidrogén atom kapcsán megvizsgáljuk azt is, hogy miként viselkedik magas kvantumszámok esetén a komplexitás. A dolgozat második részében a kvantumoptikai- és kvantuminformatikai rendszereket tanulmányozzuk. Megvizsgáljuk a koherens állapotokat, az összenyomott – úgynevezett squeezed – állapotokat és a Jaynes-Cummings-modellt. Ez utóbbi esetben megvizsgáljuk a kvantummechanikai újjáéledés jelenségét is a komplexitás szemszögéből. A dolgozat a qubit-rendszerek vizsgálatával végződik. Tanulmányozzuk a több qubites rendszerek információtartalmának alakulását, amennyiben azok nem tökéletes kapun haladnak át, illetve zajjal terhelt csatornán keresztül közlekednek. Az ezekből kinyert információ fontos tanulságokkal szolgál az ilyen rendszereket használó eszközök tanulmányozásához és fejlesztéséhez is.

1.1. Információ-elméleti fogalmak

Egy megoldható kvantummechanikai rendszer esetén rendelkezésünkre áll a hullámfüggvény, és így a rendszerhez tartozó valószínűségi eloszlás. Ezt a sűrűséget használjuk az információ-elméleti fogalmak, illetve a komplexitás definiálására. A kvantummechanikai komplexitás-vizsgálatok során, mint a kiterjedtséget jellemző mennyiséget használjuk a szórást. Ezt az alábbi módon definiáljuk [1], ha $\underline{r}$ várható értéke zérus,

$$\sigma^2 = \int \underline{r}^2 \varrho(\underline{r}) d^d \underline{r}, \quad (1)$$

ahol ϱ a valószínűségi sűrűség eloszlás, d a dimenziószám. A sűrűség

$$\varrho = |\psi(\underline{r})|^2 \quad (2)$$

módon képezhető a hullámfüggvényből. A továbbiakban a σ^2 mennyiséget egyszerűen szórásnak nevezem, ahol külön szerepe van a hatványnak, ott szórás-négyzetnek.

Az információ-elméletben az információ-mennyiség mérésére használt, elterjedt mérőszám a Fisher-információ. Ennek definíciója [2]:

$$I_{Fis} = \int \frac{(\nabla \varrho(\underline{r}))^2}{\varrho(\underline{r})} d^d \underline{r} = \int \varrho(\underline{r}) (\nabla \ln \varrho(\underline{r}))^2 d^d \underline{r}. \quad (3)$$

A definícióból látható, hogy a Fisher-információ az eloszlás lokális relatív megváltozásának abszolút értékét összegzi a téren, ezért az eloszlás mikrostruktúrája jelentősen befolyásolja az értékét. Nem célszerű tehát a fizikai rendszerek komplexitását ezzel a mérőszámmal jellemezni, mert bármilyen kis zaj a Fisher-információt jelentősen megváltoztathatja. A legtöbb komplexitással foglalkozó cikkben a Fisher-információ bemutatásra kerül, így ebben a dolgozatban is kiszámítom néhány esetben. A mikrostruktúra Fisher-információra kifejtett nagymértékű befolyásolásának megértéséhez vegyünk egy valószínűségi sűrűséget, és adjunk hozzá egy kis amplitúdójú, nagy frekvenciájú, zérus várható értékű zajt. Ez a perturbáció azt eredményezi, hogy a Fisher-információ jelentősen megváltozik, hiszen a derivált a gyors változás következtében megnő. Mivel az amplitúdó bármilyen kicsi lehet, a vizsgált rendszerek struktúrája általában ilyen zajtól még nem változik meg.

1.2. A komplexitás mérőszáma

Komplexitás mérőszámaként ismert mennyiségek közül a dolgozatban a legelterjedtebb úgynevezett LMC-komplexitást [3] [4] [5] vizsgálom meg, mivel ez felel meg leginkább a bevezetőben említett követelményeknek. Ez a mennyiség másrésről, igen nagy hasonlóságot mutat a Varga Imre és Pipek János által leírt, és a következő alfejezetben bemutatandó szerkezeti entrópiával [6] [7]. A komplexitás bevezetését a [3] cikket követve adom meg. Eszerint két fizikai rendszer, illetve az azt reprezentáló eloszlás komplexitását tekintjük minimálisnak. Az egyik az ideális gáz, a másik az ideális kristály. Ez a két eset a valószínűségi eloszlás nyelvén az egyenletes, és az egyetlen tagból álló eloszlásokat jelentik. Az ideális gáz esetében a molekulák mozgása teljesen rendezetlen, ezért a megtalálási valószínűségük bármely pontban megegyezik. Az ideális kristályban teljes a rend. Egy atom vagy molekula csak egy meghatározott pontban helyezkedhet el. A megtalálási valószínűsége ebben a pontban 1, máshol 0. Az ideális kristály esetén az entrópia minimális értéket vesz fel, ezért ha az entrópiát megszorozzuk egy másik mennyiséggel, amely éppen az egy egyenletes eloszlás esetében veszi fel minimumát, az elvárásokat teljesíthetjük. Az ideális gázhoz tartozó minimum eléréséhez egy új mennyiséget, az ún. egyensúlytól való eltérést vezették be. [8] Így ezek szorzatával R. López-Ruiz, H.L. Mancini és X. Calbet definiáltak egy komplexitás jellegű mennyiséget, [3]

$$C = S\tilde{D}, \quad (4)$$

ahol S egyszerűen a Shannon-entrópiát, $\tilde{D}$ pedig az egyensúlytól való eltérést jelenti. A Shannon-entrópia definíciója: [9]

$$S = - \sum_{i=1}^N p_i \ln(p_i) \sim - \int \varrho(\underline{r}) \ln(\varrho(\underline{r})) d^d \underline{r}, \quad (5)$$

ahol p_i -k diszkrét valószínűségek, ezért mindig igaz a

$$\sum_{i=1}^N p_i = 1 \quad (6)$$

normálás. Az egyensúlytól való eltérést a

$$\tilde{D} = \sum_{i=1}^N \left(p_i - \frac{1}{N} \right)^2 \sim \int \varrho(\underline{r})^2 d^d \underline{r} \quad (7)$$

kifejezés adja. Ezzel a komplexitás teljesíti a kívánt feltételeket, mivel egyenletes eloszlás esetén:

$$p_i = \frac{1}{N} \rightarrow \tilde{D} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{N} - \frac{1}{N} \right)^2 = 0 \text{ és } S = \ln N \text{ így } C = 0, \quad (8)$$

az ideális kristályt reprezentáló egyelemű eloszlás esetén pedig

$$p_i = \begin{cases} 1 & \text{ha } i = 1 \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases} \rightarrow S = \sum_{i=1}^N p_i \ln(p_i) = 0 \text{ és } \tilde{D} = 1 \text{ így } C = 0. \quad (9)$$

A szerzők a definíciót módosították [10], mert a (4) definíció által megadott mennyiség nem invariáns a replikációval, azaz az eloszlás térben elválasztott ismétlésével szemben. Az új definíció,

$$C_{LMC} = \tilde{D} e^S. \quad (10)$$

Ezzel a (9) és a (8) egyenletek úgy módosultak, hogy szélső esetekben a komplexitás $C_{LMC} = 1$, illetve $C_{LMC} = 0$ értéket vesz fel. Ez a definíció még mindig nem tökéletes, mert egyrészt nem ugyanazt a szélső értéket veszi fel a két szélső esetben, másrészt nem invariáns a replikációval szemben diszkrét esetben. A probléma az egyensúlytól való eltérés definíciójában keresendő. Az $1/N$ levonása jó szolgálatot tett az eredeti definícióban, de hátrányos az újban. Ezért a definíciót módosítom,

$$\tilde{D} = \sum_{i=1}^N p_i^2 \quad (11)$$

Ez a tanulmányozott folytonos eseteknél nem okoz problémát. (Lsd.: 1.4 alfejezet) A továbbiakban ezzel a definícióval dolgozok. Ekkor az LMC-komplexitás mindkét szélső esetben 1 értéket vesz

fel. Az új definíció saját eredményem, azonban mivel folytonos esetben nem tér el a létrehozott, valamint az LMC-ként használt definíció, az új mennyiséget továbbra is LMC-komplexitásnak nevezhetjük. Ezzel kielégítettük a peremfeltételeket. A bevezetőben említett feltételek teljes kielégítéséhez, még szükséges az, hogy bizonyítsuk az ismétléssel szembeni invarianciát. Ezt diszkrét eloszlásokra végzem el, de könnyen általánosítható folytonos eloszlásra is. Induljunk ki egy N véges tagból álló eloszlásból! Mivel a követelmény szerint csak akkor kell teljesülnie az invarianciának, ha az eloszlások nem fednek át, az eredeti eloszlást m -szer véve egymás után az alábbi eloszlást kapjuk. [11]

$$p_i = \begin{cases} f(i) & \text{ha } i \in [1, N] \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases} \rightarrow p_i^* = \begin{cases} \frac{f(\text{mod}_N(i))}{m} & \text{ha } i \in [1, Nm] \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases} \quad (12)$$

Vagyis az eloszlást m -szer megismételve a normálás miatt minden p_i értéke m -ed részére csökken. Az új definíciót használva,

$$\begin{aligned} C_{LMC}^* &= \sum_{i=1}^{Nm} (p_i^*)^2 \exp \left\{ \sum_{i=1}^{Nm} -p_i^* \ln p_i^* \right\} \\ &= m \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{m^2} \exp \left\{ m \sum_{i=1}^N -\frac{p_i}{m} \ln \frac{p_i}{m} \right\} = \\ &= \frac{1}{m} \sum_{i=1}^N p_i^2 \prod_{i=1}^N \left(\frac{p_i}{m} \right)^{-p_i} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^N p_i^2 \left(\frac{1}{m} \right)^{-1} \prod_{i=1}^N (p_i)^{-p_i} \end{aligned} \quad (13)$$

adódik. A logaritmus tulajdonságai, és a (6) normálás miatt,

$$\sum_{i=1}^N p_i^2 \prod_{i=1}^N p_i^{-p_i} = \sum_{i=1}^N (p_i^2) \exp \left\{ \sum_{i=1}^N -p_i \ln p_i \right\} = C_{LMC}.$$

Ezzel megmutattuk, hogy a C_{LMC} invariáns a replikációval, azaz a diszjunkt ismétléssel szemben. Az új definíció használható kvantum-rendszerek tanulmányozására. [12] [13]

1.3. Szerkezeti entrópia

A szerkezeti entrópia bevezetésénél azzal a feltevessel élünk, hogy egy eloszlás Shannon-entrópiájának egy része a lokalizáltságának, míg más része a struktúráltságának köszönhető. [6] [7] [14] Azaz azt feltételezzük, hogy az entrópia felírható

$$S = S_{ext} + S_{str} \quad (14)$$

alakban. Ebben persze eddig nincs meglepetés, hiszen egy kifejezést mindig fel lehet két másik összegére bontani, de mivel entrópia-jellegű részmennyiségeket definiálunk, ezeknek pozitívoknak kell lenniük. Tehát szerkezeti entrópia meghatározásához, az entrópiából le kell vonni egy a delokalizáltságból, azaz az eloszlás kiterjedtségéből származó entrópia-jellegű tagot, mely pozitív definit, és azt várjuk el, hogy az így kapott szerkezeti entrópia is pozitív legyen. A kiterjedési entrópia definiálásához bevezetjük a Rényi-entrópiát, [15] [1]

$$H_\alpha(X) = \frac{1}{1-\alpha} \ln \left(\sum_{i=1}^N p_i^\alpha \right) \quad (15)$$

Ahol X egy diszkrét valószínűségi eloszlás, melynek tagjai p_i -k. L'Hopital szabállyal megmutatható, hogy $\alpha \rightarrow 1$ határesetben az (5) definíció szerinti Shannon-entrópiához tart. [16] $\alpha = 2$ esetben a (15) kifejezés a

$$H_2(X) = -\ln \left(\sum_{i=1}^N p_i^2 \right) = -\ln D \quad (16)$$

alakot veszi fel. Az itt használt D épp a C_{LMC} definíciójakor bevezetett $\tilde{D}$ egyensúlytól való eltérés. A logaritmus mögött lévő összeget tekinthetjük a lokalizáció mértékének ($D = \sum p_i^2$), ugyanis, ha ez az összeg nagy, vagyis közel van 1-hez, akkor az eloszlás jól lokalizált, fő részét néhány elem adja. Azonban, ha ez az érték kicsi, vagyis közel van 0-hoz, akkor az eloszlás sok kicsi tagból áll, vagyis a főrészt elkenődik. Tehát $\sum p_i^2$ a nagy p_i -ket kiemeli, míg a kicsiket elnyomja. Ennek inverzére azt mondhatjuk, hogy minél egyenletesebb, elkenetebb az eloszlás, annál nagyobb az értéke, így $H_2(X)$ a kiterjedést, vagyis a delokalizáció mértékét jellemzi. [17] A (16) kifejezés azonban csak akkor lehet a (14) egyenletben szereplő S_{ext} kiterjedési entrópia, ha bizonyítjuk, hogy a Rényi-entrópia értéke legfeljebb a Shannon-entrópia értéke lehet. Tehát bizonyítandó, hogy

$$S_{str} = S - S_{ext} = \sum_{i=1}^N -p_i \ln p_i + \ln \sum_{i=1}^N p_i^2 \geq 0 \quad (17)$$

Ehhez a variációs számításban megszokott Lagrange-féle multiplikátor módszert használom, a $\sum p_i = 1$ kényszerfeltétel mellett. Tehát definiáljuk a következő függvényt,

$$f(p_i, \lambda) = \sum_{i=1}^N -p_i \ln p_i + \ln \sum_{i=1}^N p_i^2 + \lambda \left(\sum_{i=1}^N p_i - 1 \right),$$

ahol λ jeöli a Lagrange-féle multiplikátort. A függvény extrémumait a p_i és a λ szerinti deriváltak eltűnése jelöli:

$$\frac{\partial f}{\partial p_i} = -\ln(p_i) - 1 + \frac{2p_i}{\sum_{j=1}^N p_j^2} + \lambda = 0 \quad (18)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \lambda} = \sum_{i=1}^N p_i - 1 = 0.$$

A megoldáshoz felhasználjuk, hogy minden $p_i > 0$. A középő egyenletet átrendezve minden i -re:

$$-\ln(p_i) + \frac{2p_i}{\sum_{j=1}^N p_j^2} = 1 - \lambda, \quad (19)$$

tehát minden i indexre a (19) egyenletrendszer jobb oldala azonos, ebből az következik, hogy a baloldali kifejezéseknek is azonosaknak kell lenniük, mert $f(x) = 2x + c \ln(x)$ monoton függvény. Ekkor

$$p_i = \frac{1}{N}. \quad (20)$$

Ebben az esetben az $S = \ln N$ és $D = \frac{1}{N}$, ezért $S_{str} = S + \ln D = 0$. A talált extrémum minimumot jelent, melyet bármely egyéb eloszlás szerkezeti entrópiájának kiszámításával bizonyíthatunk.

Megjegyzem, a Rényi-entrópiákra általánosan igaz, hogy az α függvényében monoton csökkenő értékeket adnak. [18] Az egyenletes eloszlás a minimuma a (17) kifejezésnek, ezért az $\alpha = 2$ -vel képzett Rényi-entrópiát értelmezhetjük delokalizációs entrópiának. A fenti delokalizációs entrópiával definiált szerkezeti entrópia pozitív definit mennyiség. Ha megvizsgáljuk a (20) esetén fennálló eloszlást, azt láthatjuk, hogy ekkor a struktúra ténylegesen minimális értéket vesz fel. Ebben a tekintetben megegyezik a C_{LMC} a (8) kifejezés által adott, az ideális gázhoz tartozó minimumával. Ha az eloszlás nem nulla tagjainak száma 1, akkor megkapjuk a (9) kifejezésnél megismert, az ideális kristályhoz tartozó szélsőértéket. Ennek szerkezeti entrópiája ugyancsak zérus.

A C_{LMC} és az S_{str} között szorosabb a kapcsolat a szélsőérték-eloszlásaik egyezésénél. A (10) és a (17) kifejezések összehasonlításából:

$$C_{LMC} = e^{S_{str}}, \quad (21)$$

látható, ami csak az új egyensúlytól való eltérés ($\tilde{D}$) bevezetésével érhető el. A fenti egyenlőség miatt a szerkezeti entrópiára is igaz a replikációval szembeni invariancia. Tehát a két komplexitásmérőszám ekvivalens, azonban a szerkezeti entrópia azonos nagyságrendje miatt könnyebben hasonlítható össze az entrópiával, és interpretációja jóval egyszerűbb, matematikailag megalapozottabb.

1.4. Áttérés a folytonos eloszlásokra

Megoldható kvantummechanikai problémák esetén rendelkezésünkre áll a problémához tartozó hullámfüggvény, így a valószínűségi sűrűség is. A sűrűséget mindig normálnak tekintjük, azaz:

$$\int \varrho(\underline{r}) d^d \underline{r} = 1 \quad (22)$$

Az egyensúlytól való eltérés régi definíciója:

$$\tilde{D} = \int \left(\varrho(\underline{r}) - \frac{1}{V} \right)^2 d^d \underline{r}, \quad (23)$$

ahol V a térfogat az d -dimenziós térben. Ez a tag eltűnik, ha az integrálás végtelen térfogatú tartományra történik, ezért ehelyett a

$$\tilde{D} = \int \varrho(\underline{r})^2 d^d \underline{r} \quad (24)$$

definíciót használata terjedt el. Azonban fontos tudni, hogy a két definíció csak végtelen térfogaton válik azonossá, különben nem! Mivel folytonos esetben minden ezzel foglalkozó szerző a $\tilde{D}$ mennyiséget használja, ezért érdemes volt inkább az eredeti definíciót is módosítani.

Az új definícióval egyszerű módon adódik a

$$C_{LMC} = \left(\int \varrho(\underline{r})^2 d^d \underline{r} \right) \exp \left\{ - \int \varrho(\underline{r}) \ln(\varrho(\underline{r})) d^d \underline{r} \right\} \quad (25)$$

LMC -komplexitás. A szerkezeti entrópia diszkrét definíciójából:

$$S_{str} = - \int \varrho(\underline{r}) \ln(\varrho(\underline{r})) d^d \underline{r} + \ln \left(\int \varrho(\underline{r})^2 d^d \underline{r} \right) \quad (26)$$

adódik. A (13) és a (18) bizonyítások egyszerűen átvihetők folytonos esetre.

1.5. Fázistér-beli vizsgálatok: Husimi- és Wigner-függvények

Az eddig bevezetett komplexitás-mérőszámok számos pozitív tulajdonsága mellett a mennyiségek nem reprezentáció-függetlenek. Erre a problémára az egyik lehetséges megoldás, hogy a definíciók részeként megadjuk azt a reprezentációt, amiben fel kell írni a hullámfüggvényt. Ezt az egyszerű x -, vagy p -reprezentáción túl megtehetjük a sokkal szemléletesebb fázistéren is. Ekkor a hullámfüggvény szerepét például a Wigner-, vagy a Husimi-függvény tölti be. A Wigner-függvényhez a hullámfüggvény alábbi transzformációjával jutunk:

$$W(p', q') = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi \left(q' - \frac{x}{2} \right)^* \psi \left(q' - \frac{x}{2} \right) \exp(ipx) dx \quad (27)$$

A Wigner függvény nem pozitív definit, ezért nem töltheti be a valószínűségi sűrűségfüggvény szerepét. Így a Husimi-függvényből indulunk ki, melynél a paramétereket a [20] cikkben foglaltaknak megfelelően $\hbar = e = m_e = 1$ és $\sigma^2 = 1$ módon választottuk, a Husimi-függvény definíciója

$$H(r, p) = \left(\frac{1}{2\pi} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dq' \int_{-\infty}^{\infty} dp' W(p', q') \exp \left(-\frac{(r - q')^2}{\lambda} \right) \exp(-\lambda(p - p')^2). \quad (28)$$

A Husimi-transzformáció a Wigner-függvény Gauss-függvényekkel vett simítása. A λ paraméternek általánosságban 1 értéket adunk, de vizsgálni fogjuk egyes esetekben, hogy az entrópia hogyan viselkedik a paraméter változásainak hatására. A Husimi-függvény a fenti megkonstruálásával eljutottunk egy pozitív fázis-térbeli valószínűsége-sűrűséghez, ennek birtokában a szokásos módon képezhetők az entrópia-tagok. Például a szerkezeti entrópia,

$$S_{str} = \ln \left(\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} H(r, p)^2 dr dp \right) - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} H(r, p) \ln(H(r, p)) dr dp. \quad (29)$$

A reprezentáció igen gyakran használatos a kvantum-optikában, kvantuminformatikában, mivel szemléletes.

2. Eredmények

A tanulmányozott kvantumrendszereknél az analitikus számítások csupán néhány esetben végezhetők el, ezért a legtöbb eredményt numerikus módszerrel értem el. A reprodukáláshoz szükséges numerikus módszereket és beállításokat a 7.1 alfejezetben mutatom be.

2.1. Dobozba zárt részecske

A kvantumrendszerek vizsgálatát a legegyszerűbb rendszer vizsgálatával kezdjük, ez a dobozba zárt részecske problémája. Ez az egyszerű példa kitűnő alkalom a vizsgált információ-elméleti fogalmak, és a szerkezeti entrópia viselkedésének megértéséhez, áttekintéséhez. A hullámfüggvény:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & \text{ha } x \in [0, L] \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases} \quad (30)$$

Ezért a sűrűség:

$$\varrho_n(x) = \begin{cases} \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & \text{ha } x \in [0, L] \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases} \quad (31)$$

Az ehhez tartozó szórás az (1) alapján:

$$\sigma^2(n, L) = \int_0^L x^2 \varrho_n(x) dx - \left(\int_0^L x \varrho_n(x) dx \right)^2 = \frac{L^2 (3 - 6n^2 \pi^2 + 4n^3 \pi^3)}{12n^3 \pi^3} - \frac{L^2}{4}. \quad (32)$$

Látható, hogy a szórás L második hatványával skálázódik, ahogy ezt el is várjuk. A Fisher-információt is megkaphatjuk analitikus alakban a (3) definíció alapján:

$$I_{Fis} = \frac{4n^2 \pi^2 + 1}{L^2}. \quad (33)$$

A (33) egyenletből látható, hogy a Fisher-információ $\frac{1}{L^2}$ -tel skálázódik. A skálázódások mutatják, hogy a szórás és a Fisher-információ csak erős megkötésekkel (skála rögzítése) használhatóak a komplexitás mérőszámaként. A skálázódás kiküszöbölhető ha a szórás-négyzet és a Fisher-információ szorzatát tekintjük, a szorzatot Cramér-Rao komplexitásnak is nevezik. [20] A szorzat nem függ a skálától, de erősen n -függő. Az L - és n -függést a (2a) és a (2b) ábrák mutatják.

Azonban a szerkezeti entrópia a (17) definíciója miatt,

$$S_{str} = - \int_0^L \varrho(x) \ln(\varrho(x)) dx + \ln \left(\int_0^L \varrho^2(x) dx \right), \quad (34)$$

már nem skálázódik, s így nem kell a skálát rögzíteni. A szerkezeti entrópia analitikus számítása igen nehéz, de a (13) miatt a szerkezeti entrópia invariáns a replikációval szemben, így elég az $n = 1$ esettel számolnunk, hiszen a magasabb kvantumszámú állapotok valószínűségi sűrűsége replikációval adódik az $n = 1$ sűrűségéből. Ezért,

$$\ln D = \ln \left(\frac{3}{2L} \right) \quad (35)$$

$$S = \ln(2) - 1 + \ln(L) \quad (36)$$

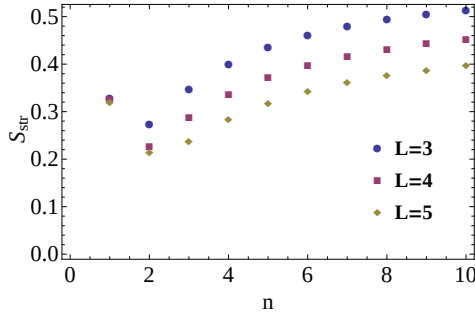
Ezek alapján

$$S_{str} = \ln(3) - 1 \quad (37)$$

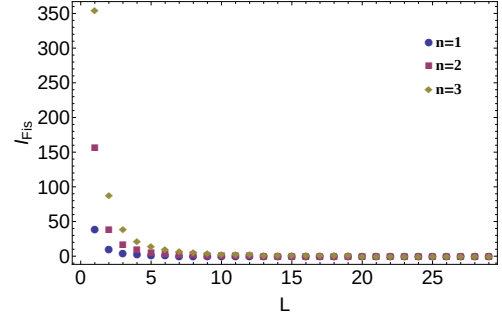
Megjegyzem, hogy ebben az esetben látszik igazán miért kellett az eredeti (7) egyensúlytól való eltérés helyett a (11) definíciót alkalmazni. Ha a régi definíciót alkalmaznánk, a C_{LMC} függne a doboz méretétől, hiszen a folytonos esetre való áttérésnél a (25) kifejezés első tagja egy $-1/V$ taggal bővülne. Ekkor már a C_{LMC} sem lenne skálafüggetlen.

A szerkezeti entrópia már nem skálázódik, ez látható abból, hogy értéke L -től független. A (21) egyenlet miatt természetesen ugyanez mondható el C_{LMC} -ről is. A hullámfüggvény strukturáltsága igen alacsony, s ez megjelenik a szerkezeti entrópia értékében is. Numerikusan ez $S_{str} = 0,09861$.

A szerkezeti entrópia értéke az (1.5) alfejezetben elmondottaknak megfelelően függ a reprezentációtól. Ezért megvizsgáljuk a Husimi-függvényt is. A (28) definíció alapján a Husimi-függvény analitikusan számítható, de a képlet terjedelme miatt a közléstől eltekintek. Az (1a) ábra foglalja össze a számításokat. Jól láthatóan a Husimi-függvény szerkezeti entrópiája már nem független a doboz méretétől. A skálázódás oka, hogy a Husimi-függvény a p -reprezentációt is tartalmazza, a hullámszám pedig lényegében a doboz méretével fordítottan arányos. Érdekes még, hogy a szerkezeti entrópia nem monoton módon változik a kvantumszámmal, a vizsgált esetekben az $n = 2$ kvantumszámnál minimuma van.

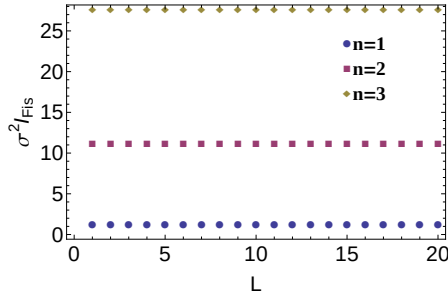


(a) Husimi reprezentáció szerkezeti entrópiája a kvantumszám (n) függvényében $L = 3$, $L = 4$ és $L = 5$ esetben

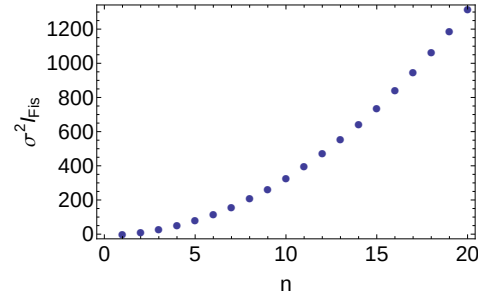


(b) A Fisher-információ a kvantumszám (n) függvényében

1. ábra. Dobozba zárt részecske vizsgálata



(a) Szórás és Fisher-információ szorzata a dobozméret (L) függvényében



(b) Szórás és Fisher-információ szorzata a kvantumszám (n) függvényében

2. ábra. Dobozba zárt részecske vizsgálata

2.2. Harmonikus oszcillátor egy dimenzióban

A harmonikus oszcillátor vizsgálata azért fontos számunkra, mert ez a legegyszerűbb rendszer, melynél magasan gerjesztett állapotok vizsgálhatóak, ami a Hidrogén-atom esetén a szemiklasszikus átmenetet fogja reprezentálni. Ugyanis a magas kvantumszámú ($n > 20 - 30$) gerjesztések Hidrogénatom esetén már szemiklasszikus átmenetnek tekinthetőek, mert az energiaspektrum ilyen főkvantumszámok esetén már majdnem folytonos. A hullámfüggvény:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \quad (38)$$

ahol $H_n(x)$ az n -ed rendű Hermite polinom, n a kvantumszám, mely 0-tól indul. Számításaim során az $\frac{m\omega}{\hbar} = a_0 = 1$ rögzítettem.

A szórás a (3a) ábrán található. Látható, hogy a harmonikus oszcillátor sajátfüggvényeinek szó-

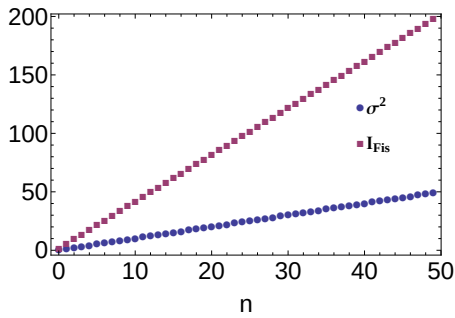
rása a kvantumszám függvényében egy egyenes, mely 0,5-ről indul, természetesen $\hbar$ egységeiben. Az egyenes már klasszikus mechanikával is megmutatható:

$$E_{klasszikus} \sim \frac{\langle x^2 \rangle}{2} \quad (39)$$

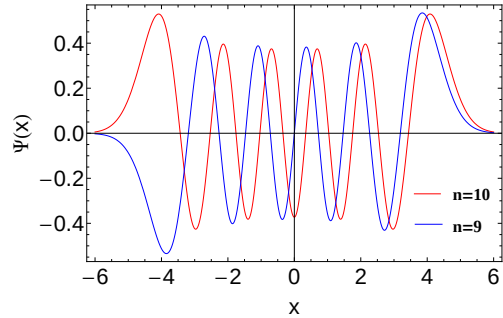
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$

A kettő összeolvasásából $n \sim \langle x^2 \rangle$, pontosabban a viriál-tétel miatt $\langle x^2 \rangle = a_0^2 (n + 1/2)$.

A Fisher-információ a szóráshoz nagyon hasonló viselkedést mutat. (3a ábra). Ez azzal magyarázható, hogy n növekedésével a Hermite polinom rendje, így az oszcillációk (zérushelyek) száma is arányosan növekszik, míg ezek amplitúdója arányosan csökken. A (3b) ábrán az $n = 9$, és az $n = 10$ gerjesztett állapotok hullámfüggvényét hasonlíthatjuk össze, ez mutatja a különböző számú és amplitúdójú oszcillációkat. Az $n = 9$ esetben 10, míg az $n = 10$ esetben 11 oszcillációt találhatunk. Azt is megállapíthatjuk, hogy az oszcillációk alakja nem változik lényegesen, míg amplitúdója kismértékben csökken. Ezért a Fisher-információ a hullámfüggvényen található csúcsokkal egyenletesen növekszik, mert a lokális abszolút differenciál integrálja új azonos egységek hozzávételével lineárisan növekszik. A skálázódást $a_0 = 1$ rögzítése miatt jelen esetben nem látjuk, de megmutatható, hogy a doboz-problémához hasonlóan, ebben az esetben is a szórás-négyzet a rendszermérettel négyzetesen, a Fisher-információ előbbi inverzével skálázódik. Ezen túlmenően a (3a) ábrán két egyenes látható a kvantumszám függvényében, tehát a Fisher-információ és a szórás-négyzet hányadosa nem függ n -től.



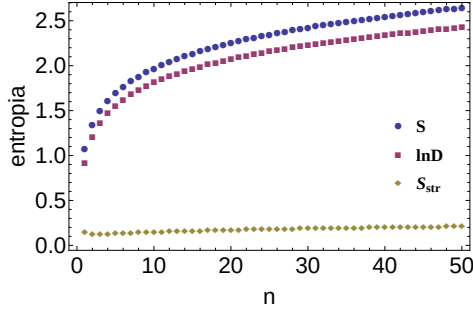
(a) A szórás és a Fisher-információ a kvantumszám (n) függvényében



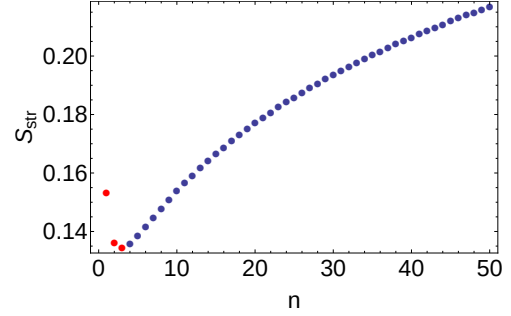
(b) A hullámfüggvény

3. ábra. Harmonikus oszcillátor potenciálban mozgó részecske vizsgálata

A szerkezeti- és a többi entrópia változását mutatja a (4a) ábra. Ezen jól látható, hogy az alapállapot és a gerjesztett állapotok szerkezeti entrópiája eltér, de a gerjesztett állapotok szerkezeti entrópiája alig változik. Ennek oka, hogy az entrópia nagy részben a kiterjedési entrópiával

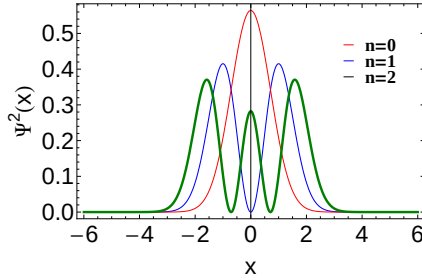


(a) A Shannon-, kiterjedési- és szerkezeti-entrópia a kvantumszám (n) függvényében

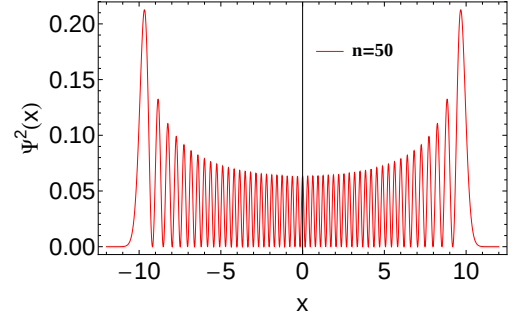


(b) A szerkezeti entrópia a kvantumszám (n) függvényében

4. ábra. Harmonikus oszcillátor potenciálban mozgó részecske vizsgálata



(a) A hullámfüggvény négyzete $n = 0$, $n = 1$ és $n = 2$ esetekben



(b) A hullámfüggvény négyzete szemiklasszikus átmenetnél

5. ábra. Harmonikus oszcillátor potenciálban mozgó részecske vizsgálata 3.

növekszik, tehát a struktúra alig változik. A fentiek megértéséhez tekintsük a (3b) ábrán felrajzolt hullámfüggvényt. Az ábrán jól látszik, hogy a hullámfüggvény több nagyjából azonos alakú púpból áll, így a (12) replikációs tulajdonság szerint teljesen természetes, hogy a gerjesztés növelésével csak csekély mértékben változik a szerkezeti entrópia és a komplexitás. Az entrópia és a kiterjedési entrópia azonban növekszik n növekedésével. Ez indokolja a szerkezeti entrópia használatát, hiszen a gerjesztett állapotok alig térnek el egymástól, így a szerkezeti entrópia is lassan változó függvénye n -nek. A szerkezeti entrópiát részletesebben megvizsgálva a (4b) ábrán azt látjuk, hogy a szerkezeti entrópia nem monoton függvénye a gerjesztésnek. A piros pontok ($n = 0, 1, 2$) mentén a kvantumszám növekedtével a szerkezeti entrópia csökken. Ennek az a magyarázata, az alapállapot hullámfüggvénye egy egyszerű Gauss-függvény, az első gerjesztett állapot két egyenlő nagyságú csúcsból áll, és csak az $n = 2$ esetben alakul ki a parabola alakú burkoló, mely a nagy kvantumszám-

mokra teljesen kirajzolódik. A hullámfüggvények alakja kis kvantumszámok esetén az (5a) ábrán, míg magasan gerjesztett esetben az (5b) ábrán tekinthető meg. Ezek alapján magasan gerjesztett állapotnak nevezhetjük az állapotokat már $n = 2$ kvantumszám felett.

A magasan gerjesztett állapotok esetén, azt mondhatjuk, hogy az entrópia és a kiterjedési entrópia átmenete logaritmikus. Ezt egy lin-log skálán kapott egyenes mutatja a függelékben található (42. ábra), mely a kiterjedési entrópiát ábrázolja, az entrópia, és a kiterjedési entrópia ilyen viselkedése nem meglepő, hiszen ezek extenzív mennyiségek, és így a térfogattal arányosan nőnek, a térfogat n -nek valamilyen hatvány-függvénye harmonikus oszcillátor esetén. Mivel a szerkezeti entrópia változása a többi entrópia-taghoz képest igen csekély, ezért a telítődés alakja nem ismerhető fel, de sejthető, hogy nagyon magas kvantumszámok esetén stagnálást látnánk.

2.3. A két-delta potenciál

A két- δ potenciálban mozgó részecske vizsgálatát a [19] cikk alapján végeztem el. Az ott elvégzett számítások nagy részét reprodukáltam, és kiegészítettem. Témavezetőmmel megvizsgáltuk a Husimi-függvény viselkedését is, valamint új effektusokat mutattunk meg. A téma tárgyalása eltér az eddigiektől, mert a szerkezeti entrópiát impulzus-reprezentációban és a fázistéren is kiszámoltuk. A két-delta potenciál:

$$V(x) = -g[\delta(x + a) + \delta(x - a)], \quad (40)$$

melyet a kétatomos molekulák legegyszerűbb 1 dimenziós leírására is használnak, $g = q^2/4\pi\epsilon_0$ választással. Ezen potenciálhoz két kötött hullámfüggvény tartozik, ezek közül a páros megoldás alacsonyabb energiájú. Ennek hullámfüggvénye:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{kx} & \text{ha } x < -a \\ B \cosh(kx) & \text{ha } -a < x < a \\ Ae^{-kx} & \text{ha } x > a. \end{cases} \quad (41)$$

A hullámfüggvényt p -reprezentációban is megkaphatjuk, ehhez Fourier-transzformálnunk kell az x -reprezentációbeli alakot:

$$\phi(p) = B \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{ke^\gamma \cos(pa)}{p^2 + k^2}. \quad (42)$$

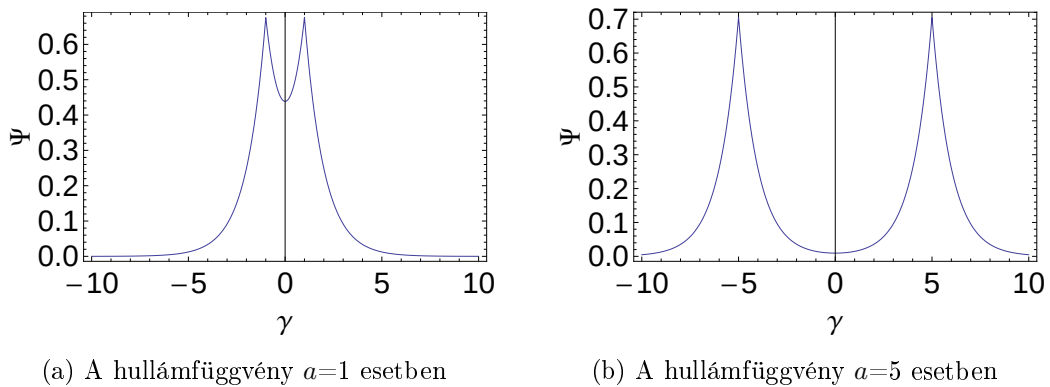
Ezeknél a kifejezéseknél

$$A = Be^{-\gamma} \cosh(\gamma),$$

$$B = (2\gamma/a)^{1/2} (e^{-2\gamma} + 2\gamma + 1)^{-1/2},$$

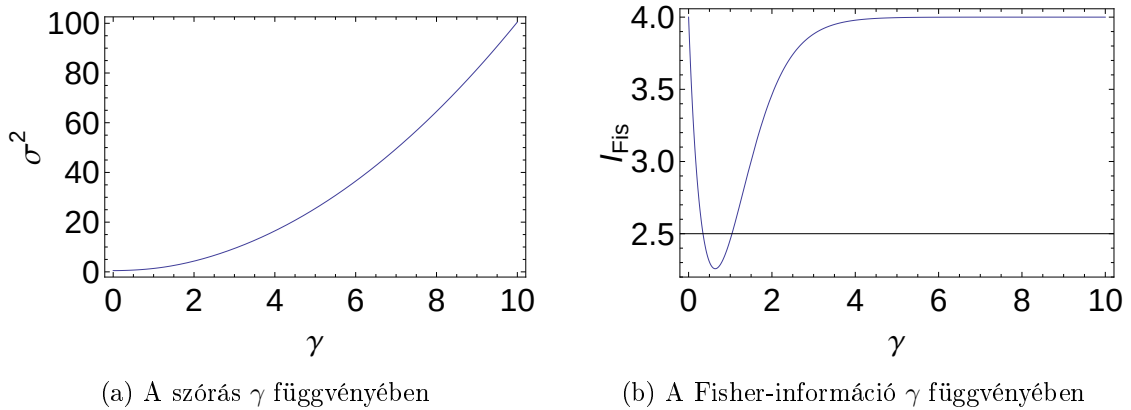
és $\gamma = ka$. A hullámszám $k = \sqrt{2m|E|}/\hbar$ módon adódik az energiából. A hullámfüggvény a (6a) és a (6b) ábrákon látható. A Schrödinger-egyenletnek létezik páratlan megoldása is, melyhez tartozó energia mindig meghaladja a páros megoldását, ezért a páros megoldást kötő pályának, a páratlan megoldást pedig lazító pályának tekinthetjük. A hullámfüggvény γ függvényében két határesetbe mehet át. A $\gamma \rightarrow 0$ esetben a (40) potenciál az egy-delta potenciálba megy át $2g$ amplitúdóval, míg $\gamma \rightarrow \infty$ esetben a (41) két egy-delta hullámfüggvény át nem lapoló superpozíciója lesz, természetesen g amplitúdóval. A harmonikus oszcillátorral szemben most csak egy állapottal foglalkozunk, de a hullámfüggvény tartalmaz egy γ paramétert, melyet folytonosan változtathatunk 0 és ∞ között.

A (7a) és a (7b) ábrákon láthatóak a szórás, valamint a Fisher-információ viselkedése a delták távolságának függvényében. Ezek a mennyiségek analitikusan számíthatóak, a számolás eredményének közlésétől eltekintek. Az ábrákból látható, hogy a szórás monoton és konvex módon növekszik. Ez annak következménye, hogy a két csúcs távolodik egymástól miközben a centrum helye nem változik. A Fisher-információ viselkedése úgy érthető meg, hogy a bevezetőben említetteknek megfelelően a valószínűségi sűrűségeloszlás relatív megváltozásainak abszolútérték összegeként tekintünk rá. Ekkor érthető, hogy a két szélső esetben a mennyiség azonos értéket vesz fel, mert $\gamma \rightarrow \infty$ esetben a valószínűségi sűrűség két egy-delta sűrűségnek replikációjának felel meg, ezért fele akkora a csúcserő, tehát fele akkora a növekménye, mint $\gamma \rightarrow 0$ esetben. Látható, hogy integrálva a növekményt a két szélső esetben a Fisher-információ megegyezik. Köztes érték esetén pedig a sűrűség növekményei az átlapolás miatt –a szimmetria miatt– kioltják egymást, mivel a köztes tartományban az egyik exponenciális tag csökken, míg a másik növekszik.



6. ábra. A két- δ potenciálban mozgó részecske vizsgálata

Térjünk át a szerkezeti entrópia tanulmányozására! A szerkezeti entrópiát kiszámoljuk x - és p -reprezentációban is. Kíváncsiak vagyunk az átlapolás hatására fázistérben is. Ez a példa elegendően



7. ábra. A két- δ potenciálban mozgó részecske vizsgálata

egyszerű ahhoz, hogy tanulmányozzuk a reprezentáció-függés hatását, bár mindkét reprezentáció teljes leírást biztosít. A szerkezeti- és kiterjedési entrópiát a (8) ábrán láthatjuk. A (12) replikációs tulajdonság miatt a két végső esetben a szerkezeti entrópia megegyezik. A Husimi-függvényt különböző a értékek mellett a függelékben ábrázolom. A (8) ábráról látható, hogy a fázistéren a szerkezeti entrópia másképpen viselkedik, mint az egyszerű x -, vagy p -reprezentációban. Jobban megfigyelve a két reprezentációban kapott esetek összevetéséből végül is nem meglepő, hogy a fázistérbeli szerkezeti entrópia változása ötvözi a két reprezentáció változásait, erre még a kvantumoptikai squeezed-állapot vizsgálatánál látunk példát. Azt mondhatjuk, hogy a Husimi-függvény szerkezeti entrópiája magában foglalja az x - és a p -reprezentáció eseményeit is.

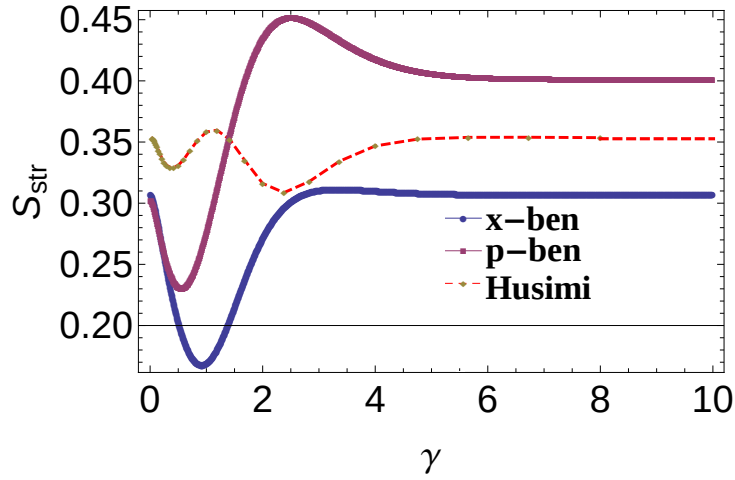
Az alfejezet elején említett egyszerű molekula-leírást elterjedten használják különböző molekulafizikai módszerek elsődleges szűrőjeként, hiszen ekkor a megoldás egzaktul ismert, ezért az eredmények könnyen összehasonlíthatók. Egy ilyen közelítő módszer esetén magam is megvizsgálom, hogy a szerkezeti entrópia hogyan viselkedik, ha a hullámfüggvény csak közelítőleg helyes. A vizsgált módszer az LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals). Tegyük fel, hogy Φ_1 és Φ_2 atomi hullámfüggvények. Ebben az esetben a molekulapálya hullámfüggvénye (MO) $\psi = c_1\Phi_1 + c_2\Phi_2$. Az energia variációjával megkaphatjuk c_1 és c_2 együtthatókat. A páros megoldás [21]:

$$\psi_{ps} = [2(1 + \Upsilon)]^{-1/2} (\Phi_1 + \Phi_2). \quad (43)$$

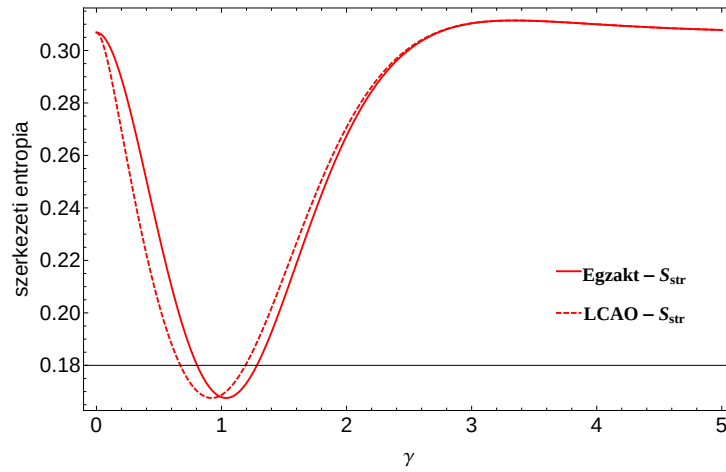
A két- δ modell esetén az atomi orbitálok az egy-delta potenciálhoz tartozó hullámfüggvények, azaz

$$\Phi_{1,2} = \alpha^{-1/2} \exp \{-\alpha |x \pm a|\}, \quad (44)$$

ahol "+"-hoz a páros, a "-"-hoz a páratlan megoldás tartozik, és $\alpha = k/2(1 + \tanh \gamma)$. Υ pedig az átfedési integrál, azaz $\Upsilon = \int \Phi_1 \Phi_2 dx$, ami egzakt módon számítható, $\Upsilon = (1 + \beta)e^{-\beta}$ ahol $\beta = 2a\alpha$.

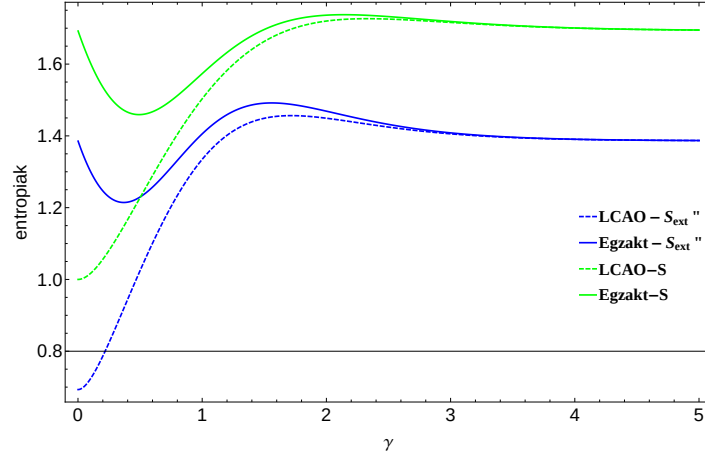


8. ábra. A szerkezeti entrópia x -, p -reprezentációban γ függvényében, valamint a Husimi-függvény szerkezeti entrópiája



9. ábra. A két- δ potenciál vizsgálata LCAO-közelítéssel: A szerkezeti entrópia

A szerkezeti entrópia γ függését mutatja a (9) ábra. Meglepetésünkre a szerkezeti entrópia alig tér el az egzakt megoldás szerkezeti entrópiájától, csak $0 < \gamma < 0.5$ között figyelhetünk meg egy eltolódást. Ez azt jelenti, hogy a szerkezeti entrópia lényegében érzéketlen az ilyen, perturbatív eltérésekre. Megvizsgálva azonban a kiterjedési- és a Shannon-entrópiát (10 ábra), a különbség az egzakt, és a közelítő megoldás közt szembeötlő. A nagy eltérés tükrében még meglepőbb, hogy a közelítés szerkezeti entrópiája csak csekély mértékben tér el az egzakt megoldásától. A 10. ábrán feltűnő, hogy a $\gamma \rightarrow 0$ esetben az egzakt, és a közelítő módszer entrópiái különböző értéket vesznek



10. ábra. A két- δ potenciál vizsgálata LCAO-közelítéssel: A Shannon- és a kiterjedési entrópia

fel. A magyarázat az, hogy a közelítő módszer nem adja vissza a $\gamma \rightarrow 0$ esetben elvárt $2g$ szorzóval ellátott egy- δ potenciált, csak az eredeti g -vel szoroztat. Persze skálázással ezek a határesetek egybe ejthetők, ekkor viszont a másik határesetben nem esnek egybe a határértékek. A szerkezeti entrópia vizsgálatából az derült ki ebben az egyszerű esetben, hogy a szerkezeti entrópia kevésbé érzékeny a hullámfüggvény mikrostruktúrájának változására, mint az entrópia, vagy a kiterjedési entrópia.

2.4. Harmonikus oszcillátor három dimenzióban

A térbeli, izotróp harmonikus oszcillátor potenciálja:

$$V(r) = \frac{1}{2}\lambda^2 r^2, \quad (45)$$

ahol $\lambda = \sqrt{m\omega}$. A sajátállapotok hullámfüggvénye [22]-alapján:

$$\psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi) = R_{n,l}(r)Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \left(\frac{2n!\lambda^{l+3/2}}{\Gamma(n+l+3/2)} \right)^{1/2} r^l e^{-\frac{\lambda}{2}r^2} L_n^{l+1/2}(\lambda r^2) Y_l^m(\vartheta, \varphi). \quad (46)$$

Itt $L_a^b(x)$ jelöli az asszociált Laguerre-polinomokat és a gömbfüggvények,

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \sqrt{2l+1 \frac{(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (47)$$

alakúak, ahol $P_l^m(x)$ az l -ed rendű asszociált Legendre-polinom. A továbbiakban $\lambda = 1$ feltevéssel élek, mert ez megkönnyíti a számításokat, de nem befolyásolja az eredményeket. A későbbiekben

fontos lesz, hogy a (46) hullámfüggvény normáltsága mellett a (47) is normált abban az értelemben, hogy

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_l^m(\vartheta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\vartheta, \varphi)^* \sin(\vartheta) d\vartheta d\varphi = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}. \quad (48)$$

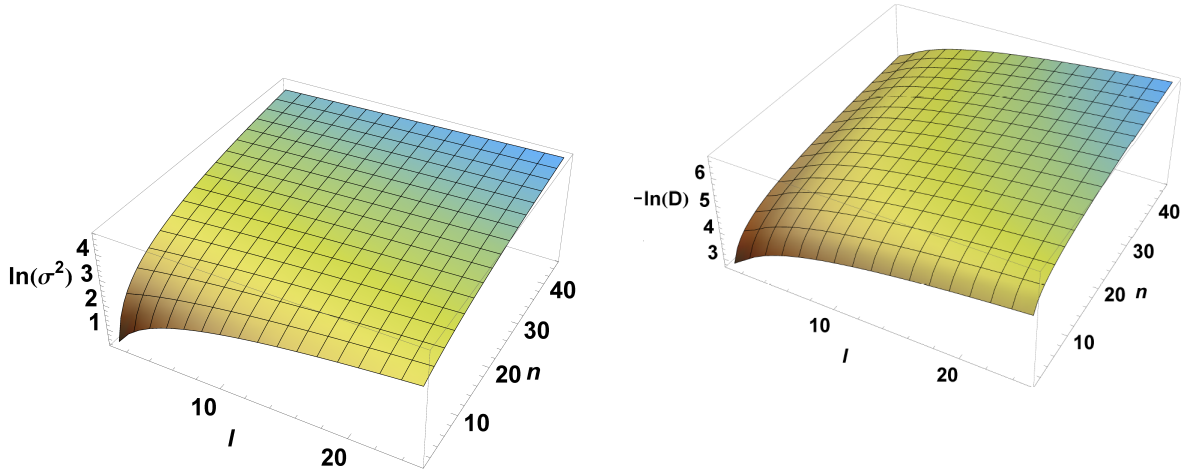
Mivel a szerkezeti entrópia számításánál a sugár- és a szög szerinti integrálás különválasztható,

$$\begin{aligned} S_{str} &= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} [R_{n,l}(r) |Y_l^m(\vartheta, \varphi)|]^4 r^2 \sin(\vartheta) dr d\vartheta d\varphi \\ &- \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} [R_{n,l}(r) |Y_l^m(\vartheta, \varphi)|]^2 \ln [R_{n,l}(r) |Y_l^m(\vartheta, \varphi)|]^2 r^2 \sin(\vartheta) dr d\vartheta d\varphi \\ &= \int_0^\infty (R_{n,l}(r))^4 r^2 dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_l^m(\vartheta, \varphi)|^4 \sin(\vartheta) d\vartheta d\varphi \\ &- \int_0^\infty (R_{n,l}(r))^2 \ln (R_{n,l}(r))^2 r^2 dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \ln (|Y_l^m(\vartheta, \varphi)|^2) \sin(\vartheta) d\vartheta d\varphi, \end{aligned} \quad (49)$$

ahol az utolsó átalakításnál felhasználtam a (48) tulajdonságot, és eszerint a radiális rész is normált. Az rögtön látható hogy φ -től nem függ semmi, mert mindenhol a szférikus harmonikusok abszolút értéke szerepel.

A szórás számítása az origóba centráltság miatt: ($\langle r \rangle^2 = 0$)

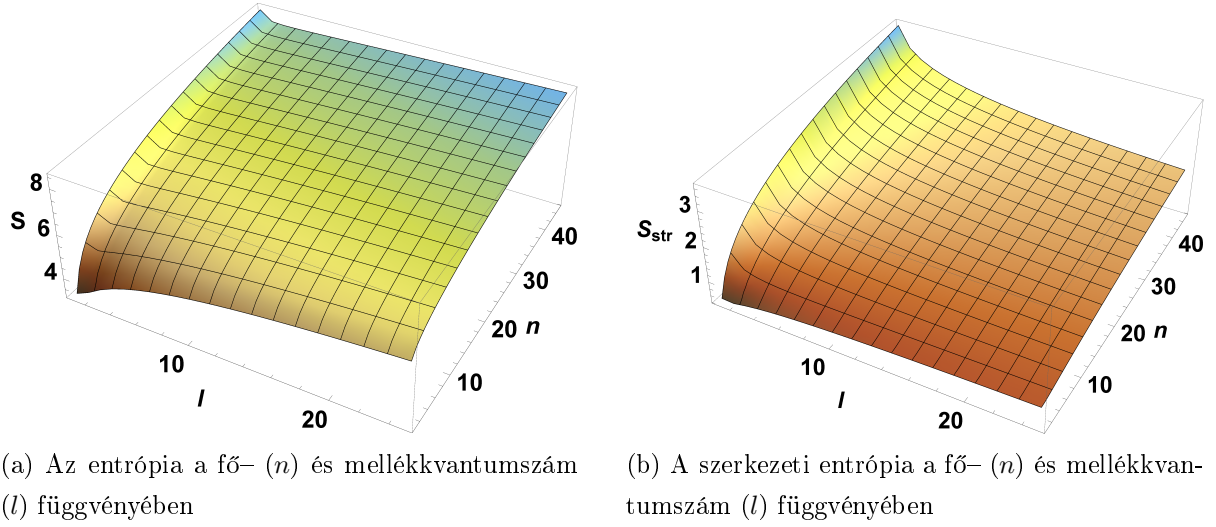
$$\sigma^2 = \langle r^2 \rangle = \int_{-\infty}^\infty R_{n,l}^2 r^2 r^2 dr \quad (50)$$



(a) A szórás logaritmusa a fő- (n) és mellékkvantumszám (l) függvényében

(b) A kiterjedési-entrópia a fő- (n) és mellékkvantumszám (l) függvényében

11. ábra. A tértbeli harmonikus oszcillátor vizsgálata



12. ábra. A tértbeli harmonikus oszcillátor vizsgálata

Az eredmények a (11a) ábrán láthatóak. Alapvetően a szórás értékek egy sík mentén helyezkednek el, ennek a logaritmusát vettem, hogy jobban összehasonlíthassuk a többi eredménnyel. Összehasonlítva ezt a (11b) ábrával, azt találjuk, hogy hasonlóan viselkednek. Ez természetes is, ha arra gondolunk, hogy mindkét mennyiség a kiterjedtséget méri. A (12a) ábra szerint a teljes entrópia ugyanúgy viselkedik, mint a kiterjedési, ezzel szemben furcsa alakot mutat a (12b) ábrán kirajzolódó szerkezeti entrópia-felület. Azt láthatjuk, hogy a szerkezeti entrópia konkáv módon növekszik, úgy látszik, a magasan gerjesztett állapotba logaritmus függvény szerint telítődik ($2n + l$ energia szerint). Továbbá megfigyelhető, hogy l mellékkvantumszám szerint a szerkezeti entrópia először gyorsan csökken, majd lassan változik. Továbbá érdekes megfigyelés, hogy a szerkezeti entrópiának mindig az $l = 0$ mellékkvantumszámú állapotban van maximuma, ez különösen a következő részben tárgyalt hidrogénatom vizsgálatával szemben érdekes. Megjegyzem, hogy az energia ebben az esetben nem csak n kvantumszámtól függ, hanem

$$E_{n,l} = (2n + l + 3/2)\hbar\omega \quad (51)$$

kifejezés szerint adódik. A magasan gerjesztett állapotok logaritmikus jellegét a függelék ábrák részében ábrázoltam. Az ekvienergiás vonalakat tekintve azt találjuk, hogy az $n = 0$ érték a legkomplexebb. Összevetve ezt a megállapítást a (11b) ábrával, azt mondhatjuk, hogy az ekvienergiás vonalakon haladva a szerkezeti entrópia csökken, míg a kiterjedési nő, vagyis ebben az esetben megállapíthatjuk, hogy a kiterjedés csökkenésével növekszik a rendszer strukturáltsága.

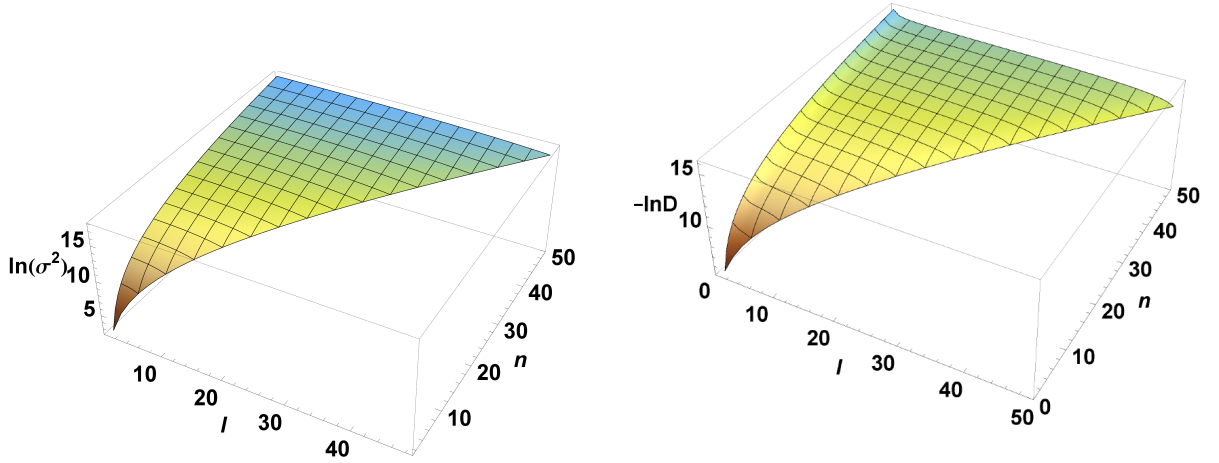
2.5. Hidrogénatom

A stacioner állapotok vizsgálatával kapcsolatos eredményeink közül a legfontosabbak a hidrogénatom vizsgálatával születtek meg. Azt várjuk ugyanis, hogy a magasan gerjesztett állapotok vizsgálatával információhoz jutunk a szemiklasszikus átmenet komplexitásáról. A hidrogénatom esetében szemiklasszikus esetnek tekinthetjük a magasan energiás állapotokat, mivel ebben az esetben az energia kvantáltsága kicsi. A hidrogénatom potenciálja és hullámfüggvénye a következőképp alakul [11]:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (52)$$

$$\psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} r^l e^{-r/2} L_{n-l-1}^{2l+1}(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi), \quad (53)$$

ahol a $r/(na_0) = \rho$ változócserevel élhetünk, a_0 a Bohr-sugár, L_n^l az asszociált Laguerre polinom, Y_l^m a (47) kifejezés szerint definiált gömbi harmonikus. Ismét igaz, hogy a radiális, és a szögfüggő rész külön-külön normáltak. A szerkezeti entrópiát a (49) szerint számíthatjuk ki.

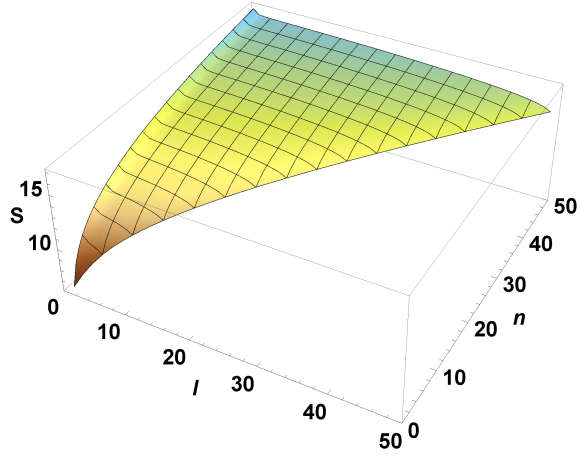


(a) A szórás logaritmusának a fő- (n) és mellékkvantumszám (l) függvényében

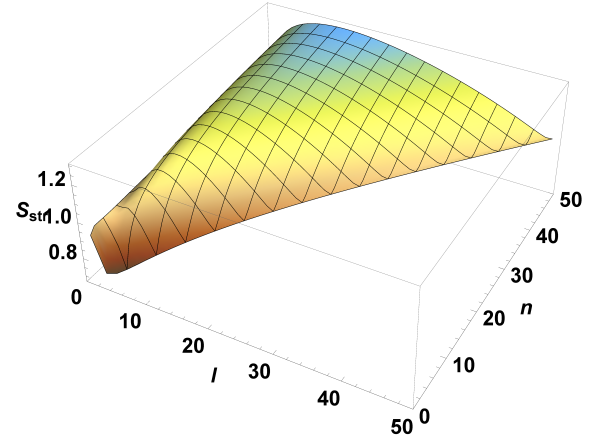
(b) A kiterjedési-entrópia a fő- (n) és mellékkvantumszám (l) függvényében

13. ábra. A hidrogénatom vizsgálata

A szerkezeti entrópia fő- és mellékkvantumszám függését a (14b) ábra tartalmazza. Látható, hogy a felület n -nek, és l -nek nem monoton függvénye. Kiemelve néhány főkvantumszámot ábrázolom a szerkezeti entrópiát a mellékkvantumszám függvényében a (15a) és a (15b) ábrán. A maximum helyek alakulását ezeken az ábrákon is figyelemmel követhetjük, de ezen kívül tartogatnak még egy érdekességet az ábrák. A maximális l érték magasabban helyezkedik el a vártnál. Az

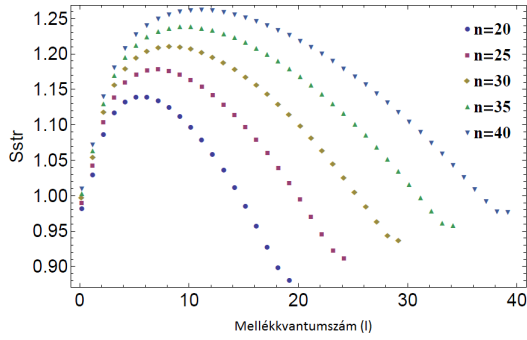


(a) Az entrópia a fő- (n) és mellékkvantumszám (l) függvényében

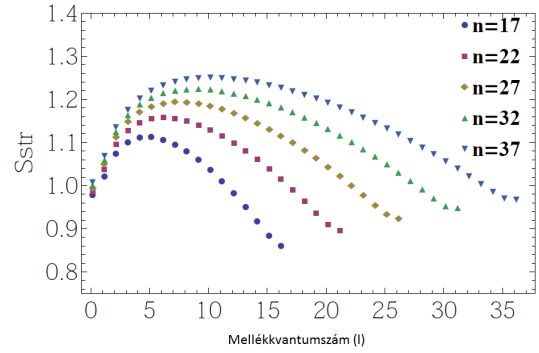


(b) A szerkezeti entrópia a fő- (n) és mellékkvantumszám (l) függvényében

14. ábra. A hidrogénatom vizsgálata



(a) A szerkezeti entrópia a fő- (n) és mellékkvantumszám (l) függvényében

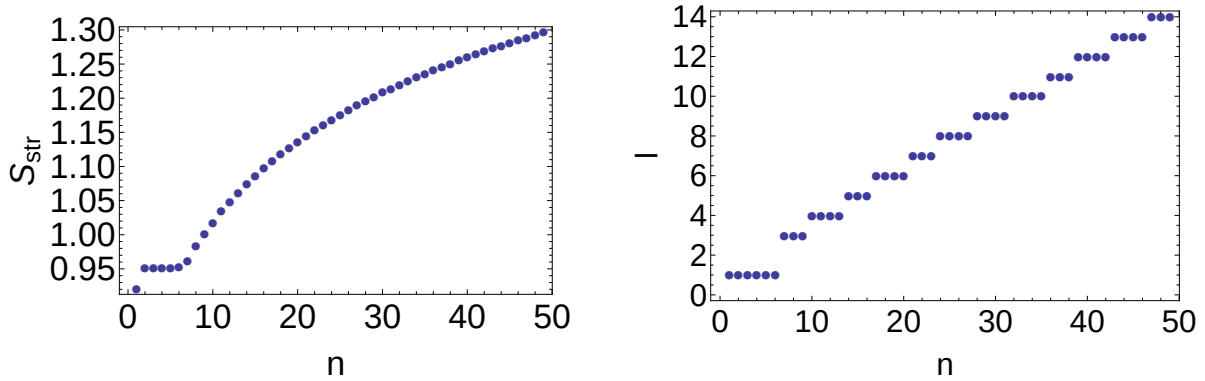


(b) A szerkezeti entrópia a fő- (n) és mellékkvantumszám (l) függvényében

15. ábra. A hidrogénatom vizsgálata

$n = 37$ esetben az $l = n - 1 = 36$ esetben még magasabb is a szerkezeti entrópia, mint az $l = 35$ esetben. Ennek magyarázatát még nem találtuk meg.

A maximum helyei egy görbén helyezkednek el n és l függvényében. Ezt a görbét tanulmányozom részletesen a továbbiakban. A maximumok helyeit láthatjuk a (16b), értékeiket pedig a (16a) ábrán. A maximumhelyek ábrázolásánál megfigyelhető, hogy az összetartozó $l - n$ párok egy egyenesre esnek, továbbá megfigyelhetünk egy periodikusságot, vagyis, hogy adott l esetén 3–4 állapot



(a) Maximumok értékei a főkvantumszám (n) függvényében (b) A szerkezeti entrópia maximumok helyei

16. ábra. A hidrogénatom szerkezeti entrópia maximumhelyeinek vizsgálata

maximális komplexitású állapota esik ugyanarra az n értékre. A (13a) és a (13b) ábrák közötti hasonlóság alapja, hogy mindkettő a kiterjedést méri, ezen felületek erősen hasonlítanak a (14a) ábrára is, vagyis azt mondhatjuk, hogy az entrópia jelentős része ismét a kiterjedésből származik. A felületeket nagy n értékre vizsgálva megállapíthatjuk, hogy a szemiklasszikus átmenet ismét egy konkáv görbe mentén megy végbe, megközelítőleg logaritmikusan. A különböző entrópiatagok viselkedése a szemiklasszikus átmenet során a függelékben található ábrákon követhető nyomon.

3. Kvantumoptikai alkalmazás

3.1. Koherens állapot

Koherens állapotnak nevezzük azokat az állapotokat ($|\alpha\rangle$), melyek a

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (54)$$

sajátértékegyenletet kielégítik, ahol $\hat{a}$ az eltüntető operátor. Bizonyítható, hogy ezek az állapotok a

$$\sigma_x \sigma_p \leq \frac{\hbar}{2} \quad (55)$$

Heisenberg-féle határozatlansági relációt egyenlőségbe viszik. A hullámfüggvény x -reprezentációban egy Gauss-függvény:

$$\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle = N \exp\left(\frac{i}{\hbar}\langle p\rangle_\alpha x - \frac{m\omega}{2\hbar}(x - \langle x\rangle_\alpha)\right), \quad (56)$$

ahol $\langle x \rangle_\alpha = \sqrt{2\hbar/(m\omega)}\Re(\alpha)$ és $\langle p \rangle_\alpha = \sqrt{2\hbar m\omega}\Im(\alpha)$. A Gauss-függvény szerkezeti entrópiája minden egyébtől függetlenül: $S_{str} = 0,1534$. Ha elvégezzük a Husimi-transzformációt (28):

$$H(q, p) = N \exp\left(-\frac{q^2}{2} - \frac{p^2}{2}\right), \quad (57)$$

kapunk, N a normafaktor. A Husimi-függvény szerkezeti entrópiája: $S_{str} = 0.30685$, ami épp duplája az x -reprezentációbeli S_{str} értéknek. Ez nem meglepetés, mert a Husimi-függvény két független normális-eloszlású valószínűségi változó együttes eloszlása. Ilyen esetben a szerkezeti entrópia integrálja:

$$S_{str} = S - S_{ext} = - \int \rho(p)\rho(q) \ln(\rho(p)\rho(q)) dp dq + \ln \int (\rho(p)^2 \rho(q)^2) dp dq = \quad (58)$$

$$= - \int \rho(p)\rho(q) \ln(\rho(p)) dp dq - \int \rho(p)\rho(q) \ln(\rho(q)) dp dq + \quad (59)$$

$$+ \ln \int (\rho(p)^2) dp + \ln \int (\rho(q)^2) dq = \quad (60)$$

$$= S_p + S_q + \ln(D_p) + \ln(D_q), \quad (61)$$

mivel $\int \rho(q) dq = 1$ és $\int \rho(p) dp = 1$. A további két alfejezetben a koherens állapotokból képzett állapotok vizsgálatával foglalkozunk.

3.2. Schrödinger-macska állapot

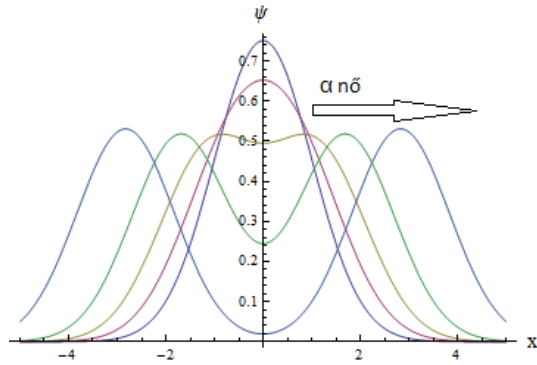
A Schrödinger-macska állapotot a kvantum-optikában a két koherens állapot szuperpozíciója:

$$|\psi_{cat}\rangle = N(|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle), \quad (62)$$

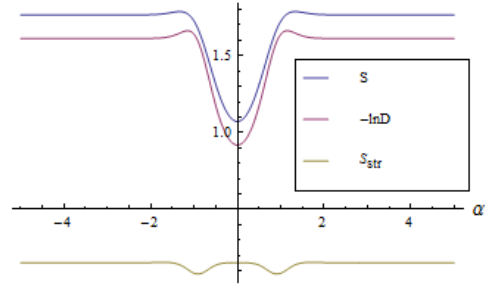
ahol N a normálás. Az x -beli hullámfüggvény:

$$\psi_{cat}(x) = \frac{\exp\left(-\frac{(-\sqrt{2}\alpha+x)^2}{2}\right) + \exp\left(-\frac{(\sqrt{2}\alpha+x)^2}{2}\right)}{\sqrt{2(1 + \exp(-2\alpha^2))} \sqrt{\pi}}. \quad (63)$$

A hullámfüggvény a (17a) ábrán látható, ahol α paraméter = 0–2 tartományban változik. Az entrópia-tagok a (17b) ábrán láthatóak. A teljes- és a kiterjedési entrópia-tag esetén is megfigyelhetünk egy túllövést $\alpha = 1$ és $\alpha = 1,5$ között. A magas entrópiás állapotok azok, amelyek hullámfüggvényében már határozottan megkülönböztethető a két Gauss-görbe, de a köztes rész még nem elhanyagolható. Ezek szerint a két Gauss-görbe átfedése okozza a többlet entrópiát. A szerkezeti entrópia mindeközben minimális értéket vesz fel, ez azért lehetséges, mert a két Gauss-görbe közti rész nagyjából egy egyenletes eloszlás, így ez csökkenti az S_{str} értékét. Az $\alpha = 0$, és



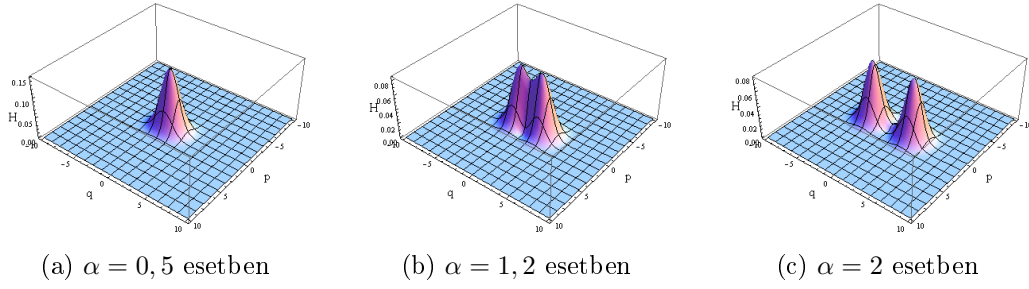
(a) A Schrödinger-macska állapot hullámfüggvénye növekvő α esetben



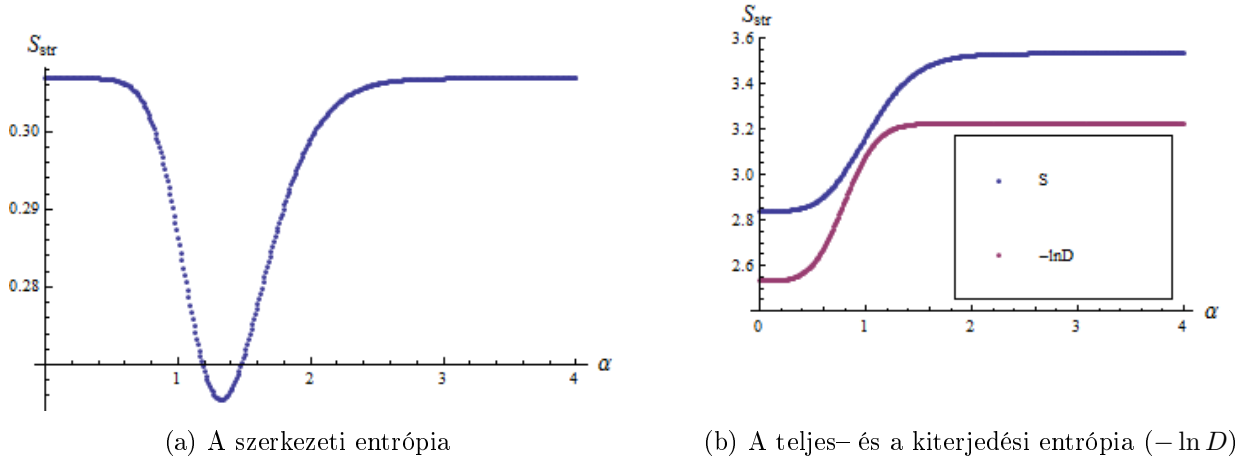
(b) A Schrödinger-macska állapot entrópiái α függvényében

17. ábra. A Schrödinger-macska állapot x -beli hullámfüggvénye, és entrópiái

$\alpha = \infty$ határesetben a replikációs invariancia miatt a szerkezeti entrópia azonos értéket vesz fel. Az interferencia esetén értéke megemelkedik. A Husimi-transzformáltat megkonstruálva (18. ábra) kiszámíthatjuk a fázis-térbeli entrópia-tagokat (19. ábra). A Husimi-transzformált entrópia-tagjai nagy hasonlóságot mutatnak az x -reprezentációbeli entrópia-tagokkal. Ez nem tekinthető különösebb meglepetésnek, hiszen a koherens állapot x - és p -reprezentációja azonos. Azonban a teljes- és a szerkezeti entrópia túllövése eltűnik Husimi-függvény esetén. Ez annak következménye, hogy a Husimi-függvény átlagol mind x -, mind pedig p -irányban (lásd: (28) egyenlet λ paramétere), így elfedhet bizonyos jelenségeket, melyek az adott iránybeli felbontás alatti méretűek. A felbontás növelésével ezek az effektusok ismét megjelennek az entrópia-tagokban, így például 20. ábrán ismét megjelenik a túllövés S_{ext} függvényében. Ez a jelenség felhívja a figyelmünket a Husimi-függvény ezen hiányosságára. Sajnos azonban az összes ismert fázis-térbeli eloszlásfüggvénynek vannak hiányosságai. A szerkezeti entrópia Husimi- és x -reprezentációbeli képét közös ábrán is szerepeltetjük (21. ábra) a könnyebb összehasonlíthatóság érdekében. A szerkezeti entrópia függvényéről Husimi-transzformált esetén elmondható, hogy a replikációs tulajdonság fázis-téren is él, hiszen $\alpha \rightarrow 0$, és $\alpha \rightarrow \infty$ esetében azonos értéket vesz fel. Következő érdekesség, hogy ezekben a határesetekben az x -beli S_{str} pont fele a Husimi- S_{str} -nek. Ez pontosan megegyezik a koherens állapotnál mondottakkal. Az átlapolás eltűnésénél a szerkezeti-entrópia két független koherens állapotnak megfelelően egyetlen koherens állapot szerkezeti-entrópiáját veszi fel.



18. ábra. Schrödinger-macska állapot Husimi-transzformáltja ($\lambda = 1$)



19. ábra. Schrödinger-macska állapot Husimi-transzformáltjának entrópiái α függvényében ($\lambda = 1$)

3.3. A squeezed vákuum-állapot

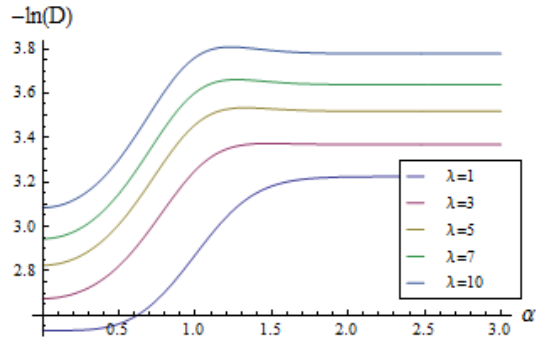
A leggyakrabban vizsgált koherens állapot a harmonikus oszcillátor alapállapota, azaz a vákuum-állapot. Ezen a koherens állapoton hajtunk végre némi változtatást az alábbiakban.

Egy harmonikus oszcillátor alapállapota $t = 0$ -ban,

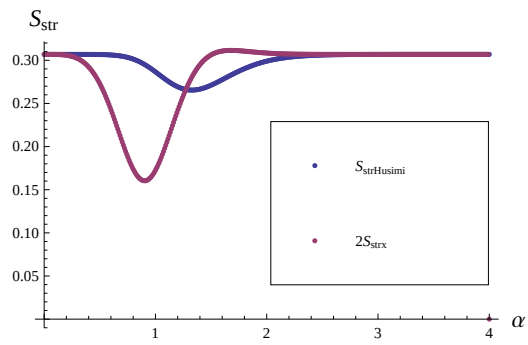
$$\Psi(x, 0) = \left(\frac{1}{s^2 \pi} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{x^2}{2s^2} \right), \quad (64)$$

ahol $s = 1$ a squeezing paraméter. Ha az állapotot s paraméter szerint változtatjuk, akkor $s > 1$ esetben az állapot szélesebb, ha $s < 1$ az állapot összenyomottabb (squeezed) lesz, mint az alapállapot. Azt várjuk, hogy az s paraméter növekedtével a delokalizációs entrópia nő, a teljes entrópia csökken, de a szerkezeti entrópia nem változik, hiszen új struktúra nem került a rendszerbe. Most a hullámfüggvény evolúcióját szeretnénk nyomon követni, ehhez [29] szerint

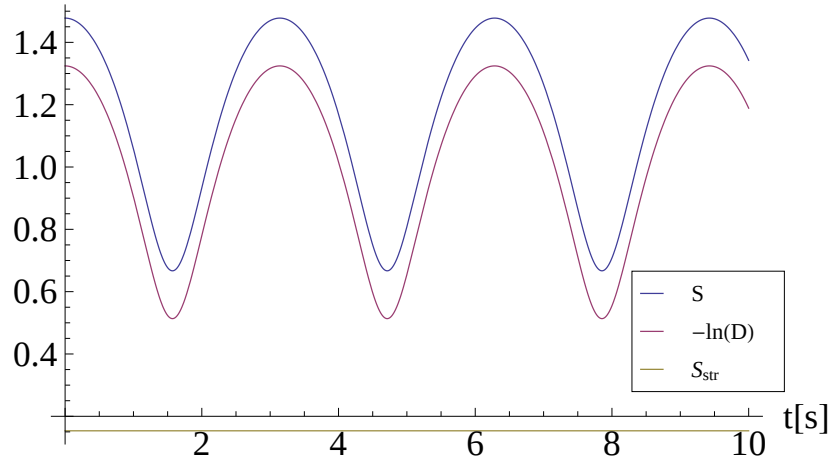
$$G(x, x', t) = \frac{e^{it/2 + i\pi/4}}{\sqrt{2\pi \sin t}} \exp \left(i \frac{x^2 \cos t + x'^2 \cos t - 2xx'}{2 \sin t} \right) \quad (65)$$



20. ábra. A Schrödinger-macska állapot kiterjedési entrópiája különböző felbontások (λ) esetén



21. ábra. A Schrödinger-macska állapot szerkezeti entrópiája x - és Husimi- reprezentációban ($\lambda = 1$)



22. ábra. Squeezed-vákuum entrópiái

A Green-függvényt a hullámfüggvénnyel összeintegrálva, majd abszolút-érték négyzetét véve, megkapjuk

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma_x(t)} \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma_x^2(t)}\right) \quad (66)$$

térbeli sűrűséget, ahol

$$\sigma_x^2(t) = \frac{1}{s^2} \sin^2 t + s^2 \cos^2 t \quad (67)$$

Az ilyen állapotot nevezzük squeezed-vákuumnak, bár az időfüggést figyelembe véve pulzáló-squeezed állapot lenne a helyesebb kifejezés. A kiszámolt entrópiák a (22) ábrán láthatóak, a Gauss-függvény szórásának függvényében az entrópia, és a kiterjedési entrópia $(-\ln D)$ ugyan változnak, de a szerkezeti entrópia nem, hiszen a hullámfüggvény szerkezete nem változik.

3.4. Gerjesztett squeezed vákuum-állapotok

A kvantum-optikai alkalmazások tekintetében igen nagy jelentőséggel bír a squeezed-fotonok gerjesztése. A lézer-berendezések elterjedésével a kísérleti fizikusok képesek squeezed-fotonok előállítására. Ez az összefonódottság vizsgálatában nagy jelentőséggel bír. A XXI. századra ezek az állapotok széles körben használtak optikai kommunikációra, és gyenge jelek detektálására is, így nem meglepő, hogy a kvantumoptika egyik fő feladata lett ezen állapotok tanulmányozása, létrehozása, manipulálása. Mivel ezen állapotokat kommunikációra is használhatjuk, különösen fontos az információelméleti elemzésük. A szerkezeti entrópia jelentősége talán ebben az esetben domborodik

ki legjobban, mert képesek vagyunk az információtartalomnak csak a szerkezet miatt adódó részét elkülöníteni. Ez azért fontos, mert a digitális kommunikációban nem a foton-hullámcsomag térbeli-, vagy időbeli kiterjedése fontos számunkra, hanem az eloszlás szerkezete, formája. A vizsgálatokat fázis-térben végezzük. A Husimi-függvény megadható egy hosszas számolás után analitikusan [30], itt csak a végeredményt közöljük:

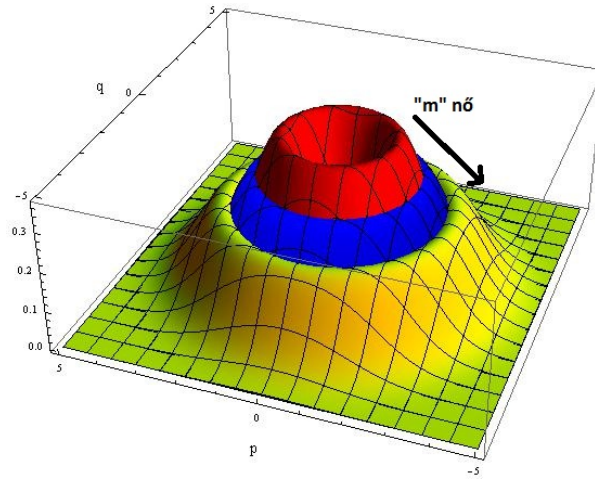
$$H(p, q) = \frac{\text{sech}(r)}{m!(\cosh(r))^m P_m(\cosh(r))} \frac{2^{1-m} \sqrt{\kappa} |\kappa - 1|^m}{|G|^{m+1}} \times \\ \times \left| H_m \left(\frac{\kappa q - ip}{\sqrt{G(\kappa - 1)}} \right) \right|^2 \exp \left(\left(-\frac{\kappa q^2 + p^2}{2} + \frac{\tanh(r)(\kappa q - ip)^2}{G} \right) \frac{1}{1 + \kappa} \right)^2 \quad (68)$$

ahol r a squeezing paraméter, m a gerjesztések száma, κ a Husimi-transzformációban lévő Gauss-függvény térbeli szélesség-értéke, H_n az n -ed rendű Hermite-polinom P a Legendre-polinom, $G = 1 + \kappa - (1 - \kappa) \tanh(r)$. Speciálisan $r = 0$ esetben:

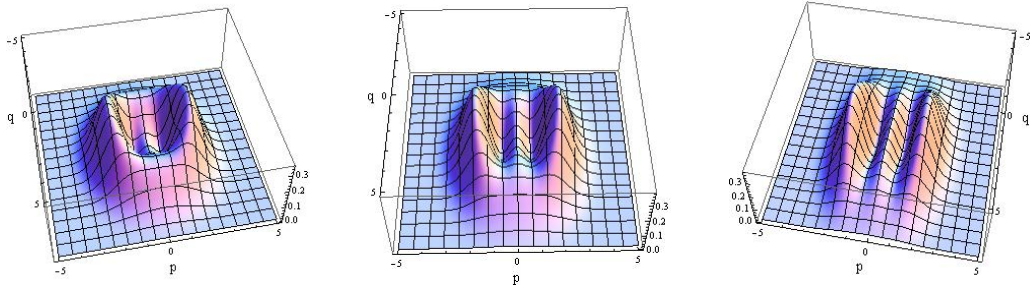
$$H(p, q) = \frac{2^{1-m} \sqrt{\kappa} |\kappa - 1|^m}{m! |1 + \kappa|^{m+1}} \left| H_m \left(\frac{\kappa q - ip}{\sqrt{\kappa^2 - 1}} \right) \right|^2 \exp \left(-\frac{\kappa q^2 + p^2}{2(1 + \kappa)} \right)^2. \quad (69)$$

Először ez utóbbi esettel foglalkozunk. A (23) ábrán azt láthatjuk, hogy a gerjesztések számának növekedésével a fázis-térbeli sűrűség, szétfolyik, miközben a szerkezete kissé megváltozik. A (24a), a (24b), és a (24c) ábrákon a κ változásának hatását vizsgálhatjuk, ez a paraméter a simító Gauss-görbe q -beli szélessége, tehát a felbontás állítható vele. A q -beli felbontás romlásával párhuzamosan a p -beli felbontás javul, és ez követhető nyomon az ábrákon. Igen látványos, hogy a szerkezeti entrópiának kifejezett minimuma van akkor, ha a felbontás p - és q -irányokban megegyezik, a teljes entrópia és a kiterjedési entrópia nem rendelkezik ennyire kifejezett minimummal, de a minimum ekkor is a $\kappa = 1$ értéknél van. Az ábrán furcsa lehet, hogy a $\kappa \in [0, 1]$ -en sokkal gyorsabban változnak a függvények, mint $\kappa = 1$ felett, de ez csak annak az oka, hogy ha a q -beli felbontás κ , a p -beli $1/\kappa$.

A számításokat elvégezve squeezed ($r \neq 0$) állapotokra, melyeknek Husimi-függvényei a (26) ábrákon láthatóak. A szerkezeti entrópia a (27a), a teljes- és a kiterjedési entrópia a (27b) ábrán. Az ábrák természetesen az $r = 0$ vonalra szimmetrikusak, $\kappa = 1$ miatt. A szerkezeti entrópiáról rögtön elmondhatjuk, hogy a valós squeezed állapot ($r \neq 0$) esetében magasabb, mint koherens állapot esetén, pedig az entrópiának $r = 0$ -ban van maximuma. Ennek jelentősége abban áll, hogy a koherens állapot összes entrópiája magasabb, mint a squeezed-állapoté, de ennek az entrópiának nagy része adódik a kiterjedésből (delokalizációból). A squeezed-állapot magasabb szerkezeti információ-tartalommal rendelkezik. Az optikai kommunikációban, számítástechnikában így a squeezed-állapotok könnyebben megkülönböztethetőek, ezért is használhatóak jobban például adatátvitelre.



23. ábra. Gerjesztett vákuum-állapotok Husimi-függvénye $r = 0$, $\kappa = 1$, $m = 1, 2, 4$ esetben

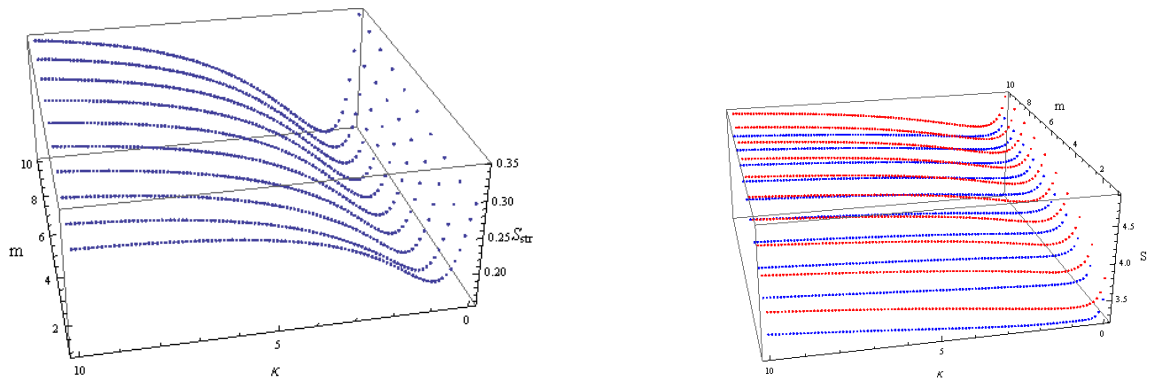


(a) $r = 0$, $\kappa = 2$, $m = 2$ esetben

(b) $r = 0$, $\kappa = 3$, $m = 2$ esetben

(c) $r = 0$, $\kappa = 5$, $m = 2$ esetben

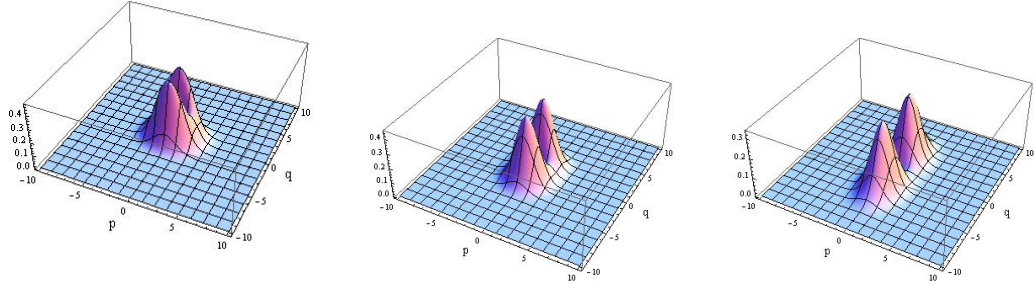
24. ábra. Gerjesztett vákuum-állapot Husimi-függvénye



(a) A szerkezeti entrópia

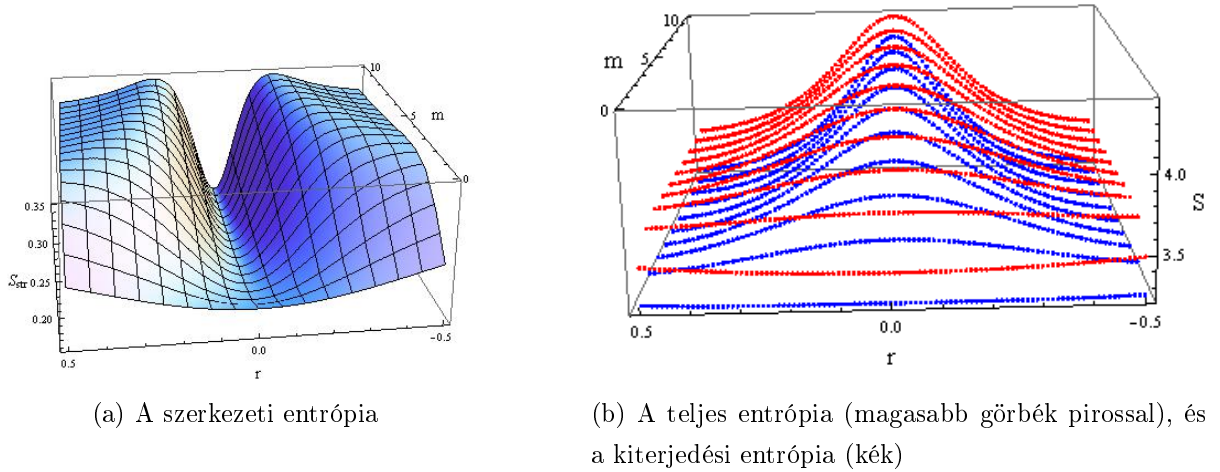
(b) A teljes entrópia (magasabb görbék pirossal), és a kiterjedési entrópia (kék)

25. ábra. Entrópiák κ , és m értékek függvényében



(a) $r = 0,1$, $\kappa = 2$, $m = 1$ esetben (b) $r = 0,5$, $\kappa = 2$, $m = 1$ esetben (c) $r = 1$, $\kappa = 2$, $m = 2$ esetben

26. ábra. Gerjesztett vákuum-állapot Husimi-függvénye



(a) A szerkezeti entrópia

(b) A teljes entrópia (magasabb görbék pirossal), és a kiterjedési entrópia (kék)

27. ábra. Entrópiák r , és m értékek függvényében ($\kappa = 1$)

3.5. A Jaynes-Cummings modell

A dolgozat további részében a környezet hatását vizsgáljuk egyszerű kétállapotú rendszerekre. Ezek közül a legjobban kidolgozott modell a Jaynes-Cummings modell.

A Jaynes-Cummings modellben egy kétállapotú atomot tanulmányozunk miközben egy oszcillátorral hat kölcsön. Mind a két rendszer Hamilton-operátorát jól ismerjük, ehhez hozzáveszünk egy kölcsönhatási Hamilton-operátort, ekkor ez a zárt rendszer egyetlen hullámfüggvénnyel leírható. Az atom tanulmányozásához a környezet állapotaira nyomot képzünk. A kétállapotú rendszer nem írható le egyetlen hullámfüggvénnyel, az ilyen állapotokat kevert állapotoknak nevezzük. A kevert állapotok kezelése érdekében a következőkben sűrűségoperátorokkal leírható rendszerek szerkezeti entrópiájának meghatározását mutatom meg általánosan, ami egyszerű általánosítása a bevezetőben említett hullámfüggvényes módszernek. Az előkészületek után a módszert alkalmazom a

Jaynes-Cummings modellre (JCM). Vezessük be a sűrűségoperátort zárt rendszerre, tiszta állapot esetén:

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi| \quad (70)$$

ahol $|\psi\rangle$ az állapotot leíró hullámfüggvény. A sűrűségoperátor koordináta-reprezentációjában

$$\rho(x, x') = \psi(x)\psi^*(x'). \quad (71)$$

A teljes rendszer sajátállapotát leírhatjuk $|\psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\alpha\rangle$ alakban, ahol $|\psi_A\rangle$ a rendszer állapota (JCM esetében a kétállapotú atom), $|\alpha\rangle$ pedig a környezeté (JCM-ben egyetlen oszcillátor). Zárt rendszer sűrűségoperátorából képezhető egy alrendszer sűrűségoperátora, úgy, hogy a környezet állapotaira nézve nyomot képzünk:

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_R |\psi\rangle \langle \psi| \quad (72)$$

A sűrűségoperátorra felírható a Neumann-egyenlet, mely az időfejlődését írja le:

$$\dot{\hat{\rho}} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (73)$$

A sűrűségoperátor nyoma egységnyi, ami a hullámfüggvények normáltságából következik. A sűrűségoperátor négyzetének nyoma azonban már

$$0 \leq \text{Tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1. \quad (74)$$

Ez utóbbi mennyiséget nevezzük tisztaságnak, mivel 1 értéknél az állapot tiszta, azaz egyetlen sajátfüggvénnyel leírható. A tisztaság értéke annál kisebb, minél több sajátfüggvény kell a részrendszer leírásához, és ezek minél jobban eloszlának. Tehát, ha az állapot leírásához használt lineárkombináció együtthatói c_i -k, akkor a tisztaság $\sum c_i^4$ módon adódik, miközben $\sum c_i^2 = 1$. Ezért c_i^2 együtthatókat egy diszkrét valószínűségi eloszlásnak tekinthetjük. A bevezetőkben megfogalmazottak pont egy ilyen eloszlásra vonatkoznak, így a tisztaság alkalmas a delokalizáció leírására, és összhangban áll az

$$S = -\text{Tr}[\hat{\rho} \ln \hat{\rho}] \quad (75)$$

Neumann-entrópiával is. Ezek szerint a kiterjedési entrópia,

$$S_{ext} = -\ln(\text{Tr}[\hat{\rho}^2]) = -\ln(D). \quad (76)$$

A továbbiakat alkalmazom a Jaynes-Cummings modellre (JCM) [23], mely egy kétszintű atom k -fotonos reakcióját írja le a sugárzási térrel. A Hamilton-operátor forgó-hullámú közelítésben (RWA) ($\hbar = 1$)

$$\hat{H} = \omega_O(\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2) + \omega_A \hat{\sigma}_z + \lambda(\hat{a}^{\dagger k} \hat{\sigma}_- + \hat{a}^k \hat{\sigma}_+) \quad (77)$$

ahol ω_O az oszcillátor frekvenciája, ω_A az átmenet frekvenciája az alap ($|g\rangle$), és a gerjesztett ($|e\rangle$) atomi állapotok között, λ a csatolás erőssége, a és $a^\dagger$ az oszcillátor, míg $\sigma^\pm$ az atom léptető operátorai. A Hamilton-operátor így három tagból áll balról az első az oszcillátort, a második az atomot írja le. A harmadik tag a csatolási Hamilton-operátor, lényegében ez az egyszerűsítés a Jaynes-Cummings-modell. A továbbiakban az oszcillátor koherens állapotból indul $|\alpha\rangle = \sum_n \mathcal{C}_n |n\rangle$, $\mathcal{C}_n = \exp\left\{-\frac{|\alpha|^2}{2}\right\} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}$, ahol $\alpha = \sqrt{n}e^{i\eta}$, és az egyszerűség kedvéért a fázist nullának választom. Az atom kezdeti állapota a Bloch-gömbön az alábbiak szerint definiált [24]:

$$|\psi_A(0)\rangle = \cos(\Theta/2) |e\rangle + \sin(\Theta/2) e^{i\phi} |g\rangle, \quad (78)$$

ahol Θ a koherencia szög, ϕ a fázis az alap és a gerjesztett állapotok között. A hullámfüggvény időfejlődése a (73) Neumann-egyenlet miatt:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \{\psi_e(n, t) |n, e\rangle + \psi_g(n, t) |n, g\rangle\}, \quad (79)$$

ahol a $\psi_e(n, t)$ és $\psi_g(n, t)$ együtthatók

$$\begin{aligned} \psi_e(n, t) &= \mathcal{C}_n \left(\cos\left(\frac{\Theta}{2}\right) \cos\left(\lambda t \sqrt{\frac{(n+k)!}{n!}}\right) + i\alpha^k \sqrt{\frac{n!}{(n+k)!}} \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right) e^{i\phi} \sin\left(\lambda t \sqrt{\frac{(n+k)!}{n!}}\right) \right) \\ \psi_g(n, t) &= \mathcal{C}_n \left(\sin\left(\frac{\Theta}{2}\right) e^{i\phi} \cos\left(\lambda t \sqrt{\frac{n!}{(n-k)!}}\right) - i\alpha^{-k} \sqrt{\frac{n!}{(n-k)!}} \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right) \sin\left(\lambda t \sqrt{\frac{n!}{(n-k)!}}\right) \right) \end{aligned}$$

módon adódnak. Speciálisan, ha egy-fotonos kölcsönhatásokra szorítkozunk ($k=1$):

$$\begin{aligned} \psi_e(n, t) &= \mathcal{C}_{n+1} \left(\cos\left(\frac{\Theta}{2}\right) \cos(\lambda t \sqrt{n}) + i\alpha^k \sqrt{\frac{1}{(n+1)}} \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right) e^{i\phi} \sin(\lambda t \sqrt{n+1}) \right) \\ \psi_g(n, t) &= \mathcal{C}_n \left(\sin\left(\frac{\Theta}{2}\right) e^{i\phi} \cos(\lambda t \sqrt{n}) - i\alpha^{-k} \sqrt{n} \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right) \sin(\lambda t \sqrt{n}) \right) \end{aligned}$$

Az atomi sűrűségmátrix a környezetre történő parciális trace-el,

$$\hat{\rho}_A(t) = \text{Tr}_R \hat{\rho}(t) = \begin{bmatrix} \hat{\rho}_{ee}(t) & \hat{\rho}_{eg}(t) \\ \hat{\rho}_{ge}(t) & \hat{\rho}_{gg}(t) \end{bmatrix}, \quad (80)$$

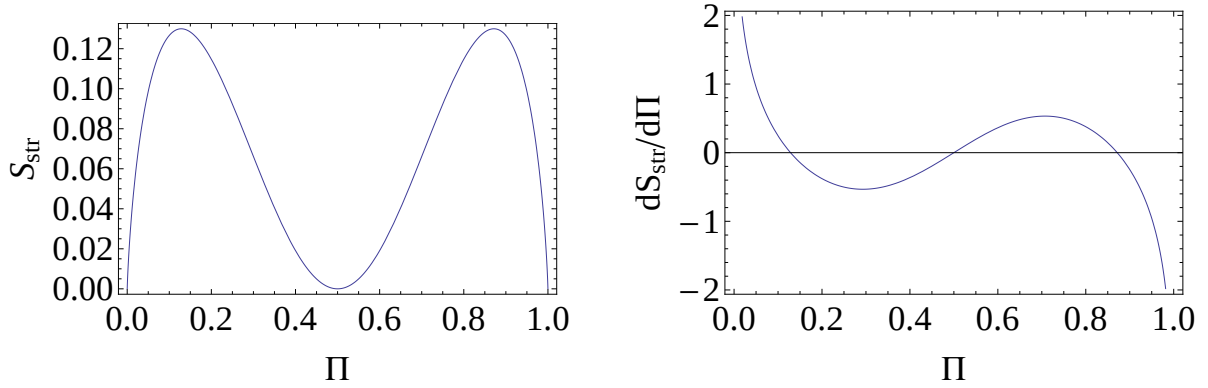
ahol $\hat{\rho}_{ee}(t) = 1 - \hat{\rho}_{gg}(t) = \sum |\psi_e(n, t)|^2$ és $\hat{\rho}_{eg}(t) = \hat{\rho}_{ge}(t)^* = \sum \psi_e(n, t) \psi_g^*(n, t)$. A szerkezeti entrópia számításához a (80) mátrix sajátértékeire ($\Pi_1(t), \Pi_2(t)$) van szükség, ezek megállapítása egyszerű, ezekkel:

$$S_{str} = -(\Pi_1(t) \ln \Pi_1(t) + \Pi_2(t) \ln \Pi_2(t)) + \ln(\Pi_1(t)^2 + \Pi_2(t)^2). \quad (81)$$

Az entrópia extrémumai a $\Pi_1 + \Pi_2 = 1$ feltétel mellett $\Pi_1 = \Pi_2 = 1/2$ és $S_{max} = \ln 2 = 0.693$. A szerkezeti entrópia maximumát is megkereshetjük a

$$S_{str} = -(\Pi_1 \ln \Pi_1 + (1 - \Pi_1) \ln(1 - \Pi_1)) + \ln(\Pi_1^2 + (1 - \Pi_1)^2) \quad (82)$$

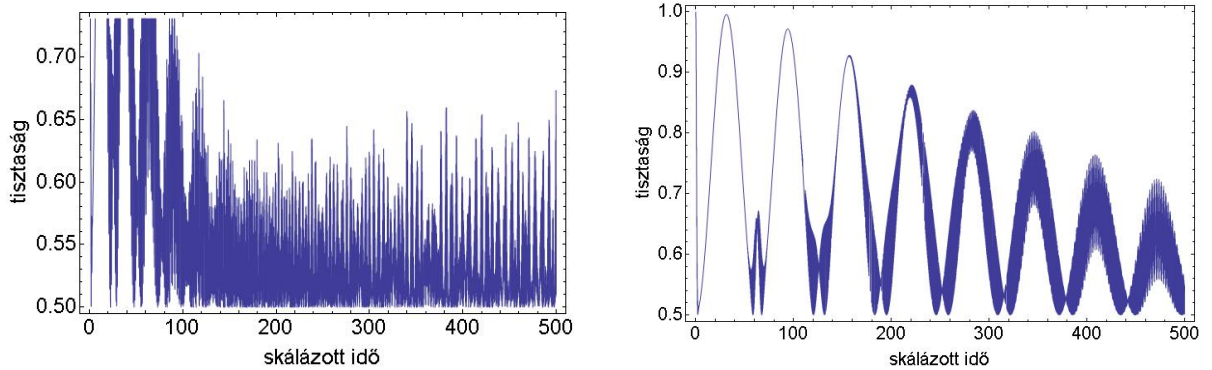
kifejezés deriválásával kapott függvénynek három gyöke van, $(0, 1284; 0, 5; 1 - 0, 1284)$. Az S_{str} -t a Π_1 függvényében ábrázolva láthatjuk (28a. ábra), hogy két maximumhelye van, melyeknél értéke 0,13. Ez bármely kétállapotú rendszerre igaz. A deriváltat a (28b) ábrán tekinthetjük meg.



(a) A szerkezeti entrópia viselkedése Π sajátérték függvényében

(b) A szerkezeti entrópia deriváltjának viselkedése Π sajátérték függvényében

28. ábra. Egy kétállapotú rendszer szerkezeti entrópiájának vizsgálata a sajátértékek függvényében

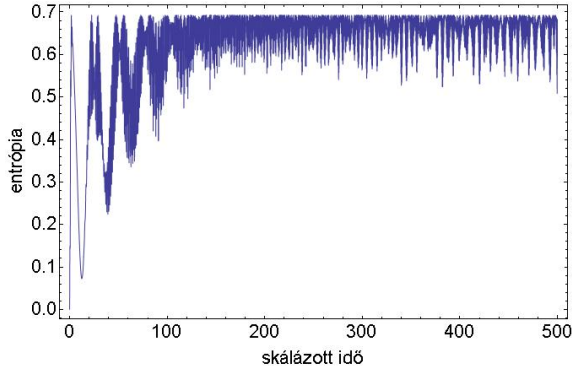


(a) A tisztaság a JCM-ben $\Theta = 0$, $\phi = 0$, $k = 1$ és $\alpha = 4$ esetben

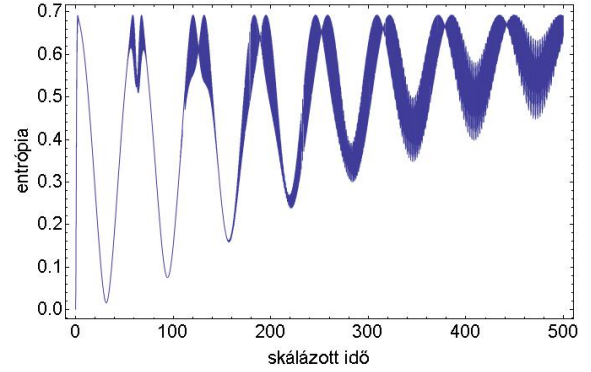
(b) A tisztaság a JCM-ben $\Theta = 0$, $\phi = 0$, $k = 1$ és $\alpha = 10$ esetben

29. ábra. A Jaynes-Cummings modell tisztaságának vizsgálata

Az ábrákon látható, milyen a tisztaság (29a. és 29b. ábrák) az entrópia (30a. és 30b. ábrák), valamint a szerkezeti entrópia (31a. és 31b. ábrák) időfejlődése. A baloldali ábrákon egy tipikus

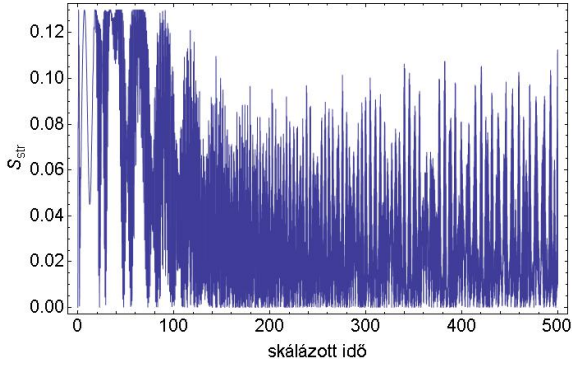


(a) A Shanon-entrópia a JCM-ben $\Theta = 0$, $\phi = 0$, $k = 1$ és $\alpha = 4$ esetben

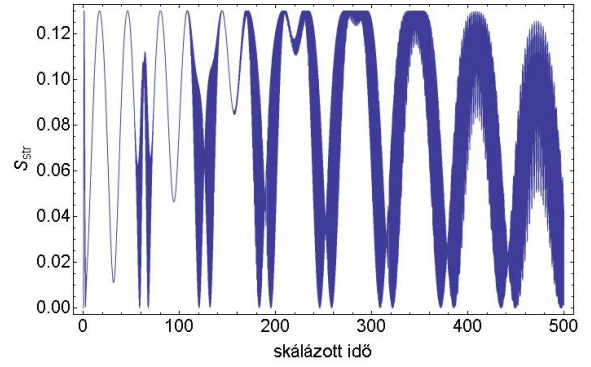


(b) A Shanon-entrópia a JCM-ben $\Theta = 0$, $\phi = 0$, $k = 1$ és $\alpha = 10$ esetben

30. ábra. A Jaynes-Cummings modell Shannon-entrópiájának vizsgálata



(a) A szerkezeti entrópia a JCM-ben $\Theta = 0$, $\phi = 0$, $k = 1$ és $\alpha = 4$ esetben



(b) A szerkezeti entrópia a JCM-ben $\Theta = 0$, $\phi = 0$, $k = 1$ és $\alpha = 10$ esetben

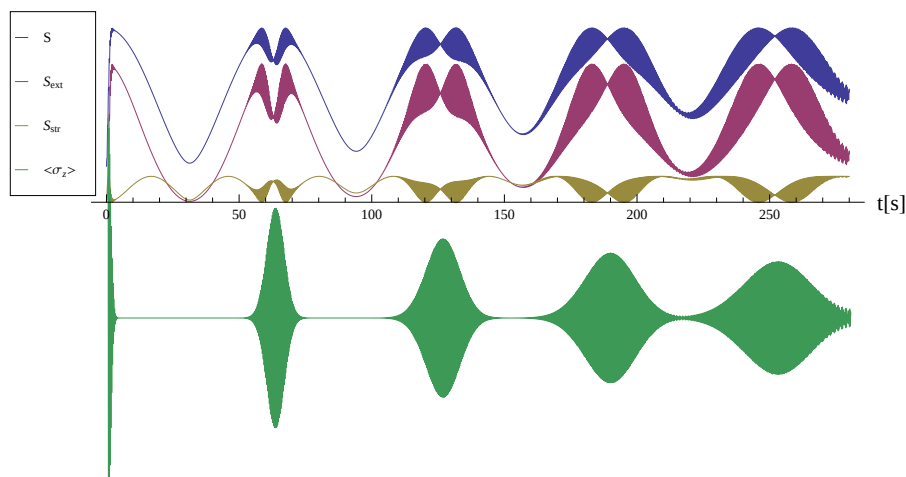
31. ábra. A Jaynes-Cummings modell szerkezeti entrópiájának vizsgálata

beállítás látható, a tisztaság gyorsan csökken, a kölcsönhatás gyorsan elmosza a koherenciát. Ezzel párhuzamosan az entrópia eléri maximális értékét, a rendezetlenség maximális lesz. Az entrópia maximális értékéhez a sajátértékek 0,5 értéke tartozik, ez állandósul a rendszerben, természetesen zajjal. A szerkezeti entrópia is zajossá válik, de megállapítható, hogy nem igazán koncentrált, vagyis a szerkezeti entrópia "satíroz" a minimuma és egy maximális érték közt. A jobboldali ábrák paraméterei a következő fejezet tipikus beállításai lesznek, mikor az újjáéledés jelenségét tanulmányozzuk. Ebben az esetben az időfejlődés struktúrája jól megfigyelhető. A tisztaság és az entrópia majdnem tükörképei egymásnak, ezeken két megfigyelést végezhetünk. Az egyik, hogy jól meghatározott aszimptotához tartanak a görbék, vagyis a tisztaság zérushoz, az entrópia a maximumához. A másik megfigyelés, hogy időben ismétlődő alakzatok alakulnak ki, melyeken egyre nagyobb zaj ül. Ezzel szemben a szerkezeti entrópia ezen az időskálán nem tart aszimptotához,

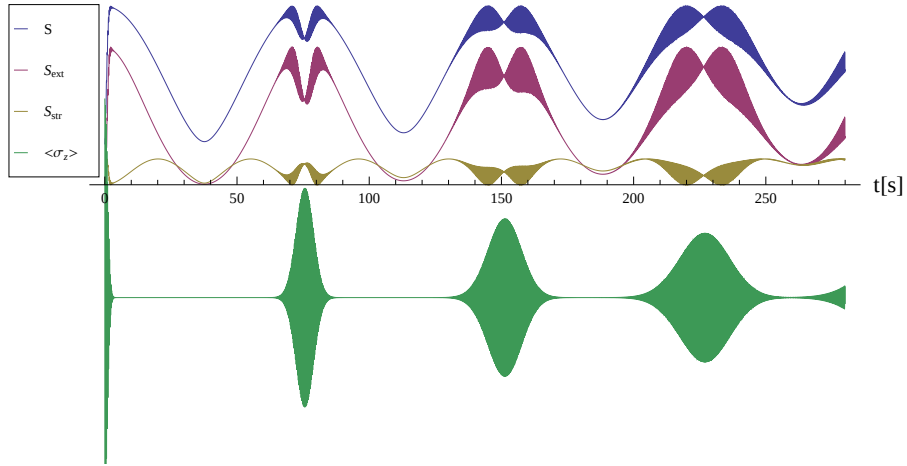
de a zaj ebben az esetben is erősödik. Azt találtuk tehát, hogy a szerkezeti entrópia megőrzi a kétállapotú rendszer sajátosságait, de nem tart különösebben semmilyen határértékhez. Ez annak a következménye, hogy a szerkezeti entrópia egyetlen paramétertől függ, így bármilyen zaj a sajátértékben azonnal megjelenik a szerkezeti entrópiában is.

3.6. Újjáéledés (revival)

A JCM-modell keretében igen gyakran vizsgált probléma az újjáéledés (revival), részletes elemzése [32]-ben megtalálható. Az újjáéledés esetén egyes oszcillációk eltűnnek, majd valamely t idővel később ismét megjelennek. Egy ilyen revival-jelenség látható a JCM egyes beállításainál. Egy ilyen beállítással láthatjuk az entrópia-tagokat, és a polarizációt ($\langle\sigma_z\rangle$) a 32. ábrán. Érdekes megfigyelni, hogy két újjáéledés között minden entrópia-tag lokális minimumot vesz fel. Igen jellegzetes alakja van a teljes és a kiterjedési entrópiának. Azt mondhatjuk, hogy egy lehetséges prediktorát találtuk az újjáéledésnek. A gyanúnk megerősödik, ha egy másik beállítással is megvizsgáljuk hogyan alakulnak az entrópiák a 33. ábrán. Mindenesetre érdekes, hogy a polarizáció konstans 0 esetén az entrópia-tagok igen erősen változnak. A revival-jelenségkör vizsgálatát most befejezzük, de a kutatás további témáját adhatja.



32. ábra. A JCM-modell Shanon-entrópája, kiterjedési-entrópiája, szerkezeti-entrópiája, és polarizációja ($\langle\sigma_z\rangle$), $\alpha = 10$, $k = 1$, $\Theta = \Phi = 0$. A görbék a függőleges skálán eltolva!



33. ábra. A JCM-modell Shanon-entrópiája, kiterjedési-entrópiája, szerkezeti-entrópiája, és polarizációja ($\langle \sigma_z \rangle$), $\alpha = 12$, $k = 1$, $\Theta = \Phi = 0$. A görbék a függőleges skálán eltolva!

4. Kvantuminformatikai alkalmazás: A qubitek

A kvantuminformatikai rendszerek frekvenciált próbakövei a komplexitás-mennyiségeknek, így a vizsgálatokat mi is elvégeztük 1-, 2-, 3- és n -qubit-es rendszerekre is. A qubit-ek kétállapotú rendszerek, a qubitek hordozói igen változatosak lehetnek, például a hidrogénatom alap- és gerjesztett állapota, vagy a spin beállása külső mágneses tér jelenlétében, stb. Egy qubit állapot reprezentálható két komplex számmal (α, β) , úgy hogy

$$|\Psi\rangle = \alpha|\downarrow\rangle + \beta|\uparrow\rangle, \quad (83)$$

ahol $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Ennek jelentése, hogy a qubit $\downarrow$ értéket vesz fel $|\alpha|^2$ valószínűséggel és $\uparrow$ értéket $|\beta|^2$ valószínűséggel. Ezen az állapoton végrehajtott transzformáció (az operátorokat a mátrixoktól megkülönböztető kalapot ebben a fejezetben elhagyjuk, de ez nem fog félreértéshez vezetni):

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad (84)$$

unitér mátrixszal lehetséges. Vegyünk egy qubit-et, erre hatva egy U mátrixszal, egy logikai műveletet hajthatunk végre, ezeket nevezzük kapuknak. Néhány fontosabb 1-qubit-es kapu:

- NOT-kapu

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- Fázis-fordító kapu

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- Hadambard-kapu

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Egy 2-qubites rendszer leírásához négy bázisra van szükség, legyenek ezek: $|\downarrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\uparrow\rangle$, ezekkel egy 2-qubites állapotot

$$\begin{pmatrix} \alpha_{\downarrow\downarrow} \\ \alpha_{\downarrow\uparrow} \\ \alpha_{\uparrow\downarrow} \\ \alpha_{\uparrow\uparrow} \end{pmatrix}$$

vektorral írhatunk le. Az első qubitet az alábbi alakban írhatnánk:

$$|\Psi_1\rangle = (|\alpha_{\downarrow\downarrow}|^2 + |\alpha_{\downarrow\uparrow}|^2)|\downarrow\rangle + (|\alpha_{\uparrow\downarrow}|^2 + |\alpha_{\uparrow\uparrow}|^2)|\uparrow\rangle \quad (85)$$

Azonban az így felírt qubitek tenzorszorzata általánosságban nem adja vissza a 2-qubites állapotot. Ha a fenti dekompozíció visszaadja a 2-qubit állapotot tiszta állapotról beszélünk, ha nem összefonódotttról. A valószínűség számításból tudjuk, hogy a marginális eloszlások szorzata akkor, és csak akkor adja vissza az együttes eloszlásfüggvényt, ha azok független valószínűségi változók [25], így azt mondhatjuk, hogy a qubitek dekompozíciója akkor lehetséges, ha azok között kölcsönhatás nincs. A kölcsönhatás erősségét jellemezhetjük az összefonódottsággal a (74) egyenletnek megfelelően. A 2-qubit esetén azonnal felírható egy maximálisan összefonódott állapot

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\downarrow\rangle + |\uparrow\uparrow\rangle), \quad (86)$$

ugyanis ebben az esetben egyetlen qubit megadásakor a másik qubit értéke is adott. Ezt Bell-állapotnak is nevezik. 2-qubites állapotok logikai kapujaiból csak egyet emelnék ki, későbbi használata miatt a kontrollált-NOT kaput:

$$CNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (87)$$

Azért kontrollált-NOT kapu, mert a 2. bit akkor fordul át, ha az első (kontroll-) bit $\uparrow$ értéket vesz fel. A CNOT kapu univerzális abban az értelemben, hogy n qubites esetben a mátrix formája azonos, csak az egységmátrix-részt kell megnövelni. Egy ilyen kapu jelentése, hogy átforgatja az utolsó qubitet, ha az összes addigi értéke: $\uparrow$.

4.1. Hamilton-operátor

A Hamilton-operátor megkonstruálásához az n -qubit rendszert azonos kétszintű atomokként képzeljük el, köztük dipól-dipól kölcsönhatással. Az atomokat kvázi-spinként kezelhetjük, így leírásukhoz használhatjuk a Pauli-mátrixokat. Az atomok igen közel helyezkednek el egymáshoz, így a környezet minden atomra azonosnak tekinthető. A környezetet elektromágneses hullámnak tekintjük, vagy oszcillátorfürdőnek. A dipól-dipól kölcsönhatás Hamiltonija:

$$H_I = \sum_{i>j}^N g_{ij} \sigma_{i,+} \sigma_{j,-} + h.c., \quad (88)$$

ahol $\sigma_{i,\pm}$ az i -edik kvázispin léptető operátora. Bevezetve a kollektív módusgerjesztő operátorokat:

$$J^{\pm} = \sum_{i=1}^N \sigma_{i,\pm} \quad (89)$$

$$J_z = \sum_{i=1}^N \sigma_{i,z}/2 \quad (90)$$

és hosszúhullámú közelítést véve: ($g_{i,j} = g$)

$$H_I = g \left(J_+ J_- - J_z - \frac{N}{2} \right). \quad (91)$$

A sűrűségoperátor időfejlődését a Mester-egyenlet írja le. Feltesszük, hogy a környezet és a kölcsönhatás gyenge, ekkor használható a Born-közelítés, [26] [27]

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -i[H_I, \rho(t)] + \frac{\gamma}{2} (2J_- \rho(t) J_+ - J_+ J_- \rho(t) - \rho(t) J_+ J_-), \quad (92)$$

ahol γ a kollektív módus lecsengési paramétere. A fenti egyenlet jobb oldalának első része egy koherens időfejlődést ír le, a második része adja a dekoherenciát. A vizsgált rendszer sűrűségoperátorát a teljes rendszer sűrűségoperátorának parciális trace-ével kapjuk meg, ahogy a (72)-ben, most a környezet állapotai az n -fotonos állapotok. Így

$$\rho(t) = \sum_n \rho^{(n)}(t), \quad (93)$$

ahol $\rho^{(n)}(t) = \text{Tr}_R(\mathbb{P}_n \rho_{tot})$, és $\mathbb{P}_n$ az n -fotonos állapotra vetítő operátor. Ekkor a Mester-egyenletet:

$$\frac{d\rho^{(n)}(t)}{dt} = -i(H_{eff}\rho^{(n)}(t) - \rho^{(n)}(t)H_{eff}^\dagger) - \gamma J_- \rho^{(n-1)}(t) J_+ (1 - \delta_{0,n}), \quad (94)$$

ahol $H_{eff} = H_I - (i\gamma/2)J_+J_-$. Ezzel a sűrűségoperátor szukcesszíve meghatározható.

4.2. 2- és 3-qubit

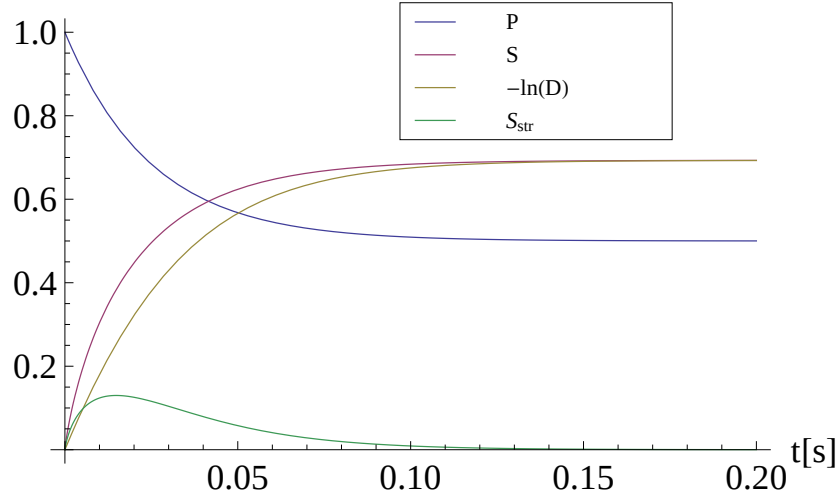
2-qubit esetén áttérve új bázisra:

$$\begin{aligned} |0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |1, 1\rangle &= (|\uparrow\uparrow\rangle) \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |1, -1\rangle &= (|\downarrow\downarrow\rangle), \end{aligned} \quad (95)$$

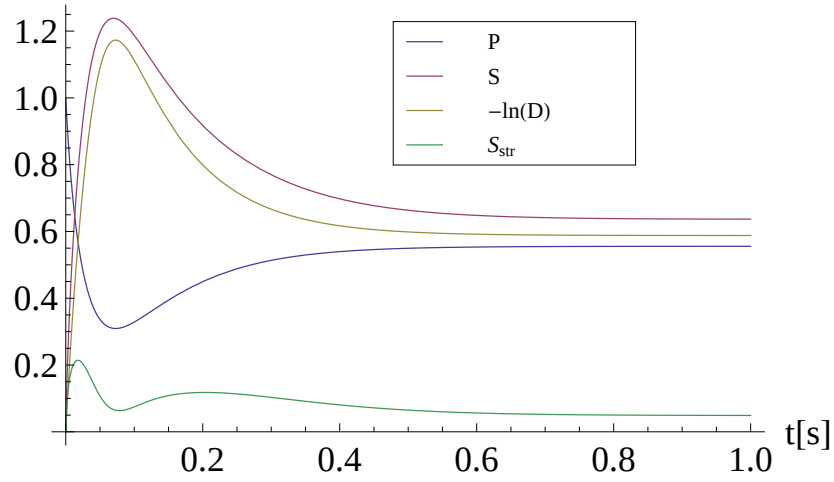
mely a J^2, J_z operátorok sajátfüggvény-rendszere, a sűrűségoperátor analitikusan kifejezhető:

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{\exp(igt-\gamma t)}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\exp(-igt-\gamma t)}{2} & 0 & \frac{\exp(-2\gamma t)}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-\exp(-2\gamma t)}{2} \end{pmatrix} \quad (96)$$

$\rho(0) = |\uparrow, \downarrow\rangle\langle\uparrow\downarrow|$ kezdeti feltételből indulva [28], ahol a 3 qubites sűrűségmátrix is megtalálható. Az entrópia- és a tisztaság értékek az idő függvényében a (34) ábrán láthatóak. Mostantól minden számolás esetén $\gamma = 10$, és $g = 1$ rögzített, hogy az eredmények összehasonlíthatóak legyenek. Megfigyelhetjük, hogy a tisztaság gyorsan lecseng, minimális értéke 0,5, mindeközben a szerkezeti entrópia mind a kezdetben, mind a kialakult stabil állapotban 0 értéket vesz fel. Ez szorosan összefügg azzal az elvárással, hogy teljes rend, ill. teljes káosz esetén a szerkezeti entrópiának minimális értéket kell felvennie. Azt mondhatjuk, hogy a szerkezeti entrópiával vizsgálható a koherencia eltűnése. A 3-qubites esetre a (35) ábrán láthatjuk a mennyiségeket kiszámolva. A kapukon való áthaladás a sűrűségoperátort nem változtatják meg, mivel a kapuk unitérek, így a spektrumot nem változtatják, ezért az entrópia-mennyiségek értéke sem változik. 2-qubit esetén egyszerű időfejlődést látunk, a szerkezeti entrópia hamar eléri maximumát, majd hosszabb idő alatt lecseng, mindeközben az entrópia felveszi maximális értékét, beáll az egyensúly, ezzel a qubitekben tárolt információ elvesz. 3-qubites állapot esetén a lecsengés sokkal hosszabb időt vesz igénybe, az információ lassabban vész el, de érdekes, hogy az entrópia maximális értékét nem $t \rightarrow \infty$ esetben veszi fel. Ennek oka, hogy a sajátértékek nem az egyenletes eloszláshoz tartanak. A jelenségre visszatérünk a hibás kapuk vizsgálatakor.



34. ábra. P -tisztaság, S -entrópia, $-\ln D$ -kiterjedési entrópia, S_{str} -szerkezeti entrópia az idő függvényében 2-qubit esetén



35. ábra. P -tisztaság, S -entrópia, $-\ln D$ -kiterjedési entrópia, S_{str} -szerkezeti entrópia az idő függvényében 3-qubit esetén

4.3. n -qubit, Werner-állapotok

A 2- és 3- qubites sűrűségoperátorok általánosítása a Werner-állapotból indul ki, melyet az alábbi parametrizációban adunk meg 2 qubitre

$$\rho = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1+r & 0 & 0 & 2r \\ 0 & 1-4r & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1-r & 0 \\ 2r & 0 & 0 & 1+r \end{pmatrix}. \quad (97)$$

Az állapot egy Bell-pár és egy egységmátrix lineárkombinációjaként adódik, így $r \in [-1/3, 1]$. A sűrűségmátrix egy sajátértéke p , a többi $\frac{1-p}{3}$. Hasonló módon konstruálhatunk olyan állapotokat, melyeknél a sajátértékek közül egy p a többi $1-p$ -n egyenlő arányban osztozik. A Hamiltoni megoldása a qubitek növelésével egyre bonyolódik, ezért feltesszük, hogy a lecsengés

$$p(t) = \frac{(d-1)\exp(-\gamma t) + 1}{d} \quad (98)$$

alakú, ahol d a sajátértékek száma, γ a lecsengés sebességét jellemző szám. A (97) által definiált mátrixot úgy bővíthetjük, hogy

$$\begin{pmatrix} 1+r & 0 & \dots & 0 & r/(d-2) \\ 0 & 1-r/(d-2) & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1-r/(d-2) & 0 \\ r/(d-2) & 0 & \dots & 0 & 1+r \end{pmatrix}.$$

Ennek sajátértékei mindig $\frac{(d-2)+2(d-1)r}{d(d-2)}$, $\frac{d-2-2r}{d(d-2)} \dots \frac{d-2-2r}{d(d-2)}$ eloszlásúak, ahol d a mátrix sorainak száma. Ezen a próba sűrűség-mátrixon egyszerűen vizsgálhatunk környezeti hatásokat sok qubites rendszerek esetén is.

4.4. Hibás qubit-kapuk

A kvantuminformatikában használt kapuk unitérek, ezért a spektrumot nem változtatják meg, ebből kifolyólag az entrópia-tagok értéke konstans marad. A szerkezeti entrópia vizsgálatát két irányban végezzük el:

- kapuk hibája hogyan befolyásolja az entrópia-tagokat, vagy
- a zaj hogyan befolyásolja az entrópia-tagokat?

A kapukat viszonylag egyszerűen el lehet rontani, vegyük a (87) által definiált CNOT-kaput, és tegyük fel, hogy csak p valószínűséggel fordítanak, ha a kontroll-feltétel teljesül:

$$G_{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \dots & 0 & p & 1-p \\ 0 & \dots & 0 & 1-p & p \end{pmatrix}, \quad (99)$$

Ezzek az új sűrűségmátrix:

$$\rho_{\text{új}} = G\rho_{\text{rég}}G^\dagger \quad (100)$$

Azonban a kaput a felírt 2-, ill 3-qubites sűrűségmátrixhoz J_z és J operátorok sajátállapotaiban kell felírni, némi algebra után ez nem okoz gondot. Ha ρ időfüggő, az időfejlesztést a $\rho_{\text{új}}$ -ból kiindulva kellene kiszámítani. Mi most nem ezt csináljuk, hanem a qubitek időfejlődésében t időpillanatban G kapu hatását tanulmányozzuk arra az időpontra vonatkozólag, tehát nem fejlesztjük az időt a Hamiltonival az új állapotokból. Ezt azért is célszerű így csinálni, mert a nem unitér kapuk a sűrűségmátrix Trace-ét is megváltoztatják. Ezért a (100) egyenletet módosítjuk:

$$\rho_{\text{új}} = \frac{G\rho_{\text{rég}}G^\dagger}{\text{Tr}(G\rho_{\text{rég}}G^\dagger)}. \quad (101)$$

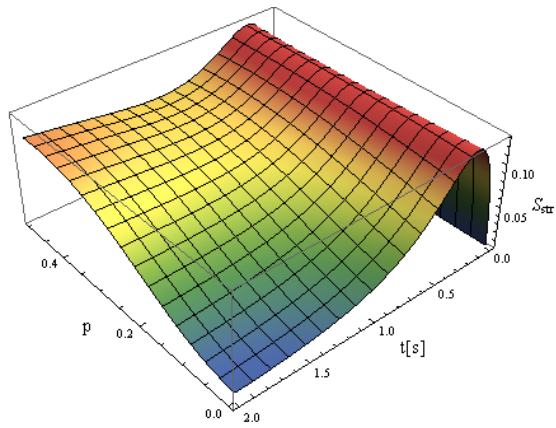
A (36b) ábra tartalmazza a teljes entrópia függését a kapu elromlottságát adó p -tól. Azt találjuk, hogy az entrópia-változás nem jelentős, azaz nem csökken jelentősen az információ-tartalom amiatt, mert a kapu csak p eséllyel fordítja át a 2. qubitet. Ez igen meglepő, hiszen azt várnánk, hogy egy jól működő CNOT-kapu nem változtatja meg az entrópiát, mert az állapot megváltozása determinisztikus, de egy rosszul működőnek segíteni kell a "keveredést", azaz az entrópiának gyorsabban kell nőnie magasabb p esetén. Bár az effektust valóban megfigyelhetjük, volumene nem magas. A szerkezeti entrópia (36a. ábra) sokkal látványosabban függ a p értéktől. Azt találjuk, hogy az átfordítás a szerkezeti entrópiát jelentékenyen növeli, a jelenség megértéséhez tekintsük meg a sajátértékek viselkedését (37. ábra) az időben kapu nélkül. A kapu működtetésével a 0 sajátértékek nem 0 értéket vesznek fel, ami a szerkezeti entrópiát növeli. A 3-qubites esetet tekintve már 4db 0 sajátérték van, így a hibás kapu nem okoz változást (38. ábra)

4.5. Zajjal terhelt csatorna

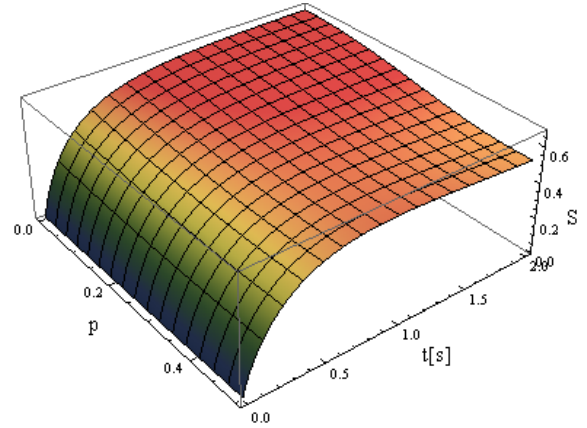
A zajjal terhelt csatorna vizsgálata nagyon hasonló a hibás kapu vizsgálatához. A vizsgálatok lefolytatásához [33] könyvet használtuk. Általánosságban azt mondhatjuk, hogy a rendszer állapotát jellemző ρ sűrűség-operátort átvezetve egy kapun, vagy csatornán az új sűrűségoperátor:

$$\rho_{\text{új}} = \text{Tr}_R(G(\rho \otimes \rho_R)G^\dagger), \quad (102)$$

ahol G a kapu, vagy csatorna mátrixa, ρ_R a környezet sűrűségmátrixa. Ez utóbbi egy feltevés, hogy a rendszer és a környezet sűrűségmátrixa egyszerű tenzorszorzat kapcsolatban állnak, Ha G nem hat a környezetre, a ρ_R elhagyható a képletből. A továbbiakban ezt mindig feltesszük. A könyv néhány példáján keresztül mutatjuk be a zajos csatornák hatását egy 4-qubites általánosított állapotra (97 mátrix).

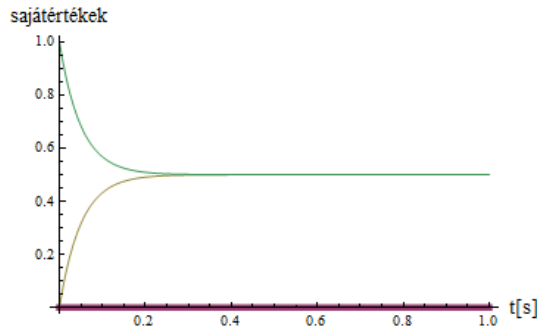


(a) A szerkezeti entrópia



(b) A teljes entrópia

36. ábra. A teljes- és a szerkezeti entrópia hibás CNOT-kapun áthaladva p és t függvényében 2-qubit



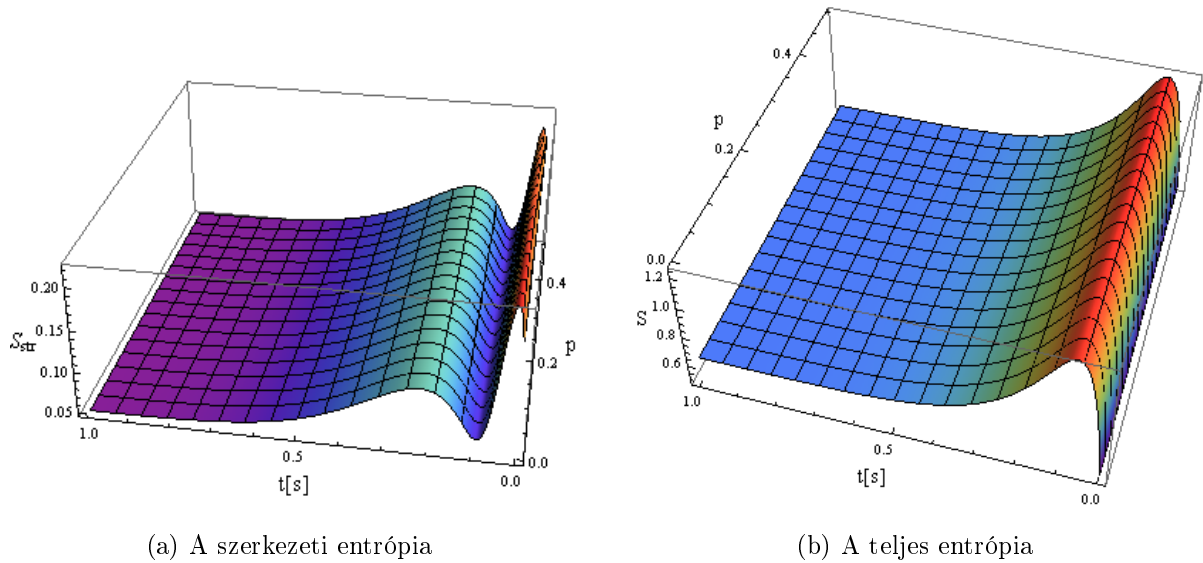
37. ábra. 2-qubit esetén a sajátértékek (4 db) időfüggése tiszta időfejlődés esetén

4.6. Depolarizáló-csatorna

A depolarizáló csatorna tipikus zajnak mondható qubitek esetén, a sűrűségmátrixot:

$$\rho_{új} = pI/2 + (1 - p)\rho \quad (103)$$

sűrűségmátrixba viszi, I az egységmátrix, p a zaj erősségét megadó szám. A csatorna hatására a p valószínűséggel a qubit-rendszer teljesen kevert állapotba kerül, $1 - p$ valószínűséggel nem változik. A 4-qubites szimulált állapot szerkezeti entrópiájára gyakorolt hatása a 39. ábrán látható. Láthatjuk, hogy magas p esetén a koherencia gyorsan elvész, az egyébként általánosan megjelenő kezdő púp is eltűnik. Tehát az S_{str} értékek híven közlik, hogy a koherencia eltűnik. A 39. ábráról az is kiderül, hogy az általánosított 4-qubites időfejlődés nagyon hasonló egy depolarizáló csatornán való áthaladáshoz. Ez onnan látható, hogy a felület bármely pontját tekintve a p - és t -irány nagyon hasonló.



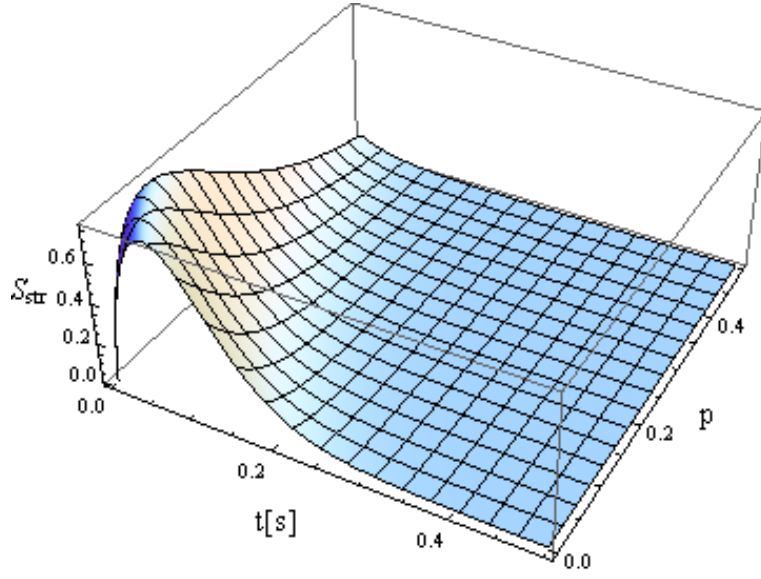
38. ábra. A teljes- és a szerkezeti entrópia hibás CNOT-kapun áthaladva p és t függvényében 3-qubit

4.7. Bit-flip-csatorna

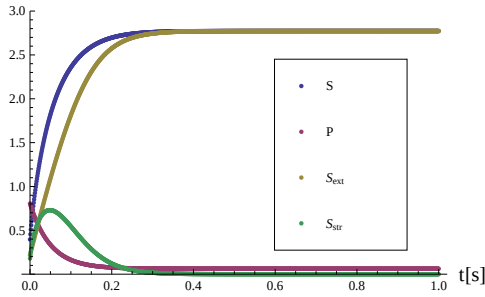
Ez a csatorna egy olyan zajt takar, mely p valószínűséggel helyben hagyja a rendszert, $1 - p$ valószínűséggel átfordít egy bitet reprezentáló kvázispint. Ennek 1-qubites reprezentációja egyszerű. A 4-qubites előállításnál alkalmas bázist választva: $|0000\rangle, |0001\rangle, |0010\rangle, \dots$ az átforgatás blokkdiagonális lesz, így előállítása a továbbiakban nem okoz gondot. Olyan beállításokat használunk, hogy minden qubitet $1 - p$ valószínűséggel átfordítunk. A 40. és a 41 ábrán láthatóak a csatornán való áthaladás hatásai az entrópia-tagokra. Azt láthatjuk, hogy a szerkezeti entrópia ismét csökken a kapu p -értékének függvényében, és a $p = 0,5$ esetén minimális, majd újra növekszik. Ez azért lehetséges, mert az átfordítás akkor eredményez entrópia-többletet, ha közben keveri az állapotokat, és az egyensúly felé tereli a rendszert, ezzel az információ elvész. A folyamattal párhuzamosan a szerkezeti entrópia csökken, mert egyre közelebb kerülünk az egyenletes eloszláshoz.

5. Konklúzió

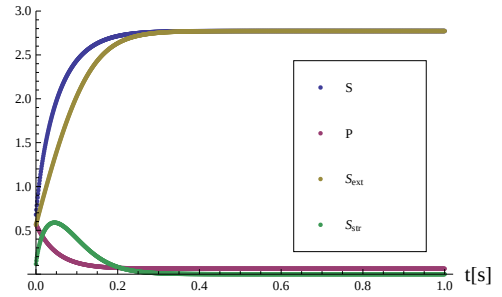
Dolgozatomban megvizsgáltam napjaink elterjedt komplexitás-mérőszámait, amelyek közül a dolgozat elején felállított feltételeknek az LMC-komplexitás, és a szerkezeti-entrópia tett eleget. Megmutattam, hogy ezen mennyiségek lényegében azonosak. A szerkezeti entrópia használata azért jobban indokolható, mint az LMC-komplexitása, mert összefüggésbe hozható a Shannon-



39. ábra. Általánosított 4-qubit rendszer szerkezeti entrópiája depolarizáló csatornán áthaladva t és p függvényében



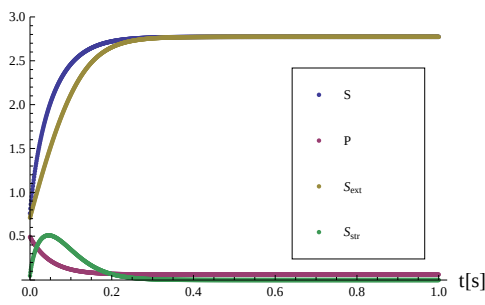
(a) $p = 0, 1$ esetben



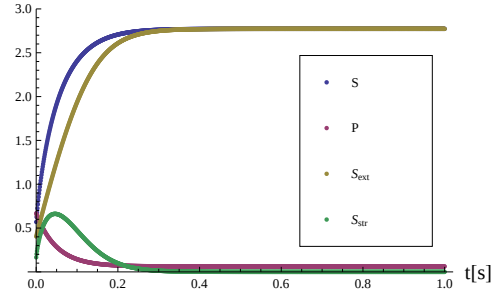
(b) $p = 0, 3$ esetben

40. ábra. A teljes- (S), a kiterjedési- (S_{ext}) és szerkezeti entrópia (S_{str}), valamint a tisztaság (P) Bitflip-csatornán áthaladva t függvényében, általánosított 4-qubit

entrópiával, és a Rényi-entrópiával, ezért információ-elméleti használata megalapozott. A szerkezeti entrópiát számos kvantummechanikai állapotra kiszámítottam. Az egydimenziós harmonikus oszcillátor esetén megállapítottuk, hogy a szerkezet az első három gerjesztés esetén más képet mutat, mint a magasabban gerjesztett állapotok szerkezete. Ennek magyarázata az volt, hogy a hullámfüggvény burkolójában csak $n > 3$ esetben jelenik meg a jellegzetes parabola-burkoló. A magasan gerjesztett állapotokról megállapítottuk, hogy entrópiájuk valamilyen logaritmus, vagy hatványfüggvény szerint változik. A két-delta potenciál páros kötött állapotát vizsgálva azt ál-



(a) $p = 0,5$ esetben



(b) $p = 0,8$ esetben

41. ábra. A teljes- (S), a kiterjedési- (S_{ext}) és szerkezeti entrópia (S_{str}), valamint a tisztaság (P) Bitflip-csatornán áthaladva t függvényében, általánosított 4-qubit

lapítottuk meg, hogy a Husimi-függvény szerkezeti entrópiája valamilyen értelemben ötvözi az impulzus-reprezentáció és a hely-reprezentáció szerkezetét. Az LCAO közelítést használva azt találtuk, hogy a Shannon-entrópia és a kiterjedési-entrópia lényegesen megváltozik a közelítés használatának hatására, ezzel szemben a szerkezeti entrópia kismértékű változása azt mutatja, hogy a szerkezeti entrópia kevésbé érzékeny a hullámfüggvény pontos alakjára. Három-dimenziós állapotok közül a harmonikus oszcillátor és a hidrogénatom hullámfüggvénye esetében is megvizsgáltuk a kvantumszámok széles tartományát, ezzel megállapítottuk, hogy a hidrogénatom esetén a szemiklasszikus átmenet hasonlóan a harmonikus oszcillátor magasan gerjesztett állapotaihoz logaritmikusan, vagy valamilyen hatványfüggvény szerint megy. A kvantumoptikai alkalmazások közül kiemelendő a Schrödinger-macska állapot vizsgálata, megmutattuk, hogy az átlapolás csökkenti a szerkezeti entrópia értékét, miközben a Shannon- és a kiterjedési entrópia értéke növekszik. A Shannon- és a kiterjedési entrópia esetében hely-reprezentációban tapasztaltunk egy extra konkáv szakaszt, melyet a Husimi-transzformálton nem találtunk. A jelenség magyarázataként megállapítottuk, hogy a Husimi-függvény a felbontása alatti effektusokat kiátlagolja, ezért ez korlátot jelent az alkalmazhatóságában. A gerjesztett squeeze-vákuum állapot esetében azt találtuk, hogy az összenyomott foton-gerjesztések nagyobb szerkezeti-információval rendelkeznek, és ezért ezek az állapotok ilyen értelemben is alkalmasabbak bizonyos kommunikációs feladatok ellátására. A környezeti hatásokat legegyszerűbb módon az 1-qubit rendszeren 1-fotonnal való kölcsönhatással tanulmányoztuk, ez a JCM-modell. Azt találtuk, hogy az információ gyorsan elvész, magas zajjal terhelődik, de bizonyos beállítások esetén az entrópia-tagok eltűnése lassabb, esetenként egyes eltűnt jelek később ismét visszatérnek. Ennek kapcsán megvizsgáltuk az újjáéledés jelenségét, és azt találtuk, hogy a polarizációval ellentétben az entrópia-tagok nem tűnnek el, sőt szignifikánsan

változnak. A több qubites eseteknél felállítottunk egy sok-qubites sűrűségmátrixot, melyhez egy modell-időfüggést rendeltünk, így a nagyobb qubit-számú esetek könnyen tesztelhetők. A környezeti hatásokat hibás kapukkal, és zajos csatornákkal szimuláltuk. Az eredményeket összefoglalva ezt mondhatjuk, hogy a zaj általában csökkenti a szerkezeti információtartalmat, de kivételek is vannak annak függvényében, hogy milyen az eredeti spektruma a sűrűségmátrixnak.

6. Irodalom

Hivatkozások

- [1] Stephanie Wehner, Andreas Winter, New Journal of Physics, 12, 025009, p. 22., 2010.
- [2] J. C. Angulo, J. Antolín, The Journal of Chemical Physics, 128, p. 164106., 2008.
- [3] R. López-Ruiz/ H.L. Mancini/ X. Calbet, Physics Letters A, 209, p. 321., 1995.
- [4] Á. Nagy, K.D. Sen, H.E Montgomery Jr., Physics Letters A, 373, p. 2552., 2009.
- [5] G. L. Ferri, F. Pennini, A. Plastino, Physics Letters A, 373, p. 2210., 2009.
- [6] Varga Imre, Kandidátusi Értekezés, 1993.
- [7] Varga Imre, Pipek János, Journal of Physics: Condensed Matter 6 L115-L122, 1994.
- [8] Bell, R.J. and P. Dean Disc. Farad. Soc. 50 p. 55, 1970.
- [9] McEliece, R.J., The theory of information and coding (Encyclopedia mathematics and its applications vol. 3) Addison-Wesley, USA p. 277., 1977.
- [10] R. López-Ruiz, Á. Nagy, E.Romera, J. Sañudo, Journal of Mathematical Physics, 50, p. 123528., 2009.
- [11] K.Ch. Chatzisavvas, V.P. Psonis, C.P. Panos, and Ch.C. Moustakidis, e-print arXiv: 0905.4364, 2009.
- [12] J.B. Szabó, K.D. Sen, Á. Nagy, Physics Letters A, 372, p. 2228., 2008.
- [13] Ch.C. Moustakidis, V.P. Psonis, K. Ch. Chatzisavvas, C.P. Panos, S.E. Massen, e-print arXiv: 0907.2342, 2009.
- [14] Pipek János és Varga Imre, Physical Review A, 46, p. 3148-3164., 1992.
- [15] C.P. Pannos, N.S. Nikolaidis, K.Ch. Chatzisavvas, C.C. Tsouros, Physics Letters A, 373, p. 2343., 2009.
- [16] I.N. Bronstejn, K.A. Szemegyajev, D. Musiol, H. Mühlig, Matematikai kézikönyv, TyPoTeX, Budapest, ISBN: 963-9326-53-4, p. 850., 2006.

- [17] Varga Imre, E. Hofstetter, M. Schreiber, Pipek János, Physical Review B 52, p. 7783-7786., 1995.
- [18] I. Csiszár, Axiomatic Characterizations of Information Measures, Entropy, 10, p. 261-273., 2008.
- [19] Hartmut Schmider, Minhuy Hổ, Journal of Physics and Chemistry, p. 17807-17819., 1996.
- [20] P. A. Bouvire, J. C. Angulo, J. S. Dehesa, Physica A, 390, p. 2215–2228., 2011.
- [21] I. Richard Lapidus, One-dimensional Modell of Diatomic Ion, American Journal of Physics, vol.30, no. 7., 1970.
- [22] Jaime Sanudo, R. López-Ruiz, Journal of Physics A, 41, 265303, p. 7., 2008.
- [23] E.T. Jaynes, F.W. Cummings, Proc. IEEE 51, p. 89., 1963.
- [24] A.-S.F. Obada, S. Abdel-Khalek, Entanglement evaluation with atomic Fisher information Physica A, 189, p. 891-898., 2010.
- [25] Balázs Márton, Tóth Bálint: Valószínűségyszámítás 1. jegyzet matematikusoknak és fizikusoknak 2012. aug. 9. <http://www.math.bme.hu/balazs/vszljzetb-t.pdf> 2012.10.16 13:26 p.75, 2012.
- [26] D.F. Walls, G.J. Milburn, Quantum Optics, Springer, Berlin, Heidelberg, 1994.
- [27] Z. Ficek, R. Tanas ,Entangled states and collective nonclassical effects in two-atom systems Phys. Reports V.372, p. 369., 2002.
- [28] Jun-Hong An, Shun-Jin Wang, Hong-Gang Luo, Entanglement dynamics of qubits in a common environment, Physica A 382 p. 753–764., 2007.
- [29] Leonhardt U., Physical Review A 48 3265, 1993.
- [30] GUO Qin, Husimi Function of Excited Squeezed Vacuum State, Commun. Theor. Phys. (Beijing, China) 49 p. 1305–1309., 2008.
- [31] Geszti Tamás: Kvantummechanika, TypoTeX kiadó, Budapest, ISBN 978-963-9664-43-2 p. 108–110., 2007.

- [32] Anatolii A Karatsuba, Ekatherina A Karatsuba, J. Phys. A: Math. Theor. 42, p. 195304, 2009.
- [33] Michael A. Nielsen, Isaacs I. Chuang, Quantum Computation and Quantum Information, 10th edition, Cambridge University Press, ISBN 978-1-107-00217-3, p. 353–399., 2010.

7. Függelék

7.1. Numerikus módszerek

Az alábbi alfejezetben a numerikus eredmények reprodukálásához szükséges beállításokat adom meg. A numerikus integrálás nehézsége az, hogy a hullámfüggvények erősen oszcillálnak magas kvantumszámok esetén, a dolgozat egyik legfőbb célkitűzése pedig a szemiklasszikus átmenetek vizsgálata. A sok zérushely és az entrópiában szereplő logaritmus függvény miatt olyan integráló programot kerestem, mely ezeket magától felismeri is kikerüli. Ilyen program a Wolfram Mathematica, melynek 7-es és 8-as verzióját használtam. Az *NIntegrate* parancs beállításait sorolom fel a következőkben, ahol ez használható volt. A *WorkingPrecision* az értékes jegyek számát jelenti, a *MaxRecursion* a maximális rekurziók számát jelenti, alapesetben ez 9, *GlobalAdaptive* módszer alkalmazása esetén megadhatjuk, hogy hány egymás utáni felosztás után nőhet a hiba, ennek alapértéke 400. Megjegyezném, hogy a teljes eredmény-táblázat rekonstruálásához igen nagy türelem kell, ezért azt javaslom, hogy aki ellenőrizni szeretné az eredmények helyességét először egyetlen pontra tegye meg.

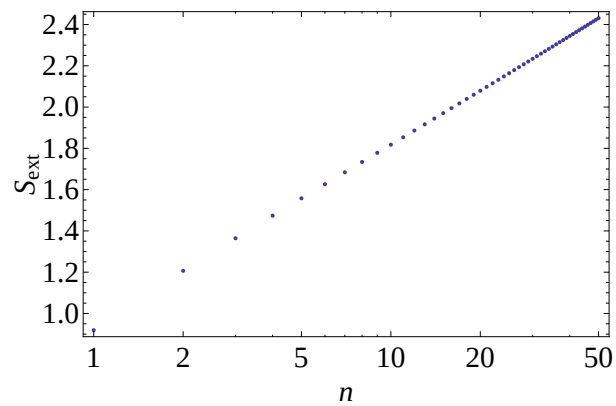
- **A lineáris harmonikus oszcillátor** esetén a *WorkingPrecision* $\rightarrow 50$ és a *MaxRecursion* $\rightarrow 50$ beállítások minden kiszámolt mennyiség esetén megfelelően pontos eredményt szolgáltatnak. A beállítások helyességének ellenőrzésére használható a szórás kiszámításakor kapott egyenes. Ilyen beállítások mellett csak a 16. számjegy tér el a várttól. Megjegyzendő, hogy ilyen ellenőrzéseknél csak nagyon pontos eredményeket szabad elfogadni, mert az entrópia számításánál várhatóan nagyságrendekkel nagyobb a hiba.
- **A térbeli harmonikus oszcillátor** vizsgálatánál már differenciált beállításokat alkalmaztam a különböző mennyiségek számítására. Az ellenőrzést a norma újraszámítása során végeztem el, az integrálás módja *GlobalAdaptive*, a beállítások *MaxRecursion* $\rightarrow 50$, *WorkingPrecision* $\rightarrow 20$, *MaxErrorIncreases* $\rightarrow 800$ ezzel a norma hibája 10^{-9} alatt tartható, amit már elfogadhatunk. A szög szerinti integrálokat külön végeztem el, ennek beállításai *MaxRecursion* $\rightarrow 100$, *WorkingPrecision* $\rightarrow 35$, *MaxErrorIncreases* $\rightarrow 2000$. A radiális rész

négyzetének integráljakor $\text{MaxRecursion} \rightarrow 100$, $\text{WorkingPrecision} \rightarrow 40$, $\text{MaxErrorIncreases} \rightarrow 1100$, az entrópiánál $\text{MaxRecursion} \rightarrow 100$, $\text{WorkingPrecision} \rightarrow 45$, $\text{MaxErrorIncreases} \rightarrow 2000$, a szórásnál $\text{MaxRecursion} \rightarrow 60$, $\text{WorkingPrecision} \rightarrow 30$, $\text{MaxErrorIncreases} \rightarrow 1100$. Ez utóbbi is alkalmas a hiba becslésére, mivel a számított pontok egy síkon helyezkednek el. Ez is teljesül legalább 9 tizedesjegy pontosságra.

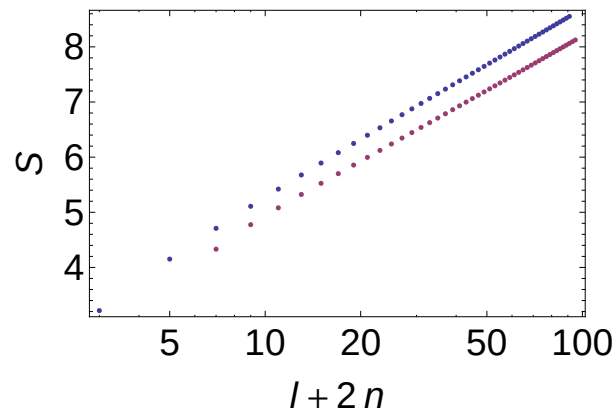
- **A hidrogénatom** numerikus számítása a térbeli harmonikus oszcillátor vizsgálatához hasonlóan zajlott, természetesen más beállításokkal. Az ellenőrzéshez $\text{MaxRecursion} \rightarrow 100$, $\text{WorkingPrecision} \rightarrow 20$, $\text{MaxErrorIncreases} \rightarrow 1000$, ezzel a hiba 10^{-12} alatt maradt. A szférikusok integráljához $\text{MaxRecursion} \rightarrow 200$, $\text{WorkingPrecision} \rightarrow 45$, $\text{MaxErrorIncreases} \rightarrow 2500$ beállításokat alkalmaztam. A radiális rész négyzetének integráljakor $\text{MaxRecursion} \rightarrow 150$, $\text{WorkingPrecision} \rightarrow 60$, $\text{MaxErrorIncreases} \rightarrow 1500$, az entrópiánál $\text{MaxRecursion} \rightarrow 250$, $\text{WorkingPrecision} \rightarrow 75$, $\text{MaxErrorIncreases} \rightarrow 2200$, a szórásnál $\text{MaxRecursion} \rightarrow 60$, $\text{WorkingPrecision} \rightarrow 30$, $\text{MaxErrorIncreases} \rightarrow 1500$. A megnövekedett precizitást az indokolja, hogy magasabb kvantumszámig megyünk el, és hogy a szórásra nincs a harmonikus oszcillátorhoz hasonló újraellenőrzési lehetőségünk.
- **Dobozba zárt részecske** vizsgálatokor csak a Husimi-függvény szerkezeti entrópiájánál kellett numerikus módszerhez fordulni. Ekkor a $\text{MaxRecursion} \rightarrow 50$, és a $\text{WorkingPrecision} \rightarrow 15$ beállításokkal a vázolt pontok megkaphatóak, de magasabb kvantumszám, vagy kisebb méret esetén a precíziót növelni kell.
- **A két-delta potenciálban mozgó részecske** esetén csaknem minden mennyiség kiszámítható analitikusan. ez alól a Husimi-reprezentáció szerkezeti entrópiája kivétel, mert itt még *NIntegrate* paranccsal sem érünk célt, ezért itt az integrál becsléséhez egy *For* ciklust alkalmaztam, ahol a téglalap összeggel közelítettem az integrált, ekvidisztáns felosztással 0,1-es lépésközzel.

7.2. Ábrák

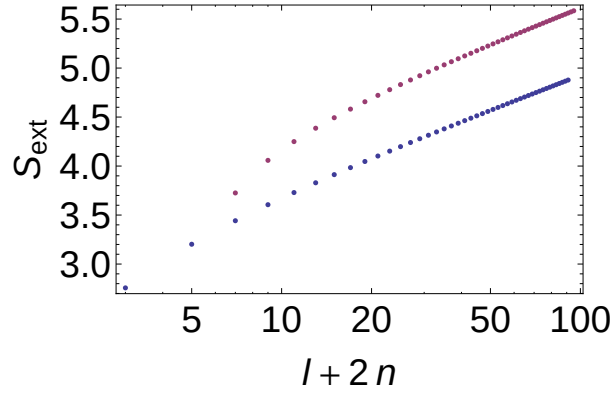
Ebben a fejezetben azokat az ábrákat foglalom össze, melyek szemléletesek, de nem feltétlenül szükségesek a megértéshez. Az első néhány ábrán szemiklasszikus átmenetek esetén láthatjuk a különböző entrópia-tagok viselkedését. Mindegyiken látható, hogy magasan gerjesztett esetben a logaritmikus skálán közel egyenest kapunk. Az utolsó néhány ábra a $2\text{-}\delta$ potenciál Husimi-függvényének változását mutatja a delták távolodásának függvényében.



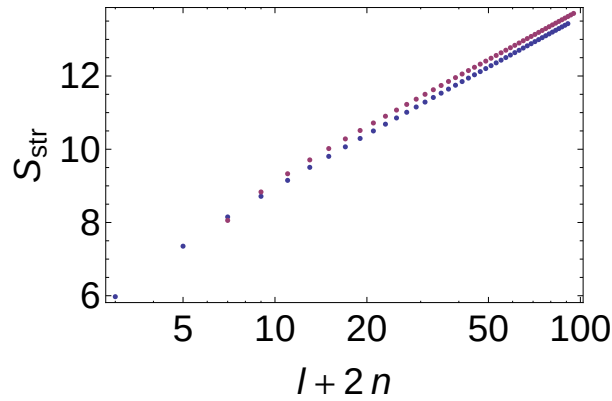
42. ábra. Egy dimenziós harmonikus oszcillátor kiterjedési entrópiája lin-log skálán ábrázolva



43. ábra. A térbeli harmonikus oszcillátor entrópiája az energia függvényében $l = 1$ (kék) és $l = 5$ (lila) esetben



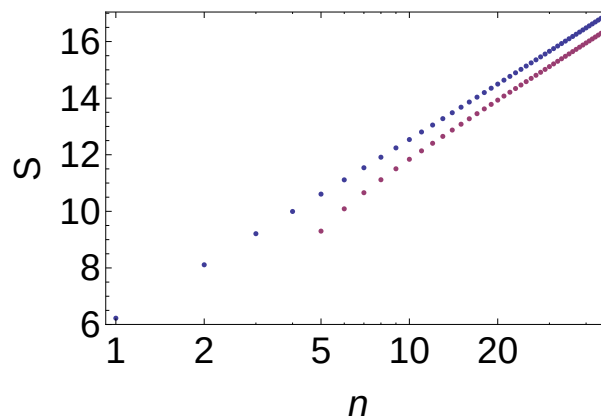
44. ábra. A térbeli harmonikus oszcillátor kiterjedési entrópiája az energia függvényében $l = 1$ (kék) és $l = 5$ (lila) esetben



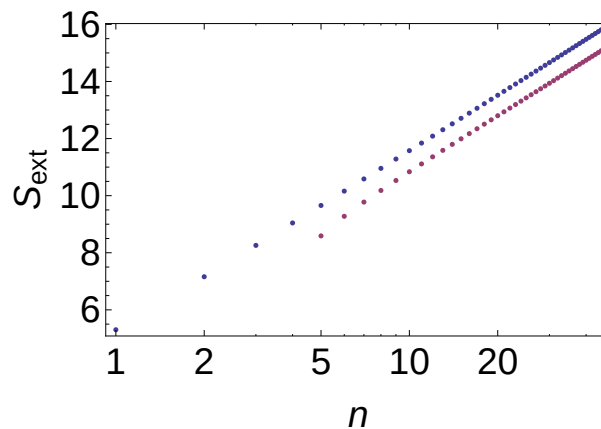
45. ábra. A térbeli harmonikus oszcillátor szerkezeti entrópiája az energia függvényében $l = 1$ (kék) és $l = 5$ (lila) esetben

7.3. Önállósági nyilatkozat

Ezen dolgozat megírásához témavezetőmtől, dr. Varga Imrétől sok segítséget kaptam, de ezen kívül a dolgozat megírásához szabálytalan eszközöket nem vettem igénybe. A dolgozat önálló munka. A dolgozatban elért eredményeket a témavezetőm segítségével, de önállóan értem el. Az eredmények interpretációja közös munkának tekinthető. A TDK szabályzata megköveteli, hogy azon eredményeket, melyeket már a Bsc. szakdolgozatban is leírtam külön kiemeljem. A szakdolgozatban csak a szerkezeti-, kiterjedési- és teljes entrópia kiszámítására került sor, az alábbi esetekben: A dobozba zárt részecske problémája, a lineáris harmonikus oszcillátor és a hidrogén-atom.



46. ábra. A hidrogénatom entrópiája az energia függvényében $l = 1$ (kék) és $l = 5$ (lila) esetben

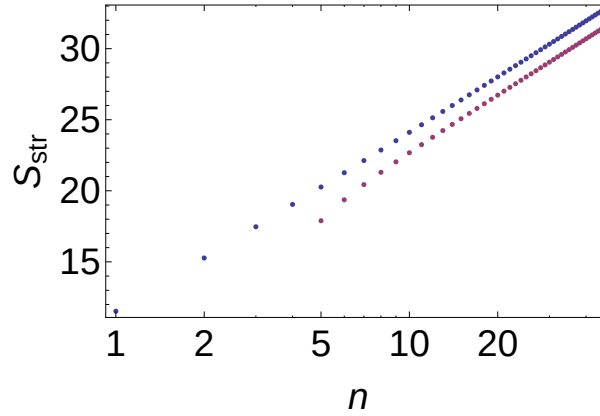


47. ábra. A hidrogénatom entrópiája az energia függvényében $l = 1$ (kék) és $l = 5$ (lila) esetben

7.4. Ábrák jegyzéke

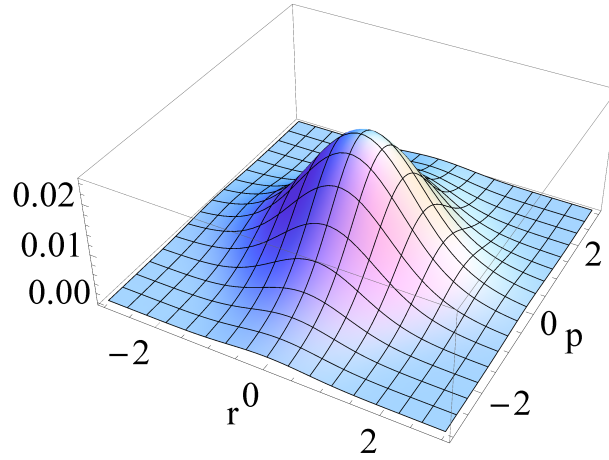
Ábrák jegyzéke

1.	Dobozba zárt részecske vizsgálata	14
2.	Dobozba zárt részecske vizsgálata	14
3.	Harmonikus oszcillátor potenciálban mozgó részecske vizsgálata	15
4.	Harmonikus oszcillátor potenciálban mozgó részecske vizsgálata	16
5.	Harmonikus oszcillátor potenciálban mozgó részecske vizsgálata 3.	16
6.	A két- δ potenciálban mozgó részecske vizsgálata	18
7.	A két- δ potenciálban mozgó részecske vizsgálata	19

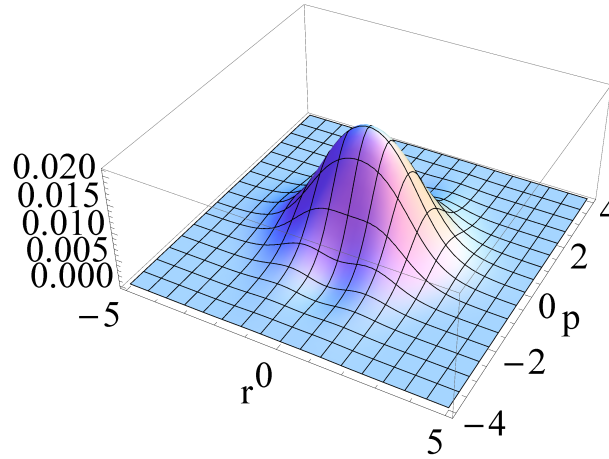


48. ábra. A hidrogénatom entrópiája az energia függvényében $l = 1$ (kék) és $l = 5$ (lila) esetben

8.	A szerkezeti entrópia x -, p -reprezentációban γ függvényében, valamint a Husimi-függvény szerkezeti entrópiája	20
9.	A két- δ potenciál vizsgálata LCAO-közelítéssel: A szerkezeti entrópia	20
10.	A két- δ potenciál vizsgálata LCAO-közelítéssel: A Shannon- és a kiterjedési entrópia	21
11.	A tértbeli harmonikus oszcillátor vizsgálata	22
12.	A tértbeli harmonikus oszcillátor vizsgálata	23
13.	A hidrogénatom vizsgálata	24
14.	A hidrogénatom vizsgálata	25
15.	A hidrogénatom vizsgálata	25
16.	A hidrogénatom szerkezeti entrópia maximumhelyeinek vizsgálata	26
17.	A Schrödinger-macska állapot x -beli hullámfüggvénye, és entrópiái	28
18.	Schrödinger-macska állapot Husimi-transzformáltja ($\lambda = 1$)	29
19.	Schrödinger-macska állapot Husimi-transzformáltjának entrópiái α függvényében ($\lambda = 1$)	29
20.	A Schrödinger-macska állapot kiterjedési entrópiája különböző felbontások (λ) esetén	30
21.	A Schrödinger-macska állapot szerkezeti entrópiája x - és Husimi- reprezentációban ($\lambda = 1$)	30
22.	Squeezed-vákuum entrópiái	31
23.	Gerjesztett vákuum-állapotok Husimi-függvénye $r = 0$, $\kappa = 1$, $m = 1, 2, 4$ esetben	33
24.	Gerjesztett vákuum-állapot Husimi-függvénye	33
25.	Entrópiák κ , és m értékek függvényében	33

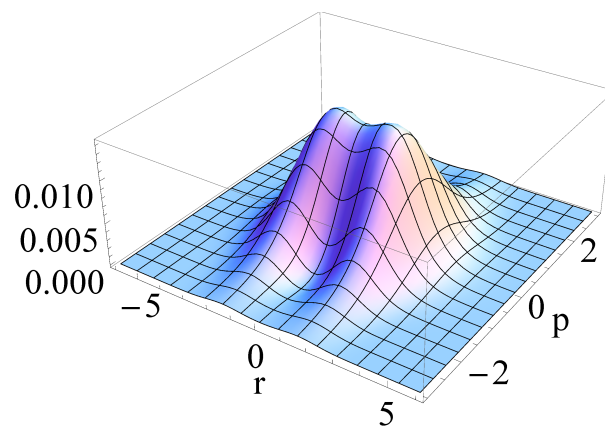


49. ábra. A két- δ potenciálban mozgó részecske Husimi-függvénye $a = 0$ esetben

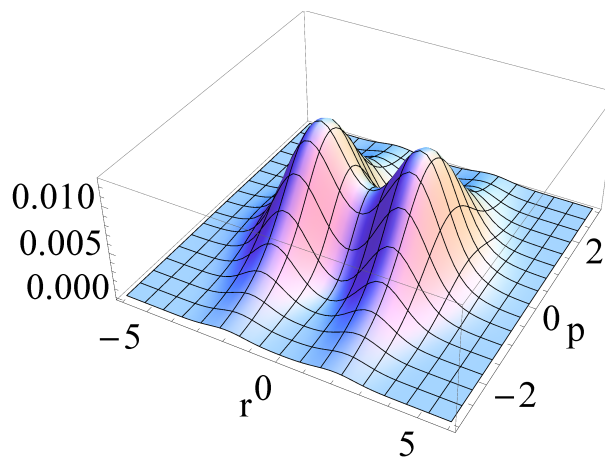


50. ábra. A két- δ potenciálban mozgó részecske Husimi-függvénye $a = 1$ esetben

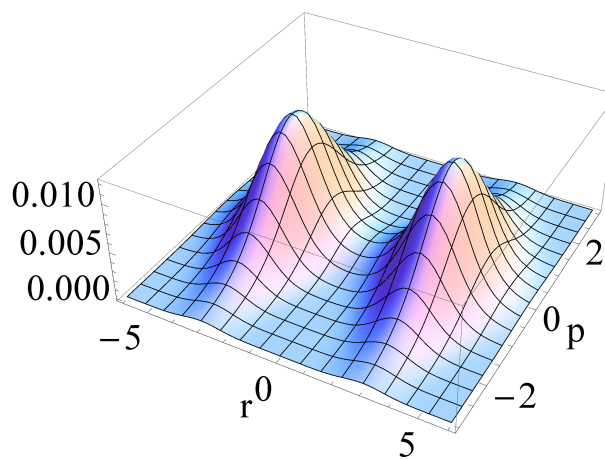
26.	Gerjesztett vákuum-állapot Husimi-függvénye	34
27.	Entrópiák r , és m értékek függvényében ($\kappa = 1$)	34
28.	Egy kétállapotú rendszer szerkezeti entrópiájának vizsgálata a sajátértékek függvényében	37
29.	A Jaynes-Cummings modell tisztaságának vizsgálata	37
30.	A Jaynes-Cummings modell Shannon-entrópiájának vizsgálata	38
31.	A Jaynes-Cummings modell szerkezeti entrópiájának vizsgálata	38
32.	A JCM-modell Shanon-entrópája, kiterjedési-entrópiája, szerkezeti-entrópiája, és polarizációja ($\langle\sigma_z\rangle$), $\alpha = 10$, $k = 1$, $\Theta = \Phi = 0$. A görbék a függőleges skálán eltolva!	39
33.	A JCM-modell Shanon-entrópája, kiterjedési-entrópiája, szerkezeti-entrópiája, és polarizációja ($\langle\sigma_z\rangle$), $\alpha = 12$, $k = 1$, $\Theta = \Phi = 0$. A görbék a függőleges skálán eltolva!	40



51. ábra. A két- δ potenciálban mozgó részecske Husimi-függvénye $a = 1,5$ esetben



52. ábra. A két- δ potenciálban mozgó részecske Husimi-függvénye $a = 2$ esetben



53. ábra. A két- δ potenciálban mozgó részecske Husimi-függvénye $a = 3$ esetben

34.	P -tisztaság, S -entópia, $-\ln D$ -kiterjedési entrópia, S_{str} -szerkezeti entrópia az idő függvényében 2-qubit esetén	44
35.	P -tisztaság, S -entópia, $-\ln D$ -kiterjedési entrópia, S_{str} -szerkezeti entrópia az idő függvényében 3-qubit esetén	44
36.	A teljes- és a szerkezeti entrópia hibás CNOT-kapun áthaladva p és t függvényében 2-qubit	47
37.	2-qubit esetén a sajátértékek (4 db) időfüggése tiszta időfejlődés esetén	47
38.	A teljes- és a szerkezeti entrópia hibás CNOT-kapun áthaladva p és t függvényében 3-qubit	48
39.	Általánosított 4-qubit rendszer szerkezeti entrópiája depolarizáló csatornán áthaladva t és p függvényében	49
40.	A teljes- (S), a kiterjedési- (S_{ext}) és szerkezeti entrópia (S_{str}), valamint a tisztaság (P) Bitflip-csatornán áthaladva t függvényében, általánosított 4-qubit	49
41.	A teljes- (S), a kiterjedési- (S_{ext}) és szerkezeti entrópia (S_{str}), valamint a tisztaság (P) Bitflip-csatornán áthaladva t függvényében, általánosított 4-qubit	50
42.	Egy dimenziós harmonikus oszcillátor kiterjedési entrópiája lin-log skálán ábrázolva	56
43.	A térbeli harmonikus oszcillátor entrópiája az energia függvényében $l = 1$ (kék) és $l = 5$ (lila) esetben	56
44.	A térbeli harmonikus oszcillátor kiterjedési entrópiája az energia függvényében $l = 1$ (kék) és $l = 5$ (lila) esetben	57
45.	A térbeli harmonikus oszcillátor szerkezeti entrópiája az energia függvényében $l = 1$ (kék) és $l = 5$ (lila) esetben	57
46.	A hidrogénatom entrópiája az energia függvényében $l = 1$ (kék) és $l = 5$ (lila) esetben	58
47.	A hidrogénatom entrópiája az energia függvényében $l = 1$ (kék) és $l = 5$ (lila) esetben	58
48.	A hidrogénatom entrópiája az energia függvényében $l = 1$ (kék) és $l = 5$ (lila) esetben	59
49.	A két- δ potenciálban mozgó részecske Husimi-függvénye $a = 0$ esetben	60
50.	A két- δ potenciálban mozgó részecske Husimi-függvénye $a = 1$ esetben	60
51.	A két- δ potenciálban mozgó részecske Husimi-függvénye $a = 1,5$ esetben	61
52.	A két- δ potenciálban mozgó részecske Husimi-függvénye $a = 2$ esetben	61
53.	A két- δ potenciálban mozgó részecske Husimi-függvénye $a = 3$ esetben	61