



TECHNISCHE UNIVERSITÄT
MÜNCHEN

Lehrstuhl Collective Quantum Dynamics



Otto-von-Taube-Gymnasium

TUM KOLLEG

Otto-von-Taube-Gymnasium

Quantifizierung der Verschränkung durch die von Neumann'sche Verschränkungsentropie

Alisa Odobasic

Diese W-Seminararbeit wurde im Rahmen des TUM-Kollegs zum 05.12.2023 am Otto-Von-Taube-Gymnasium in Gauting sowie am Lehrstuhl Collective Quantum Dynamics der Technischen Universität München eingereicht.

Betreut durch: 1. Gloria Isbrandt
2. Prof. Dr. Michael Knap
3. Thomas Frank

Zusammenfassung

Das Ziel dieser Arbeit war es, Eigenschaften der von Neumann'schen Verschränkungsentropie und den Singulärwerten von Grundzuständen festzustellen. Dazu wurden analytisch obere und untere Schranken $0 \leq S_{vN} \leq L/2 \ln 2$ der von Neumann'schen Verschränkungsentropie für beliebige quantenmechanische Systeme untersucht [1], und anschließend numerisch die Verschränkungsentropie zufälliger Zustände und Grundzustände des Ising Hamiltonians gegenüber gestellt. Dieser Vergleich zeigte, dass die Verschränkungsentropie von Grundzuständen langsamer mit der Systemgröße ansteigt als jene typischer Zustände. In folgenden Schritten können Grundzustände annäherungsweise durch Produktzustände dargestellt werden, welche ein geringes Maß an Verschränkung erfordern. Besonders zum rechen- und speicherplatzeffizienten Modellieren großer Systeme ist dies hilfreich [2, 3].

Danksagung

Es gibt viele Menschen, bei denen ich mich ganz herzlich bedanken möchte.

Allen voran gilt ein riesengroßes Dankeschön Gloria Isbrandt. Danke, dass du dein Büro über die letzten 9 Monate mit mir geteilt hast und dir immer Zeit genommen hast, um meine Fragen zu beantworten. Danke für die Geduld, wenn ich eine zweite Erklärung gebraucht habe. Und natürlich für die lustigen Mittagspausen. Du hast mir diese wundervolle Arbeit überhaupt erst ermöglicht.

Danke an Prof. Dr. Michael Knap, dass ich in der Collective Quantum Dynamics Gruppe sein durfte. Danke für die hilfreichen Bücher, Vorlesungsskripte und Zwischenbesprechungen, und für die Integration in den Unialltag.

Danke an Herr Frank und Herr Dr. Laupitz für die Organisation des TUM-Kollegs. Ohne diesen Rahmen wäre es nie zum Schreiben dieser Arbeit gekommen.

Und natürlich Danke an Familie und Freund*innen, die sich über die letzten Monate hinweg viele Fun-Facts über Quantenmechanik anhören mussten. Eure Unterstützung bedeutet mit unglaublich viel!

Inhaltsverzeichnis

List of Figures	III
1 Einleitung	1
2 Grundlagen und Notation	3
2.1 Stern Gerlach Experiment	3
2.2 Vektorschreibweise und Kronecker-Produkt	5
2.3 Wahrscheinlichkeit	8
2.4 Pauli-Matrizen	10
3 Von Neumann'sche Verschränkungsentropie	13
3.1 Einführung	13
3.2 Ermittlung der Verschränkungsentropie	14
3.3 Minimale und Maximale Verschränkung	16
3.3.1 Minimale Verschränkungsentropie	16
3.3.2 Maximale Verschränkungsentropie	17
3.4 Verschränkung bei unterschiedlichen Mischverhältnissen	17
3.5 Verschränkung bei verschiedenen Subsystemgrößen	19
4 Ising Hamiltonian	21
4.1 Magnetismus	21
4.2 Definition Ising Hamiltonian	21
4.3 Einschub: Schrödinger Gleichung	23
4.4 Grundzustände	23
5 Grundzustände und zufällige Zustände im Vergleich	27
5.1 Singulärwerte	27
5.2 Verschränkungsentropie	28
6 Zusammenfassung und Ausblick	31
A Code	I
A.1 Schmidt Verfahren	I
A.2 Mischverhältnisse	II

A.3	Variation von Subsystemgrößen	II
A.4	Grundzustände bestimmen	III
A.5	Singulärwerte von Grundzuständen	V
A.6	Verschrankungsentropie von Grundzuständen	VI
B	Basistransformationen	VII
B.1	Eigenwerte und Eigenzustände der Pauli-Matrizen	VII
B.1.1	Pauli- x -Matrix	VII
B.1.2	Pauli- z -Matrix	IX
B.2	Basisvektoren für 2^2 -dimensionale Systeme	IX
B.3	Durchführung ausgewählter Basistransformationen	X
B.3.1	Basistransformationsmatrix	X
B.3.2	Basistransformation ausgewählter Grundzustände des Ising Hamiltonians	XI

Abbildungsverzeichnis

2.1	Schematische Darstellung des Stern-Gerlach-Experiments, übernommen von [4].	4
2.2	Aufteilung der Silberatome nach dem Durchqueren mehrerer Stern-Gerlach-Geräte, Prozentangaben anteilig der ursprünglichen Silberatome. Grafik frei nach [5] erstellt.	5
3.1	Variation des Mischverhältnisses des Zustands $ \psi_\beta\rangle = \frac{1}{\alpha}(\beta \uparrow\uparrow\rangle + (1 - \beta) \downarrow\downarrow\rangle)$. Entlang der x-Achse sind die Werte von β aufgeführt. Entlang der y-Achse $S_{vN}/\ln 2$	18
3.2	Verschränkungsentropie für Systeme der Größe $2^2 - 2^{10}$, die nach einer unterschiedlichen Anzahl an Freiheitsgraden aufgetrennt werden. Jeder Datenpunkt ist der Durchschnitt der Verschränkungsentropie von 20 zufälligen Zuständen.	20
5.1	Singulärwerte λ_α eines Grundzustandes des Ising Hamiltonians. Als Referenz sind die Singulärwerte eines zufälligen Zustands abgebildet. Alle Singulärwerte sind absteigend sortiert.	28
5.2	Vergleich der von Neumann'schen Verschränkungsentropie bei Grundzuständen und zufälligen Zuständen. Die zufällige Kurve ist der Schnitt aus je 20 zufälligen Zuständen.	29

Kapitel 1

Einleitung

Wir alle kennen Schrödingers Katze - die Katze, die gleichzeitig tot und lebendig ist. Dabei handelt es sich um ein anschauliches Gedankenexperiment, die Realität ist jedoch komplexer. Statt Katzen in Boxen, betrachtet die Quantenmechanik vielmehr sogenannte "Quantensysteme", welche sich in verschiedenen quantenmechanischen Zuständen befinden können, jedoch nicht immer exakt vorhergesagt werden kann, welches Ergebnis eine Messung ergeben wird [6].

Wir beschäftigen uns in der Quantenmechanik mit den elementarsten Teilchen und ihren Wechselwirkungen untereinander. Die Phänomene, welche sich daraus ergeben, bleiben jedoch keinesfalls auf der subatomaren Ebene. Das wohl alltäglichste makroskopische Quantenphänomen ist der Magnetismus. Ein weiteres aufstrebendes Forschungsfeld, welches sich die Quantenmechanik zu nutze macht, ist die Quanteninformatik. Sie basiert auf Quantencomputern mit sogenannten Qubits, kurz für Quanten-Bits. Dadurch können bestimmte Probleme, wie beispielsweise die Faktorisierung von Zahlen, mit exponentiellem Vorteil gegenüber klassischen Computern gelöst werden [7].

All diese Anwendungen basieren auf einer fundamentalen Eigenschaft von quantenmechanischen Systemen, welche sie von klassischen unterscheidet. Die sogenannte Verschränkung von Zuständen sorgt dafür, dass bei der Vorhersage einer Messung eines Quantensystems oft lediglich eine Wahrscheinlichkeit für das Messergebnis angegeben werden kann, nicht aber eine genaue Vorhersage wie in klassisch-deterministischen Systemen [6, 8]. Außerdem enthalten Teilsysteme eines verschränkten Systems Informationen über den Rest des Systems, es reicht also, nur einen Teil des Systems zu messen, um den Zustand des gesamten Systems genauer festzulegen [9].

Verschiedene Wissenschaftler*innen haben sich ausgiebig mit dem Phänomen der Verschränkung auseinandergesetzt. Besonders hervorzuheben sind hierbei John von Neumann, auf welchen die nach ihm benannte "von Neumann'sche Verschränkungsentropie" (ein Maß für Verschränkung) zurückgeht und Don Nelson Page, welcher die Verschränkungsentropie weiter analysiert hat [10, 1].

In der Quantenmechanik ist die Verschränkung von Zuständen also ein zentrales Element. Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Frage, wie die Verschränkung von Zuständen quantifiziert werden kann und welche Regelmäßigkeiten es in der Verschränkungsentropie verschiedener Zustände gibt.

Das Finden von Regelmäßigkeiten im Maß der Verschränkung wird unser Verständnis für die Struktur des Hilbertraums, der “Welt“ der Quantenzustände, erweitern. Besonders für die Modellierung besonders komplexer Systeme ist es außerdem vorteilhaft, zuverlässig Zustände finden zu können, welche lediglich ein geringes Maß an Verschränkung aufweisen, da gängige Ansätze zur Darstellung komplexer Systeme eine strikte Obergrenze für die Verschränkung voraussetzen [2].

In dieser Arbeit starten wir bei den Grundlagen: In Kapitel 2 definieren wir quantenmechanische Zustände, lernen den Hilbertraum und weitere mathematische Objekte kennen, und machen uns mit ihrer Notation vertraut. Außerdem beschäftigen wir uns mit den sogenannten “Pauli-Matrizen“, durch welche verschiedene Messungen dargestellt werden können. So erlangen wir einen ersten Überblick über Quantensysteme.

Im 3. Kapitel wenden wir diese Erkenntnisse an, insbesondere in Hinsicht auf Verschränkung. Wir führen die von Neumann’sche Verschränkungsentropie als Maß für die Verschränkung ein und untersuchen ihre Eigenschaften wie Minima, Maxima, und beeinflussende Parameter.

Als 4. Kapitel machen wir den Schritt zu einem realen Phänomen, dem Magnetismus. Nachdem wir ihn auf makroskopischer Ebene einordnen, modellieren wir ihn quantenmechanisch und stellen ihn durch einen sogenannten Hamiltonian dar. Wir lösen seine Schrödinger-Gleichung und lernen so eine besondere Art an Zuständen, die Grundzustände, kennen.

Zuletzt führen wir in Kapitel 5 das bisher Gelernte zusammen. Wir vergleichen die Verschränkungsentropien von zufälligen Zuständen und Grundzuständen und ziehen daraus Schlüsse über besondere Eigenschaften und Unterschiede.

Im Schlussteil 6 lassen wir die wichtigsten Erkenntnisse Revue passieren und blicken auf potentielle Anwendungen und weitere Forschungsgebiete.

Kapitel 2

Grundlagen und Notation

Ein Quantensystem ist im Allgemeinen ein System, in welchem die klassische Physik nicht anwendbar ist. Das ist zumeist dann der Fall, wenn bei der Vorhersage einer Messungen nur eine Wahrscheinlichkeit, nicht jedoch das Ergebnis selbst angegeben werden kann [6]. Wenn beispielsweise ein Ball geworfen wird, dann ist es in der klassischen Physik möglich, schon vor dem Abwurf auszurechnen, wie weit der Ball fliegen wird. Dafür müssen wir nur alle nötigen Parameter wie Abwurfwinkel, Kraft und Masse bestimmen. Alle Bälle, die unter den selben Bedingungen abgeworfen werden, werden die gleiche Trajektorie zurücklegen. In einem Quantensystem ist dies nicht der Fall. Ausgehend vom selben Zustand werden im Allgemeinen verschiedene Ergebnisse auftreten [6]. Ein Zustand ist ein "Ensemble von Teilchen, die gleichartig präpariert sind" [6]. Eine Menge Teilchen befindet sich also im selben Zustand, wenn sie durch die selben Ausgangsparameter gekennzeichnet sind.

2.1 Stern Gerlach Experiment

Ein Beispiel für ein solches nicht-deterministisches Quantensystem liefert das Stern-Gerlach-Experiment.

Wir werden nicht vollumfänglich auf das Experiment eingehen, sondern es hier vielmehr als veranschaulichendes Beispiel nutzen.

Der Versuchsaufbau ist in Abbildung (2.1) vereinfacht dargestellt. Ein Strahl von Silberatomen wird durch einen Ofen erwärmt und beschleunigt. Durch mehrere Blenden wird der Silberatomstrahl fokussiert und gelangt in den Versuchsaufbau. Dort bewegen die Atome sich durch ein Magnetfeld auf einen Detektorschirm zu, wo ihre Ablenkung gemessen wird [5]. Ist das Magnetfeld entlang der z-Achse ausgerichtet, so nennen wir den Aufbau SGz, bei einer Ausrichtung in x-Richtung SGx (die Atomkerne bewegen sich immer entlang der y-Achse). Wenn die Ausrichtung nicht genauer spezifiziert ist, gehen wir von einem SGz aus.

Da alle Silberatome einen sogenannten "Spin" besitzen, erzeugen sie ein magnetisches Moment. Dieser interagiert mit dem umliegenden Magnetfeld, wodurch die Teilchen abgelenkt werden [5].

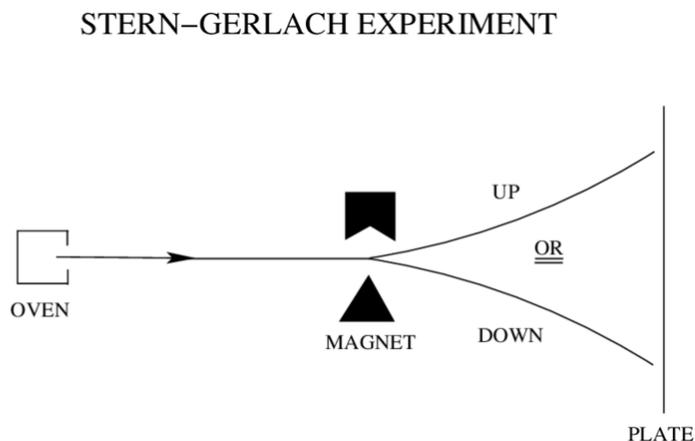


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung des Stern-Gerlach-Experiments, übernommen von [4].

Beim Austritt aus dem Ofen ist der Spin der Atome in eine beliebige, zufällige Richtung orientiert. Nach dem klassischen Verständnis würden wir deshalb für die Ablenkung eine vertikale Linie erwarten, da wir für jedes Δx der Änderung der Ausrichtung des Spins, eine entsprechend kleine Änderung der Ablenkung durch das Magnetfeld erwarten würden - sprich eine Linie. Da der Versuch beliebig lange laufen kann, und somit beliebig viele zufällig orientierte Atome untersucht werden können, müsste es nach ausreichend langer Zeit genügend Messpunkte geben um die Linie zu erkennen.

Bei der Durchführung des Versuches stellen wir jedoch fest, dass es nur zwei Punkte gibt, an welchen auf dem Schirm Teilchen auftreffen: einen nach oben abgelenkten und einen nach unten abgelenkten. Diese Ablenkungen finden im gleichen Verhältnis statt [5].

Daraus können wir schließen, dass tatsächlich nur zwei Ausrichtungen des Spins existieren, welche gemessen werden können: "Spin up" nach oben und "Spin down" nach unten. Sie werden auch als Vektoren $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ dargestellt. Wir nennen Vektoren der Form $|\psi\rangle$ Ket-Vektoren. Neben ihnen gibt es auch Bra-Vektoren $\langle\psi|$, auf welche wir in Kapitel 2.3 genauer eingehen werden.

Besondere Phänomene ergeben sich wenn wir mehrere Stern-Gerlach-Geräte hintereinander schalten, sodass jeweils nur Atome mit Spin $|\uparrow\rangle$ bzw. für SGx $|\leftarrow\rangle$ in das nächste Stern-Gerlach-Gerät gelangen, dargestellt in Abbildung 2.2.

Bei einem Aufbau, in dem sich zuerst ein SGz und dann ein SGx befindet, stellen wir fest, dass sich nach dem SGz die Atome wie erwartet im 1 : 1-Verhältnis aufteilen. Die 50%, welche mit $|\uparrow\rangle$ gemessen werden, teilen sich in der SGx wiederum gleichmäßig in $|\leftarrow\rangle$ und

$|\rightarrow\rangle$ auf, dort kommen also jeweils 25% der ursprünglichen Atome an [5].

Allerdings “vergessen“ die Teilchen in dem SGx, welche Orientierung sie in dem SGz hatten. Das äußert sich experimentell wie folgt: Im Versuchsaufbau kann nach der SGx wieder eine SGz nachgeschaltet werden, dargestellt in Abbildung 2.2. Alle Teilchen, die nun in die letzte SGz eintreten, wurden also zuerst mit Spin $|\uparrow\rangle$ und dann mit Spin $|\leftarrow\rangle$ gemessen. Nach klassischer Auffassung kennen wir nun die Parameter, den genauen Zustand, unserer Teilchen. Wir müssten vorhersagen können, wie die nächste Messung verlaufen wird. Jedoch können wir genau das nicht: in der letzten SGz teilen sich die Teilchen wieder gleichmäßig auf. Je 12,5% der ursprünglichen Teilchen treffen mit einer Ablenkung nach oben bzw. unten auf [5]. Die Messung des Spins entlang der x-Achse hat also den Zustand der Teilchen verändert, sodass für die Vorhersage der nächsten Messung lediglich Wahrscheinlichkeiten angegeben werden können, vergleiche Abbildung 2.2.

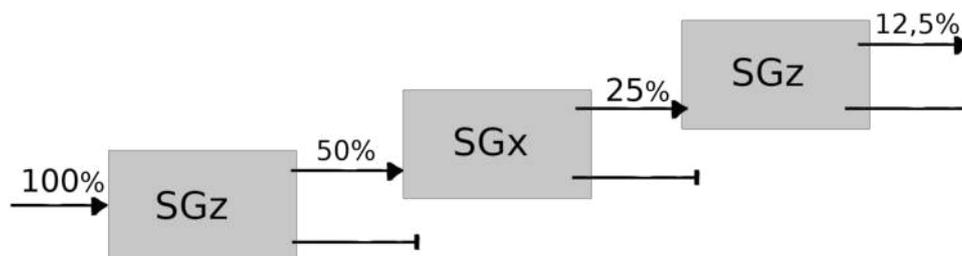


Abbildung 2.2: Aufteilung der Silberatome nach dem Durchqueren mehrerer Stern-Gerlach-Geräte, Prozentangaben anteilig der ursprünglichen Silberatome. Grafik frei nach [5] erstellt.

2.2 Vektorschreibweise und Kronecker-Produkt

Ausgehend vom Stern-Gerlach-Experiment können wir nun auf beliebige Zwei-Zustands-Systeme verallgemeinern. Ein Zwei-Zustands-System ist ein System, welches, wie es der Name schon sagt, genau zwei messbare Zustände einnehmen kann [6]. Im Stern-Gerlach-Experiment waren dies $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$. Wir nennen die möglichen Ergebnisse einer Messung ihre Eigenzustände [6], im Falle der Messung des Spins bilden diese Eigenzustände außerdem eine Basis, weshalb wir sie Basiszustände nennen. Die Bedeutung von Eigenzuständen wird in Kapitel 2.4 klarer.

Basiszustände sind nicht die einzigen Zustände, welche ein System einnehmen kann.

In der Regel befindet sich ein System in keinem Basiszustand [6].

Um mit Zuständen rechnen zu können, drücken wir sie als komplexe, normierte “Ket-Vektoren“ $|\psi\rangle$ aus. All diese Zustandsvektoren sind Elemente des sogenannten Hilbertraums, einem linearen Vektorraum, in dem jede Cauchy-Folge ein Grenzelement besitzt [6]. Genauere Ausführungen zu Vektorräumen im Allgemeinen, oder Hilberträumen im Speziellen, würden den Umfang dieser Arbeit sprengen. Für einen genauen Überblick verweise ich auf [11].

Die Basiszustände für die Messung des Spins in einem SGz definieren wir als

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ und } |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

Sie bilden eine orthonormal-Basis des 2^1 -dimensionalen Hilbertraums, nachgerechnet in Appendix B.2. Das bedeutet, sie stehen orthogonal zueinander und sind normiert [12]. Durch Linearkombinationen aus den Basisvektoren können alle anderen Zustände ausgedrückt werden. Die Dimension eines Hilbertraums ist äquivalent zur Anzahl der Basisvektoren [13].

Für jeden beliebigen Zustand $|\psi\rangle$ gibt es folglich eine Darstellung durch die Basiszustände:

$$|\psi\rangle = c_1 |\uparrow\rangle + c_2 |\downarrow\rangle = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Aufgrund der Normierung muss stets gelten: $c_1^2 + c_2^2 = 1$. Das wird für die Beschreibung von Wahrscheinlichkeiten in Kapitel 2.3 relevant werden.

Es gibt auch Systeme mit mehr als einem Teilchen. In solchen Systemen kann für jedes individuelle Teilchen der Zustand nach der Messung entweder $|\uparrow\rangle$ oder $|\downarrow\rangle$ sein. Die Eigenzustände (und in diesem Fall auch Basiszustände) des gesamten Systems sind dann

$$|\uparrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow\rangle, \dots, |\downarrow\downarrow\downarrow \dots \downarrow\downarrow\rangle \quad (2.3)$$

Die Vektordarstellung der Eigenzustände (und somit Basiszustände) des gesamten Systems erhalten wir, indem wir alle individuellen Zustände je eines Teilchens durch das

Kronecker-Produkt miteinander verknüpfen. Das bedeutet:

$$\begin{aligned}
 |\uparrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \otimes \dots \otimes |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}, \\
 \dots, \\
 |\downarrow\downarrow\downarrow \dots \downarrow\rangle &= |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \otimes \dots \otimes |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \dots \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \dots \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \dots \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

Das Kronecker-Produkt \otimes ist folgendermaßen definiert: Für $a \otimes b = c$, wobei a n -dimensional und b m -dimensional ist, ist c nm -dimensional. Außerdem gilt: $c = a \otimes b = (a_i b)$.

Anschaulicher besagt das Kroneckerprodukt:

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ \dots \\ a_n \end{pmatrix} \otimes b = \begin{pmatrix} a_1 b \\ a_2 b \\ \dots \\ a_n b \end{pmatrix}. \tag{2.5}$$

Ein beliebiger Zustand $|\psi\rangle$ kann wie im 2^1 -dimensionalen Fall als Linearkombination der Basiszustände ausgedrückt werden. Wir erhalten

$$|\psi\rangle = c_1 |\uparrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle + c_2 |\uparrow\uparrow\uparrow \dots \downarrow\rangle + \dots + c_n |\downarrow\downarrow\downarrow \dots \downarrow\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_n \end{pmatrix}. \tag{2.6}$$

Auch hier muss der Zustandsvektor $|\psi\rangle$ normiert sein, also

$$\sum_i c_i^2 = 1. \tag{2.7}$$

Beispielsweise gibt es für ein System mit zwei Teilchen, die jeweils die zwei Eigenzu-

stände $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ einnehmen können, $2^2 = 4$ Basiszustände:

$$\begin{aligned}
 |\uparrow\uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
 |\uparrow\downarrow\rangle &= |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
 |\downarrow\uparrow\rangle &= |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
 |\downarrow\downarrow\rangle &= |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

In diesem Fall hat der Hilbertraum die Dimension $\dim(H) = 4 = 2^2$.

Es ist zu sehen, dass der Hilbertraum eines Zwei-Zustands-Systems mit L Teilchen die Dimension

$$\dim(H) = 2^L \tag{2.9}$$

besitzt. Deshalb werden wir ab nun Hilberträume durch die Anzahl der Freiheitsgrade L charakterisieren.

2.3 Wahrscheinlichkeit

Wir können nun beliebige Zwei-Zustands-Systeme beschreiben, und alle ihre Zustände darstellen. Wie aber lässt sich dieses Wissen anwenden?

Oft möchten wir möglichst genau vorhersagen, wie sich ein System verhalten wird. Wie wir gesehen haben, ist es für Quantensysteme im Allgemeinen unmöglich, das Messergebnis exakt vorher zu sagen. Allerdings ist es möglich die Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten bestimmter Ereignisse vorherzusagen.

Dazu benötigen wir sogenannte Bra-Vektoren $\langle\psi|$. Sie können als Gegenstück zu den Ket-Vektoren $|\psi\rangle$ angesehen werden.

Bra-Vektoren sind definiert als [6]

$$\langle \psi | = |\psi\rangle^\dagger. \quad (2.10)$$

Durch \dagger wird eine Matrix, bzw. in diesem Fall ein Vektor, transponiert $|\psi\rangle^t$ und komplex-konjugiert $\overline{|\psi\rangle}$.

Das bedeutet, dass

$$\langle \psi | = |\psi\rangle^\dagger = \overline{|\psi\rangle}^t = \overline{\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_{2L} \end{pmatrix}}^t = \begin{pmatrix} c_1^* \\ c_2^* \\ \dots \\ c_{2L}^* \end{pmatrix}^t = (c_1^*, c_2^*, \dots, c_{2L}^*). \quad (2.11)$$

Erinnerung: Das komplex-konjugierte c^* einer komplexen Zahl $c = a + ib$ (unsere Vorfaktoren c_i sind Elemente aus \mathbb{C}) ist $c^* = a - ib$.

Per Postulat ist die Wahrscheinlichkeit für ein Messergebnis $|e_i\rangle$ im Zustand $|\psi\rangle$ [6]:

$$W(e_i|\psi) = |\langle e_i|\psi\rangle|^2. \quad (2.12)$$

Die Wahrscheinlichkeit ist das Betragsquadrat des Skalarprodukts aus Eigenzustand und Zustand.

Das Skalarprodukt ist definiert als

$$\langle a|b\rangle = a_1b_1 + a_2b_2 + \dots + a_nb_n. \quad (2.13)$$

Diese Definition für die Wahrscheinlichkeit ist insofern intuitiv, als dass die Eigenvektoren $|e_1\rangle, \dots, |e_{2L}\rangle$ orthonormal zueinander stehen. Daraus folgt, dass

- a) Wenn sich das System im Eigenzustand $|e_i\rangle$ befindet, gibt es die Wahrscheinlichkeit von 1, dass es sich nach erneuter Messung immer noch im Zustand $|e_i\rangle$ befindet. Im Beispiel des Stern-Gerlach-Experiments würde das bedeuten, dass Teilchen, welche im SGz mit Spin $|\uparrow\rangle$ gemessen wurden, in einem nachgeschalteten SGz ebenfalls mit Spin $|\uparrow\rangle$ gemessen werden - was wir in Kapitel 2.1 festgestellt haben. Mathematisch gesprochen: $|\langle e_i|e_i\rangle|^2 = |1|^2 = 1$.
- b) Außerdem gibt es eine Wahrscheinlichkeit von 0, dass ein System welches sich in einem Eigenzustand $|e_i\rangle$ befindet, in einem anderen Eigenzustand $|e_j\rangle$ gemessen wird - im Stern Gerlach Experiment hieße das, dass ein Teilchen mit Spin $|\uparrow\rangle$ in einem direkt nachgeschalteten SGz mit dem Spin $|\downarrow\rangle$ aufgefunden werden würde. Auch das wird durch das Skalarprodukt abgedeckt: $|\langle e_i|e_j\rangle|^2 = |0|^2 = 0$.

2.4 Pauli-Matrizen

In der Quantenmechanik werden die Messungen von quantenmechanischen Systemen durch Multiplikationen mit Operatoren (quadratischen Matrizen) dargestellt. Das Ergebnis dieser Multiplikation ist eine Beschreibung des Systems nach der Messung [6]. Aber Achtung: Messungen haben immer ein eindeutiges Ergebnis, nach der Messung kollabiert die Wellenfunktion (= "Kollaps der Wellenfunktion"), und es wird ausschließlich ein Eigenzustand gemessen, in welchem sich das System nun befindet [6]. Die Multiplikation liefert lediglich einen Zustand, mit dessen Hilfe wir gemäß (2.12) eine Vorhersage für den Zustand, in welchem das System kollabieren wird, treffen können. Auf die Wellenfunktion werden wir in Kapitel 4.3 genauer eingehen.

Bereits in Kapitel 2.1 haben wir festgestellt, dass sich durch eine Messung der Zustand eines Systems ändern kann, insofern sollte nicht verwunderlich sein, dass wir für diese Vorhersage nicht den ursprünglichen Zustand vor der Messung verwenden können.

Die Pauli-Matrizen σ^x , σ^y und σ^z sind ein Beispiel für Operatoren. Sie werden oft Spin-Operatoren genannt, da sie einer Messung des Spins entlang der jeweiligen Achse entsprechen.

Seien $|e_i\rangle$ die Eigenzustände einer Pauli-Matrix σ mit dem Eigenwert E_i , dann gilt per Definition eines Eigenvektors

$$\sigma |e_i\rangle = E_i |e_i\rangle. \quad (2.14)$$

Um es anders zu formulieren: Die Messung des Spins eines Eigenzustands einer Pauli-Matrix ergibt wieder diesen Eigenzustand. So sind alle messbaren Zustände eines Systems die Eigenzustände eben jenes Operators, durch welchen die jeweilige Messung dargestellt wird [6].

Die Pauli-Matrizen sind definiert als [6]:

$$\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Die Eigenzustände der Pauli- x - und Pauli- z -Matrizen werden in Appendix B.1 beispielhaft berechnet und lauten

$$\begin{aligned} |x_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, & |x_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \\ |z_1\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & |z_2\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Wir erkennen, dass die Eigenzustände wie bereits behauptet jeweils eine Basis bilden (vergleiche auch Appendix B.2). Jeder Zustand $|\psi\rangle$ eines Zwei-Zustands-Systems kann also als Linearkombinationen aus den Eigenzuständen eines Spin-Operators ausgedrückt

werden, so auch der Zustand nach Messung des Systems

$$\sigma |\psi\rangle = |\psi'\rangle = c'_1 |e_1\rangle + c'_2 |e_2\rangle. \quad (2.17)$$

Für $|\psi'\rangle$ gilt insbesondere nach (2.12):

$$W(e_i|\psi') = |\langle e_i|\psi'\rangle|^2 = |\langle e_i|(c'_1 |e_1\rangle + c'_2 |e_2\rangle)|^2 = c'_1 \langle e_i|e_1\rangle + c'_2 \langle e_i|e_2\rangle|^2 = |c'_i|^2. \quad (2.18)$$

Die Wahrscheinlichkeit, durch die Messung des Zustands $|\psi\rangle$ ein bestimmtes Messergebnis $|e_i\rangle$ zu erhalten, liegt somit bei $|c'_i|^2$. Zur Betonung möchte ich erneut wiederholen: Die Messung selbst lässt die Wellenfunktion kollabieren, jedes System befindet sich nach der Messung eindeutig in einem der Eigenzustände. Die Wahrscheinlichkeit $|c'_i|^2$ ist also schlicht eine Vorhersage für das Messergebnis.

Im Normalfall betrachten wir für Zustände eine Basis aus den Eigenvektoren der Pauli- z -Matrix σ^z . Mit (2.16) erkennen wir, dass diese Eigenzustände identisch zu den in (2.1) definierten Zuständen $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ sind. Das war natürlich zu erwarten, da $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ die beiden möglichen Spin-Zustände nach Messung entlang der z -Achse sind (siehe Kapitel 2.1), welche der Operator σ^z beschreibt.

$|z_1\rangle, |z_2\rangle$ bzw. $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ werden ab hier immer dann als kanonische Basis verwendet, wenn es nicht anders spezifiziert ist. Für die Verallgemeinerung dieser Basis auf beliebige Dimensionen kann Kapitel 2.2 erneut betrachtet werden.

Kapitel 3

Von Neumann'sche Verschränkungsentropie

Die Verschränkung ist eine der grundlegendsten Eigenschaften in der Quantenmechanik. Gleichzeitig ist sie schwer zu greifen - Einstein beschrieb sie als "spooky action at a distance". Deshalb wollen wir sie zuerst konzeptuell begreifen, und anschließend durch die von Neumann'sche Verschränkungsentropie quantifizieren.

3.1 Einführung

Verschränkung bedeutet, dass der Zustand eines Teils des Systems vom Zustand des restlichen Systems abhängen. Oder um es an einem Beispiel zu verdeutlichen:

Stellen wir uns eine Kette an Teilchen vor. Diese Kette als gesamtes System hat einen Zustand. Wenn wir die Kette nun in zwei Teile schneiden, können wir analysieren, ob der linke Teil Information über den Rechten enthält und vice versa - also ob eine Messung des Zustands des einen Subsystems neue Informationen über den Rest liefert.

Mit einer Kette aus zwei Elektronen, könnte das so aussehen:

Ist sie im Zustand $|\psi\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2} |\downarrow\uparrow\rangle$, könnten als Subsysteme der Zustand des ersten und der des zweiten Teilchens gewählt werden.

Angenommen wir messen den Zustand des ersten Teilchens als $|A\rangle = |\uparrow\rangle$, dann ist klar, dass der Zustand des zweiten Teilchens $|B\rangle = |\downarrow\rangle$ ist. Es gibt im Zustand des gesamten Systems $|\psi\rangle$ nämlich nur einen Term, in dem das erste Teilchen im entsprechenden Zustand ist: $\frac{\sqrt{2}}{2} |\uparrow\downarrow\rangle$. Weil das erste Subsystem also Informationen über das zweite enthält, nennen wir sie "verschränkt".

Wir können auch ein Beispiel für einen nicht-verschränkten Zustand betrachten:

$$|\psi\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} |\uparrow\uparrow\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} |\uparrow\downarrow\rangle. \quad (3.1)$$

Wieder halbieren wir das System, sodass ein Subsystem jeweils ein Teilchen ist. Dann sehen wir, dass der Zustand des ersten Subsystems $|A\rangle = |\uparrow\rangle$ ist, da dies der einzige mögliche Zustand in allen Termen ist. Über das zweite Subsystem erhalten wir durch diese Erkenntnis keine neuen Informationen - es könnte sich nach wie vor im Zustand $|B\rangle = |\uparrow\rangle$ oder $|B\rangle = |\downarrow\rangle$ befinden. Der Zustand ist somit nicht verschränkt.

Nicht-verschränkte Zustände können immer als Produktzustände geschrieben werden, sprich

$$|\psi\rangle = |\text{Zustand}A\rangle \otimes |\text{Zustand}B\rangle. \quad (3.2)$$

Diese Faktorisierung ist bei verschränkten Zuständen nicht möglich [6].

Im nicht-verschränkten Beispiel (3.1) lautet diese Faktorisierung in Produktterme:

$$|\psi\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} |\uparrow\uparrow\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} |\uparrow\downarrow\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} |\uparrow\rangle \otimes (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle). \quad (3.3)$$

Zwischen maximal-verschränkten und nicht-verschränkten Zuständen existieren viele Nuancen. So kann es beispielsweise passieren, dass die Kenntnis des einen Teils des Systems zwar die Wahrscheinlichkeiten für die Vorhersage der Messung des Zustands des restlichen Systems verschiebt, ihn jedoch nicht eindeutig festlegt.

Deshalb wollen wir jedem Zustand eine Zahl zuweisen, die sogenannte von Neumann'sche Verschränkungsentropie S_{vN} . Sie ordnet jedem Zustand, welcher in zwei Subsysteme aufgeteilt werden kann, eine Maßzahl für seine Verschränkung zu. Je größer sie ist, desto stärker ist der Zustand verschränkt [6].

Die von Neumann'sche Verschränkungsentropie S_{vN} ist also eine Maßzahl für die Verschränkung eines quantenmechanischen Zustands $|\psi\rangle$. Dabei gilt

$$S_{vN} \geq 0, \quad (3.4)$$

mit $S_{vN} = 0$ genau dann wenn $|\psi\rangle$ ein Produktzustand ist und somit keine Verschränkung vorliegt.

3.2 Ermittlung der Verschränkungsentropie

Natürlich wird S_{vN} nicht nach Gefühl festgelegt, sondern nach präzisen Rechenvorschriften.

Für alle weiteren Berechnungen (z.B. in meinem Code im Appendix A) habe ich sie über die sogenannte Schmidt-Zerlegung [6] berechnet.

Um die Verschränkungsentropie über die Schmidt-Zerlegung zu berechnen, starten wir

mit dem zu betrachtenden Zustand

$$|\psi\rangle = \sum_k^{2^L} c_k |e_k\rangle. \quad (3.5)$$

Dabei ist $|e_k\rangle$ eine Basis unseres Quantensystems. Für Betrachtungen des Spins können wir sie deckungsgleich zu den Eigenzuständen des Spinoperators σ^z (in der entsprechenden Dimension) wählen.

Nun werden zwei Subsysteme A, B mit Basen $|i\rangle_A, |j\rangle_B$ definiert, sodass $|\psi\rangle$ als

$$|\psi\rangle = \sum_i^{n_A} \sum_j^{n_B} c_{ij} |i\rangle_A |j\rangle_B \quad (3.6)$$

dargestellt werden kann.

Dabei erhalten wir Koeffizienten c_{ij} . Diese können als Matrix

$$\hat{C} = (c_{ij}) = \begin{pmatrix} c_{11} & \dots & c_{12^L} \\ \cdot & & \cdot \\ c_{2^L 1} & \dots & c_{2^L 2^L} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

interpretiert werden.

Als nächstes ermitteln wir die Singulärwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_\chi$ von \hat{C} , wobei χ der Rang von \hat{C} ist. Dafür werden unitäre Matrizen U, V bestimmt, sodass gilt

$$\hat{C} = UDV^\dagger. \quad (3.8)$$

Bei D handelt es sich um eine Diagonalmatrix mit den Singulärwerten λ_k auf der Hauptdiagonalen. Genaueres zur Schmidt-Zerlegung ist in [6] zu finden.

Aus diesen Singulärwerten lässt sich nun die von Neumann'sche Verschränkungsentropie berechnen als [6]

$$S_{vN} = - \sum_{\gamma=1}^{\chi} \lambda_\gamma^2 \ln \lambda_\gamma^2. \quad (3.9)$$

Für weitere Analysen haben wir das Schmidt-Verfahren in Code implementiert, siehe Appendix A.1. Denn je größer das System wird, desto aufwändiger wird es, die Singulärwerte händisch zu bestimmen.

In Kapitel 3.4 und Kapitel 3.5 betrachten wir die von Neumann'sche Verschränkungsentropie außerdem quantitativ, wofür viele verschiedene Verschränkungsentropien berechnet werden mussten. Auch hierbei leistet der Code Abhilfe und beschleunigt den Prozess gegenüber einem händischen Verfahren.

3.3 Minimale und Maximale Verschränkung

Die untere Grenze der Verschränkungsentropie, also die Verschränkungsentropie unverschränkter Zustände, wurde auf 0 festgelegt. Wie wir in der nachfolgenden Herleitung sehen werden, ist (3.4) durch die Schmidt-Zerlegung stets gewährleistet. Die Aussage, unverschränkte Zustände seien stets Produktzustände (3.2) beweisen wir im Unterkapitel 3.3.1 durch Minimierung von S_{vN} . Außerdem betrachten wir den Maximalwert, welchen S_{vN} annehmen kann in Unterkapitel 3.3.2.

3.3.1 Minimale Verschränkungsentropie

Um S_{vN} zu minimieren, gehen wir von der Definition (3.9) $S_{vN} = -\sum_{\gamma=1}^X \lambda_\gamma^2 \ln \lambda_\gamma^2$ aus. Zunächst zeigen wir in einem ersten Schritt, dass jeder Summand positiv ist, um dann im zweiten Schritt die Schlussfolgerung zu ziehen, dass demnach alle Summanden gleich null sein müssen, um die minimale Verschränkungsentropie 0 zu erreichen.

1. Schritt

Es gilt

$$\lambda_\gamma^2 \geq 0, \quad (3.10)$$

da alle Singulärwerte positive, reelle Zahlen sind [6].

Außerdem sind die Singulärwerte stets normiert [6]

$$\sum_{\gamma} \lambda_\gamma^2 = 1, \quad (3.11)$$

sodass wir leicht sehen können, dass gilt $\sum_{\gamma} \lambda_\gamma^2 = 1 \Leftrightarrow \lambda_\gamma^2 \leq 1 \Leftrightarrow \ln \lambda_\gamma \leq 0$.

Somit gilt

$$\ln \lambda_\gamma^2 \leq 0. \quad (3.12)$$

Insgesamt folgt also, dass (3.4) tatsächlich stets gelten muss

$$S_{vN} = -\sum_{\gamma=1}^X \lambda_\gamma^2 \ln \lambda_\gamma^2 \geq 0. \quad (3.13)$$

Insbesondere erkennen wir dies daran, dass die Singulärwerte stets positiv (3.10) bzw. deren Logarithmen stets negativ (3.12) sind, und ihr Produkt somit auch stets negativ. Verschiedene Summanden können sich folglich nicht kürzen.

2. Schritt

Um (3.13) zu minimieren setzen wir den Term gleich null:

$$S_{vN} = - \sum_{\gamma=1}^x \lambda_{\gamma}^2 \ln \lambda_{\gamma}^2 = 0. \quad (3.14)$$

Da Summanden sich nicht kürzen können, muss in (3.14) jeder Summand gleich null sein:

$$\lambda_{\gamma}^2 \ln \lambda_{\gamma} = 0. \quad (3.15)$$

Das ist nur der Fall für $\lambda_{\gamma} = 0$ oder $\lambda_{\gamma} = 1 \Leftrightarrow \ln \lambda_{\gamma}^2 = 0$.

Aus der Normierung der Singulärwerte (3.11) folgt nun schlussendlich, dass $\lambda = 1$ der einzige Singulärwert ist.

Fazit

Die von Neumann'sche Verschränkungsentropie ist also minimal, wenn es genau einen Singulärwert $\lambda = 1$ gibt, der Zustand $\psi = |i\rangle_A |j\rangle_B$ also, wie bereits in Kapitel 3.1 behauptet, ein Produktzustand ist.

3.3.2 Maximale Verschränkungsentropie

Die Herleitung der oberen Schranke liegt außerhalb des Rahmens dieser Arbeit. Für ein 2^L -dimensionales System liegt sie nach [1] bei

$$S_{vN} = \frac{L}{2} \ln 2, \quad (3.16)$$

wobei es 2^L Singulärwerte mit dem Wert

$$\lambda_{\gamma}^2 = \frac{1}{2^L} \quad (3.17)$$

gibt.

Die Von Neumann'sche Verschränkungsentropie liegt also immer in dem Intervall

$$0 \leq S_{vN} \leq L/2 \ln 2. \quad (3.18)$$

3.4 Verschränkung bei unterschiedlichen Mischverhältnissen

Verschiedene Parameter können die Verschränkungsentropie beeinflussen. Einer davon ist das "Mischverhältnis" der Eigenzustände im Zustand.

Betrachte das System

$$|\psi_\beta\rangle = \frac{1}{\alpha}(\beta|\uparrow\uparrow\rangle + (1-\beta)|\downarrow\downarrow\rangle), \quad (3.19)$$

wobei α so gewählt ist, dass $|\psi_\beta\rangle$ normiert ist.

Nun wird β im Intervall $[0; 1]$ variiert, sprich alle Mischverhältnisse der Basisvektoren $|\uparrow\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\downarrow\rangle$ betrachtet. Die Implementierung ist im Appendix A.2 aufgeführt, das Ergebnis wird in Abbildung 3.1 geplottet.

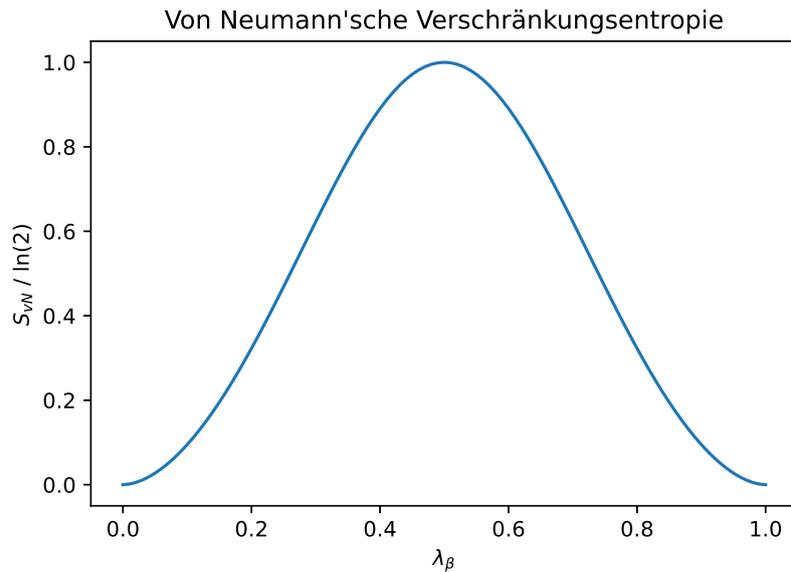


Abbildung 3.1: Variation des Mischverhältnisses des Zustands $|\psi_\beta\rangle = \frac{1}{\alpha}(\beta|\uparrow\uparrow\rangle + (1-\beta)|\downarrow\downarrow\rangle)$. Entlang der x-Achse sind die Werte von β aufgeführt. Entlang der y-Achse $S_{vN}/\ln 2$.

In der Grafik 3.1 erkennen wir, dass sich der Graph symmetrisch verhält, mit einem Maximum bei $\beta = 0.5$. Das bedeutet, dass die Verschränkung maximal ist, wenn die beiden relevanten Eigenzustände in (3.19) gleich gewichtet sind.

Diese Erkenntnis ist konsistent mit Page's Befund, dass Zustände mit gleichverteilten Singulärwerten am stärksten verschränkt sind (3.17).

Außerdem ist sie intuitiv: Im gleichmäßigen 1 : 1-Verhältnis löst sich, sollten wir einen der Spins bestimmen, die Unsicherheit auf, in welchem Zustand sich das andere Teilchen befindet. Sind hingegen die Eigenzustände beispielsweise in einem 4 : 1 Verhältnis gemischt, so würde die Kenntnis eines Zustands als $|\uparrow\rangle$ zwar immer noch eindeutig den Zustand des Anderen als $|\uparrow\rangle$ festlegen, allerdings gäbe es ohnehin eine 80-prozentige Chance, dass dieser Zustand $|\uparrow\rangle$ wäre, und somit ist der Informationsgewinn deutlich geringer als im gleich-gewichteten Fall, die Verschränkungsentropie also niedriger.

Für den Fall $\beta = 0$ oder $\beta = 1$ ist die Verschränkungsentropie $S_{vN} = 0$, da $|\psi_\beta\rangle = \frac{1}{\alpha}(\beta|\uparrow\uparrow\rangle + (1-\beta)|\downarrow\downarrow\rangle)$ dann in einem Produktzustand $|\psi\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$ bzw.

$|\psi\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle = |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$ vorliegt. Wie in Kapitel 3.1 festgestellt, sind Produktzustände niemals verschränkt.

3.5 Verschränkung bei verschiedenen Subsystemgrößen

Bisher haben wir Systeme immer in der Hälfte aufgetrennt, jedoch wäre eine Unterteilung des Systems in unterschiedlich große Subsysteme auch denkbar.

Dafür sei nun $|\psi\rangle = \sum_i^{n_A} \sum_j^{n_B} c_{ij} |i\rangle_A |j\rangle_B$ ein beliebiger zufälliger Zustand.

Ein zufälliger Zustand ist ein solcher, in dem die Koeffizienten der Basisvektoren zufällig ausgewählt sind. Er kann zufälligerweise weitere Eigenschaften erfüllen (z.B. ein Eigenzustand sein), im Allgemeinen ist das allerdings nicht der Fall.

Für ein 2^L -dimensionales System, also ein solches mit L Freiheitsgraden, kann die Auftrennung in die Subsysteme A, B zwischen je zwei Freiheitsgraden vorgenommen werden. Stellen wir uns beispielsweise eine Kette von 4 Elektronen vor, wobei der Zustand $|\psi\rangle$ eine Konfiguration ihrer Spins ist. Die Aufteilung in die Subsysteme könnte nun als ein 2^1 - und ein 2^3 -dimensionales Subsystem geschehen. Es könnten allerdings auch je zwei Elektronen pro Subsystem beschrieben werden, also jeweils Subsysteme der Dimension 2^2 .

Mit dem Code aus Appendix A.3 wurde für Systeme mit verschiedenen Systemgrößen (Freiheitsgraden) L die Verschränkungsentropie berechnet. Dabei wurden die Subsysteme nach 1,2,3,... Freiheitsgraden aufgeteilt.

Die Verschränkungsentropie S_{vN} für jede dieser Auftrennungen ist in der Abbildung 3.2 dargestellt. Dabei fällt auf, dass die Verschränkungsentropie eines typischen Zustands maximal ist, wenn beide Subsysteme möglichst die selbe Dimension haben. Die Kurve verläuft symmetrisch.

Die Abnahme der Verschränkungsentropie zu den Rändern hin können wir uns intuitiv so erklären: wenn wir ein System mit $L = 10$ in Subsysteme mit $L_A = 1$ und $L_B = 9$ aufteilen, dann ist es sehr unwahrscheinlich, dass das Teilsystem A sehr viele Informationen über den Rest enthält, da es deutlich kleiner ist. Somit muss auch die Verschränkungsentropie klein sein.

Andersherum kennen wir fast den gesamten Zustand, wenn das Teilsystem B gemessen wird, somit ist der Informationsgewinn, falls wir aus B Schlussfolgerungen über A ziehen können, ebenfalls gering. Die Verschränkungsentropie ist also klein.

Dies erklärt auch die Symmetrie der Kurven.

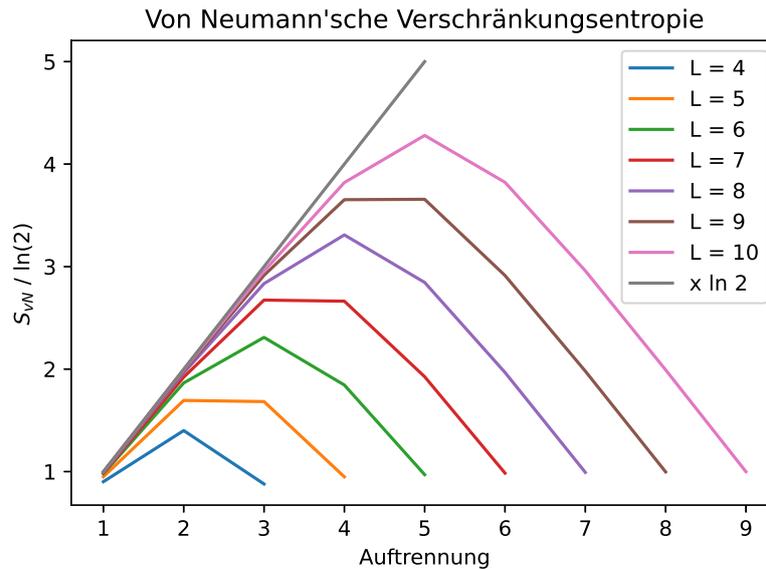


Abbildung 3.2: Verschränkungsentropie für Systeme der Größe $2^2 - 2^{10}$, die nach einer unterschiedlichen Anzahl an Freiheitsgraden aufgetrennt werden. Jeder Datenpunkt ist der Durchschnitt der Verschränkungsentropie von 20 zufälligen Zuständen.

Bei der grauen Kurve in Abbildung 3.2 handelt es sich um die sogenannte “Page Curve“, sie beschreibt die maximale Verschränkung (3.16) bei einer Auftrennung nach x Freiheitsgraden und beträgt stets

$$S_{vN,max} = x \ln 2. \quad (3.20)$$

Wir sehen, dass sich die durchschnittliche Verschränkung jeweils nahe am Maximalwert (3.16) befindet.

Insgesamt wird klar, dass die von Neumann’sche Verschränkungsentropie maximal wird, wenn alle Eigenzustände gleich gewichtet sind, und die Subsysteme möglichst mittig aufgetrennt werden.

Ab hier betrachten wir darum immer eine Auftrennung bei $x = \lfloor L/2 \rfloor$, außer es ist anders spezifiziert.

Kapitel 4

Ising Hamiltonian

Die Verschränkungsentropie können wir anhand eines konkreten Beispiels weiter untersuchen. Ein Beispiel für ein physikalisches Phänomen in welchem quantenmechanische Phänomene sichtbar werden ist der Magnetismus.

4.1 Magnetismus

Magnetismus ist ein makroskopisch wahrnehmbares Phänomen, welches uns im alltäglichen Leben häufig begegnet, zum Beispiel beim Aufhängen von Bildern am Kühlschrank. Um den Ursprung der magnetischen Wechselwirkungen verstehen zu können, müssen wir uns allerdings wieder auf die subatomare Ebene begeben.

Im Kontext von Magnetismus fallen oft verschiedene Begriffe.

- Paramagnetismus äußert sich so, dass ohne ein äußeres Magnetfeld keine magnetische Ordnung vorliegt [14, 15].
- Ferromagnetismus unterscheidet sich vom Paramagnetismus dadurch, dass die magnetische Ordnung auch ohne ein äußeres Feld existiert [15]. In ferromagnetischen Materialien richten sich die Spins der Elektronen durch Wechselwirkungen untereinander parallel aus, der quantenmechanische Zustand eines Ferromagneten lässt sich demnach in einer eindimensionalen Annäherung beschreiben durch

$$|\psi\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow \dots\rangle. \quad (4.1)$$

4.2 Definition Ising Hamiltonian

Der Ising Hamiltonian \hat{H} je nach Parametern unterschiedliche magnetische Systeme [16]. Im eindimensionalen Ising Modell stellen wir uns die L Teilchen in einer eindimensionalen

Kette (entlang der y -Achse) eingereicht vor. Zur weiteren Vereinfachung nehmen wir an, jedes der Teilchen interagiere lediglich mit den benachbarten Teilchen. Außerdem richten wir das System so aus, dass die Spins entlang der x -Achse ausgerichtet sind.

Dann ergibt sich ein Term

$$\hat{A}_1 = -J \sum_i^L \sigma_i^x \sigma_{(i+1)}^x. \quad (4.2)$$

σ_i^x ist die Pauli-x-Matrix welche wir in (2.15) definiert haben. Ihr Produkt beschreibt die Interaktion von benachbarten Spins entlang der X-Achse, vergleiche auch Kapitel 2.4.

Der Faktor J gibt an, ob und wie stark benachbarte Spins miteinander interagieren.

- Für $J > 0$ handelt es sich um einen ferromagnetischen Stoff, die einzelnen Zustände richten sich parallel aus.
- Für $J = 0$ liegt keine magnetische Wechselwirkung vor.
- Für $J < 0$ handelt es sich um einen antiferromagnetischen Stoff, die einzelnen Zustände richten sich antiparallel aus.

Ein externes magnetisches Feld, welches entlang der z -Achse wirkt, kann zusätzlich modelliert werden als

$$\hat{A}_2 = g \sum_i \sigma_i^z. \quad (4.3)$$

Das externe Feld wirkt auf alle Teilchen individuell mit einer Stärke von g , weshalb pro Term nur die Pauli-Matrize von einem Teilchen i vorkommt, nicht deren Produkt. Dabei liegt nur ein Feld vor, falls gilt $g \neq 0$.

Die Gesamtformel für den Ising Hamiltonian setzt sich nun zusammen aus den Termen (4.2) und (4.3) [16]. Wir erhalten

$$\hat{H} := -J \sum_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + g \sum_i \sigma_i^z. \quad (4.4)$$

Im klassischen Ising-Modell wirkt das externe Feld entlang der Spins (also entlang der x -Achse). Somit unterscheidet sich unser Ansatz davon, es wird auch vom Transversfeld-Ising-Modell gesprochen.

Hinweis zur Notation:

Beim genauen lesen ist sicherlich aufgefallen, dass in der Definition vom Ising Hamiltonian (4.4) die Dimensionen der Terme nicht miteinander übereinstimmen, da die Pauli-Matrizen σ_i^x, σ_i^z jeweils die Dimension 2×2 besitzen, der Hamiltonian für ein System aus L Elektronen jedoch $2^L \times 2^L$ -dimensional sein müsste (da alle Zustände im System 2^L -dimensional sind, siehe auf (2.9)).

Das ist natürlich nicht wirklich der Fall, sondern liegt an der Notation. Das Produkt

$\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x$ steht hier für das Kronecker-Produkt (2.5) der Pauli-Matrizen. Außerdem wird für die ersten $i - 1$, sowie die letzten $L - i - 1$ Elektronen die 2×2 Identitätsmatrix \mathbb{I} durch das Kroneckerprodukt anmultipliziert. Die Identitätsmatrix bildet Werte auf sich selbst ab, verändert sie also nicht. Allerdings sorgt die Multiplikation mit ihr dafür, dass die Dimensionen übereinstimmen.

Es gilt in unserer Schreibweise also

$$\sigma_i^x \sigma_{(i+1)}^x = \mathbb{I} \otimes \dots \otimes \mathbb{I} \otimes \sigma_i^x \otimes \sigma_{(i+1)}^x \otimes \mathbb{I} \otimes \dots \otimes \mathbb{I}. \quad (4.5)$$

Analog gilt für σ_i^z :

$$\sigma_i^z = \mathbb{I} \otimes \dots \mathbb{I} \otimes \sigma_i^z \otimes \mathbb{I} \otimes \dots \otimes \mathbb{I}. \quad (4.6)$$

4.3 Einschub: Schrödinger Gleichung

Die Schrödinger Gleichung hilft dabei, genauer zu verstehen wie ein Hamiltonian \hat{H} wirkt und was er aussagt.

Sie hat stets die Form [6]

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle. \quad (4.7)$$

Daraus lässt sich sofort erkennen, dass es sich bei der Schrödingergleichung um eine Eigenwertgleichung handelt: um sie zu lösen, müssen die Eigenvektoren $|\psi\rangle$ des Operators \hat{H} bestimmt werden.

E ist dabei der Eigenwert von \hat{H} . Physikalisch beschreibt E die Energie des jeweiligen Zustands. Wie auch in der klassischen Physik gibt es in der Quantenphysik Zustände, welche energieärmer oder energiereicher sind. Den Zustand mit der kleinsten Energie nennen wir Grundzustand.

Die genaue Interpretation der Gleichung übersteigen den Rahmen dieser Arbeit. [6] liefert eine detailreichere Vorstellung der Schrödingergleichung. Für den Rest der Arbeit sollten wir mitnehmen, dass Die Eigenwerte eines Hamiltonians die Energie des jeweiligen Eigenzustands angeben.

4.4 Grundzustände

Mit diesem Wissen können wir nun auf den Ising-Hamiltonian zurückkommen.

Wir können seine Eigenwertgleichung (4.7) lösen und so Eigenzustände $|z_i\rangle$ und die jeweilige Energie E_i ermitteln. Dafür haben wir ein eigenes Skript geschrieben, auf welches in Appendix A.4 genauer eingegangen wird. Die Ergebnisse werden in Kapitel 5 genauer analysiert.

Es ist alternativ auch möglich, die Gleichung analytisch zu lösen. Für ein System der

Größe $L = 2$ wird dies hier beispielhaft durchgeführt.

Den Ising Hamiltonian $\hat{H} := -J \sum_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + g \sum_i \sigma_i^z$ (4.4) vereinfachen wir zu

$$H := -J/g \sum_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sum_i \sigma_i^z. \quad (4.8)$$

Daraus ergibt sich durch einsetzen der Pauli-Matrizen (2.15):

$$\begin{aligned} H &:= -J/g \sum_i^2 \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sum_i \sigma_i^z \\ &= -J/g \sigma_1^x \otimes \sigma_2^x + \sigma_1^z \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes \sigma_2^z \\ &= -J/g \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & -J/g \\ 0 & 0 & -J/g & 0 \\ 0 & -J/g & 0 & 0 \\ -J/g & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Mit diesem Hamiltonian als Grundlage können wir nun die Eigenwerte und Eigenzustände bestimmen. Dafür können über das charakteristische Polynom von $\hat{H} - X\mathbb{I}$ die Eigenwerte E_i (Nullstellen des charakteristischen Polynoms) und Eigenzustände $|g_i\rangle$ (Lösungen des linearen Gleichungssystems $(\hat{H} - E_i) |\psi\rangle = 0$) ermittelt werden [17].

Die Eigenzustände allein sagen nicht viel aus, da sie erst im Zusammenhang mit der Energie interessant werden. Die Zustände mit der geringsten Energie, also die energetisch günstigsten, werden wie bereits in Kapitel 4.3 Grundzustände genannt.

Wir können die Grundzustände von (4.9) für einige Extremfälle bestimmen, um ein besseres Verständnis zu erhalten. Dafür setzen wir entsprechende Werte für J und g ein. Für die Berechnungen wurde der Code aus Appendix A.4 genutzt.

i) $J = 1, g = 0$: Ausschließlich Wechselwirkung zwischen benachbarten Teilchen.

$$\begin{aligned}
|g_1\rangle &= -\frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv -\frac{\sqrt{2}}{2}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) \\
&\equiv -\frac{\sqrt{2}}{2}(|\rightarrow\rightarrow\rangle + |\leftarrow\leftarrow\rangle), E_1 = -1, \\
|g_2\rangle &= -\frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv -\frac{\sqrt{2}}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\
&\equiv -\frac{\sqrt{2}}{2}(|\rightarrow\rightarrow\rangle - |\leftarrow\leftarrow\rangle), E_2 = -1, \\
|g_3\rangle &= -\frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv -\frac{\sqrt{2}}{2}(-|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), E_3 = 1, \\
|g_4\rangle &= \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \frac{\sqrt{2}}{2}(-|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle), E_4 = 1.
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Da $|g_1\rangle, |g_2\rangle$ den selben minimalen Eigenwert, also die minimale Energie, besitzen, sind sie die Grundzustände. Nachdem kein externes Feld anliegt ($g = 0$), welches die Spins ablenken könnte, und benachbarte Spins miteinander interagieren ($J = 1$), wäre zu erwarten, dass sich die Spins parallel (da $|J| > 0$) ausrichten.

Die Betrachtung der Grundzustände in einer x -Basis, da die Wechselwirkungen der Spins entlang der x -Achse geschehen (siehe (4.2)), zeigt, dass die Spins tatsächlich jeweils parallel ausgerichtet sind. Die Umrechnungen in die x -Basis erfolgten nach Appendix B bzw. B.3.2).

Für die nachfolgenden Fälle sind lediglich die Grundzustände gegeben.

ii) $J = -1, g = 0$: Ausschließlich Wechselwirkung zwischen benachbarten Teilchen.

$$\begin{aligned}
 |g_1\rangle &= -\frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv -\frac{\sqrt{2}}{2}(-|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\
 &\equiv -\frac{\sqrt{2}}{2}(|\rightarrow\leftarrow\rangle + |\leftarrow\rightarrow\rangle), E_1 = -1, \\
 |g_2\rangle &= \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \frac{\sqrt{2}}{2}(-|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) \\
 &\equiv \frac{\sqrt{2}}{2}(-|\rightarrow\leftarrow\rangle - |\leftarrow\rightarrow\rangle), E_2 = -1.
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

Mit umgekehrten Vorzeichen der Wechselwirkung zwischen den Spins richten sich nun die Spins entlang der x -Achse entgegengesetzt, also antiparallel aus. Wieder wurden die Zustände in Appendix B in eine x -Basis transformiert, um dies klarer zu sehen.

iii) $J = 0, g = 1$: Ausschließlich Wechselwirkung mit externem Feld.

$$|g_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |\downarrow\downarrow\rangle, E_1 = -2, \tag{4.12}$$

Hier fällt auf, dass ohne Wechselwirkungen zwischen den Spins ($J = 0$), die Spins sich vollständig nach dem externen Feld (g) ausrichten. Außerdem richten sie sich nach der Richtung des externen Feldes.

iv) $J = 0, g = -1$: Ausschließlich Wechselwirkung mit externem Feld.

$$|g_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv |\uparrow\uparrow\rangle, E_1 = -2, \tag{4.13}$$

Wieder ist der Grundzustand vollständig nach dem externen Feld ausgerichtet. Diesmal weisen die Spins in die entgegengesetzte Richtung als in iii), da das Feld entgegengesetzt anliegt.

Kapitel 5

Grundzustände und zufällige Zustände im Vergleich

Grundzustände sind also solche Zustände, die die Energie minimieren. Eine natürliche Fragestellung daraus ist es zu untersuchen, wie und ob sie sich von anderen, zufälligen Zuständen unterscheiden.

Dafür wollen wir sie in zwei Aspekten vergleichen: Der Verschränkungsentropie und den Singulärwerten. Natürlich gehören diese beiden Merkmale eng zusammen, da die Verschränkungsentropie aus den Singulärwerten berechnet wird.

5.1 Singulärwerte

Zuerst betrachten wir die Singulärwerte λ_γ . Wir erinnern uns: Die Singulärwerte λ_γ benötigen wir, um die Verschränkungsentropie S_{vN} zu berechnen.

Gleichzeitig sind die Singulärwerte auch jene Werte, welche nach Diagonalisierung (3.8) auf der Hauptdiagonalen stehen. Sie sind charakteristisch da eindeutig für jeden Zustand [6].

Wie also zeichnen sich Grundzustände aus? Für den Fall $J = 0$, $g = 1$ links in der Abbildung 5.1 und $J = 1$, $g = 0.5$ rechts in der Abbildung 5.1 bestimmten wir für ein System mit 10 Spins die Singulärwerte der Grundzustände. Der exakte Code ist in Appendix A.5 zu finden.

Wir finden 32 Singulärwerte, da der 2^{10} -dimensionale Zustandsvektor $|\psi\rangle$ in zwei Subsysteme der Dimension 2^5 eingeteilt wird. Die aus den Vorfaktoren c_{ij} entstehende Matrix \hat{C} (vergleiche (3.7)) hat demnach die Dimension $2^5 \times 2^5$, wodurch auf der Hauptdiagonalen der diagonalisierten Matrix (3.8) genau $2^5 = 32$ Einträge, die Singulärwerte, stehen können.

Mehr Informationen zur Berechnung der Singulärwerte finden sich in Kapitel 3.2.

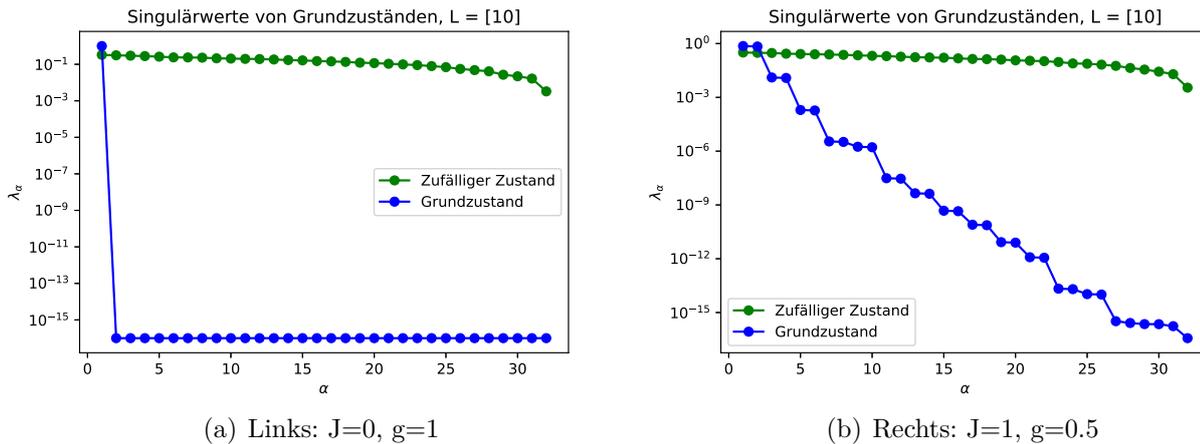


Abbildung 5.1: Singulärwerte λ_α eines Grundzustandes des Ising Hamiltonians. Als Referenz sind die Singulärwerte eines zufälligen Zustands abgebildet. Alle Singulärwerte sind absteigend sortiert.

Nun zu den Graphen. Zuerst fällt auf, dass in beiden Fällen die Singulärwerte der zufälligen Zustände recht gleichmäßig auf einem hohen Niveau verteilt sind. Das liegt daran, dass ein zufälliger Zustand in der Regel nahezu vollständig verschränkt ist (siehe Kapitel 3.5 oder [1]). In Kapitel 3.4 haben wir außerdem gesehen, dass die maximale Verschränkungsentropie S_{vN} erreicht wird, wenn die Singulärwerte möglichst gleichmäßig verteilt sind. Somit war es zu erwarten, dass ein zufälliger, und dadurch in der Regel nahezu vollständig verschränkter Zustand, gleichmäßig verteilte Singulärwerte besitzt.

Die Singulärwerte der Grundzustände hingegen tendieren recht schnell gegen 0. Im linken Beispiel der Abbildung 5.1 ist nur der erste Singulärwert vorhanden, im rechten Beispiel fallen die Singulärwerte zumindest wesentlich schneller als die Singulärwerte des zufälligen Zustands.

Anhand der ersten, größten Singulärwerte lassen sich Grundzustände nahezu vollständig charakterisieren, da die restlichen näherungsweise auf 0 gesetzt werden können [18].

Einen kurzen Ausblick darauf, was mit “charakterisieren“ gemeint ist und wie Grundzustände genutzt werden können, findet sich im folgenden Kapitel 5.2 sowie in Kapitel 6.

5.2 Verschränkungsentropie

Als nächstes betrachten wir die Verschränkungsentropie (3.9).

Nach dem vorherigen Kapitel können wir vermuten, dass die Verschränkungsentropie für Grundzustände recht gering ist, da die Singulärwerte sehr ungleichmäßig verteilt sind. Um dies zu verifizieren haben wir wieder Simulationen durchgeführt, der Code ist in Ap-

pendix A.6 auffindbar. Für verschiedene Systemgrößen L wird die Verschränkungsentropie (mit einer Auftrennung bei $\lfloor \frac{L}{2} \rfloor$) und mit zufälligen Zuständen verglichen.

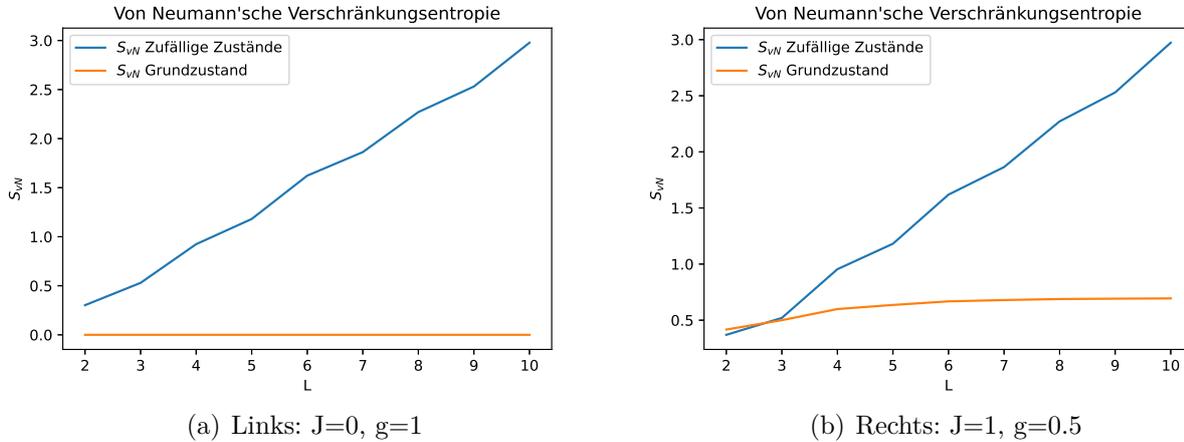


Abbildung 5.2: Vergleich der von Neumann'schen Verschränkungsentropie bei Grundzuständen und zufälligen Zuständen. Die zufällige Kurve ist der Schnitt aus je 20 zufälligen Zuständen.

Auffällig ist in beiden Variationen des Plots 5.2, dass die Verschränkungsentropie für Grundzustände nahezu konstant bleibt, während die Verschränkungsentropie für zufällige Zustände stetig ansteigt.

Im linken Beispiel in 5.2 liegt zusätzlich der Sonderfall vor, dass die Verschränkungsentropie der Grundzustands 0 beträgt, dieser also nicht verschränkt ist. Betrachten wir (4.12), den Grundzustand des Ising Hamiltonians mit $L = 2, J = 0, g = 1$, so erkennen wir, dass es sich dabei um einen Produktzustand handelt

$$|g_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle. \quad (5.1)$$

Nach Kapitel 3.1 sind Produktzustände immer unverschränkt, weshalb mindestens für $L = 4$ die Verschränkungsentropie $S_{vN} = 0$ zu erwarten war. Nachdem in allen Dimensionen ebenfalls keine Verschränkung vorliegt, muss es sich bei ihnen ebenfalls um Produktzustände handeln.

Das erklärt auch, weshalb in Abbildung 5.1 nur ein Singulärwert ungleich 0 gefunden wurde (vergleiche Kapitel 3.3).

Insgesamt erkennen wir aus Abbildung 5.2, dass die Komplexität (Verschränkung) von Grundzuständen langsamer mit der Systemgröße steigt als die von zufälligen Zuständen.

Bei der Simulation von zunehmend großen Systemen steigen Speicherplatzbedarf und Rechenaufwand aufgrund der größeren Zustandsvektoren stark an. So werden große Systeme schwer bis nicht mehr berechenbar. An diese Grenze sind wir innerhalb dieser Arbeit auch gestoßen, weshalb in Plots nur vergleichsweise kleine Systeme gezeigt wurden. Wenn wir allerdings Grundzustände nutzen, um das System darzustellen, genügt es einige wenige Singulärwerte zu speichern und verwenden, um den Zustand näherungsweise zu beschreiben. Alle anderen Werte können näherungsweise auf 0 gesetzt werden [18].

Das liegt daran, dass die Verschränkungsentropie von Grundzuständen sehr gering ist, wodurch nur wenige Informationen verloren gehen wenn lediglich ein Teilsystem (jenes, welches zu den relevanten Singulärwerten korrespondiert) betrachtet wird. Denn wir erinnern uns: die Verschränkungsentropie sagt aus, wie viele Informationen ein Teilsystem über den Rest enthält (siehe Kapitel 3.1).

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

Diese Arbeit hat uns von den Grundlagen der Quantenmechanik bis hin zu präzisen Analysen der Verschränkungsentropie der energiearmen Grundzuständen geführt.

Ausgehend vom Stern-Gerlach-Experiment konnten wir nachvollziehen, was Zustände eines Quantenmechanischen Systems sind und wie diese durch Vektoren beschrieben werden können. Anschließend haben wir die Quintessenz der Quantenmechanik - der Verschränkung - durch die von Neumann'sche Verschränkungsentropie quantifiziert. Nachdem wir diese auf ein reales Phänomen, den Magnetismus, angewandt haben, haben wir Grundzustände kennengelernt. Diese sind charakterisierbar durch ihre einfache (geringfügig verschränkte) Struktur und wenige Singulärwerte.

Basierend auf diesen Erkenntnissen eröffnet sich eine neue Welt an Möglichkeiten für zukünftige Forschungsprojekte:

- a) Die sogenannte Produktzustände, welche wir schon in (3.2) gesehen haben, sind die in Kapitel 5.2 angeschnittene Rechenleistungs-effektive Möglichkeit, Grundzustände aufgrund ihrer geringen Verschränkung als Produkt aus Matrizen darzustellen [3]. Dabei sind Grundzustände nicht von sich aus Produktzustände, sondern alle bis auf den größten Singulärwert können auf null gesetzt werden, um einen Produktzustand zu erreichen. Dieser stimmt näherungsweise mit dem ursprünglichen Grundzustand überein [3]. Von dort aus ergeben sich Möglichkeiten, beispielsweise die Varianz der Energie und Verschränkung in Produktzustände zu untersuchen [19].
- b) Im Zuge dessen könnte sich auch mit dem sogenannten "Area Law", also Flächengesetz, beschäftigt werden. Es beschreibt den Anstieg der Verschränkungsentropie von Grundzuständen, welcher deutlich geringer ausfällt als bei typischen, zufälligen Zuständen, da er mit der "Grenze" zum Rest des Systems (in einem 2-dimensionalen Gitter zum Beispiel linear) skaliert [20]. Somit ergibt sich ein direkter Zusammenhang zu Forschungsfrage a), da das Flächengesetz aufgrund der Konstruktionsweise von Produktzustände stets für diese gilt [20]. Außerdem erklärt es, dass die Verschränkungsentropie der Grundzustände der 1-dimensionalen Kette in Kapitel 5.2

nahezu konstant bleibt.

- c) Eine weitere potentielle Richtung der Forschung wäre das Studieren und Modellieren weiterer realer Phänomene neben dem Magnetismus. Dabei könnte beispielsweise das Verhalten beim Phasenübergang, also dem Punkt, an welchem eine kleine Änderung der Parameter eine große, qualitative Änderung des Zustands des Systems verursacht [16], untersucht werden. Im Beispiel des Ising Hamiltonians gibt es einen Phasenübergang im eindimensionalen Fall für $J = g$ [21]. Eine Analyse dieser Phasenübergänge kann sicherlich weitere charakteristische Eigenschaften und ein breiteres Verständnis quantenmechanischer Phänomene schaffen.

Wo die Quantenmechanik Einzug in viele alltägliche Gebiete erhält und aus modernen Technologien nicht mehr wegzudenken ist, ist ein grundlegendes Verständnis unumgänglich. Ich hoffe mit dieser Arbeit einen kleinen Beitrag zu diesem Verständnis geleitet zu haben. Langfristig gibt es noch viele weitere spannenden Fragen zu erkunden.

Anhang A

Code

Die Programme wurden in Python 3.11.6 in einer Jupyter Notebook-Umgebung geschrieben. Der Code setzt die Bibliotheken “numpy“ Version 1.26.0, “math“ Version 3.12.0, sowie “matplotlib“ Version 3.8.2 voraus.

Die aufgeführten Code-Ausschnitte stellen nicht den vollständigen Code dar, Funktionen zum Plotten und Testen, sowie Importe sind nicht enthalten.

Die Simulationen waren stark limitiert durch die begrenzte Rechenleistungen des verfügbaren Computers. So konnten nur verhältnismäßig kleine Systeme (bis zu $L = 12$) in vernünftiger Zeit berechnet werden. Für die Zwecke dieser Arbeit war dies jedoch ausreichend.

A.1 Schmidt Verfahren

Hier wird die Von Neumann’sche Verschränkungsentropie (im Code S genannt) nach dem Verfahren aus 3.2 berechnet. Die hier als C bezeichnete Matrix entspricht der Matrix \hat{C} der Koeffizienten beim Basisübergang des Gesamtsystems in Subsysteme in (3.7).

```
1 def entanglementEntropy(C):
2     # Bestimme Singulaerwerte der C-Matrix
3     _, singular_values, _ = np.linalg.svd(C)
4
5     # Verschraenkungsentropie S berechnen
6     S = 0
7     for value in singular_values:
8         # Singulaerwerte muessen von 0 verschieden sein
9         if value != 0:
10            S -= value**2*np.log(value**2)
11     return S
```

A.2 Mischverhältnisse

Diese Funktion liegt Abbildung 3.1 zugrunde, der Teil zum Plotten ist ausgelassen. Die Verschränkungsentropie des Zustands (3.19) wird durch die Funktion aus Appendix A.1 ermittelt. Der Zustand wird als Vektor (np.array) in der Variable factors gespeichert, und anschließend normiert (vgl. Z.8f).

Um die \hat{C} zu erhalten kann die Methode np.reshape() verwendet werden, da der Zustand in der trivialen Basis des Hilbertraums (2.4) angegeben ist, und nach der Auftrennung ebenfalls durch die trivialen Basen (2.8) der 2^1 -dimensionalen Subsysteme dargestellt wird. Das bedeutet, dass durch den Basisübergang bei Darstellung des Zustands in den Subsystemen die Koeffizienten nicht verändert werden, sondern lediglich ihre Anordnung statt in einem 2^2 -dimensionalen Spaltenvektor in einer $2^1 \times 2^1$ -dimensionalen Matrix \hat{C} erfolgt.

```

1 def average_entanglement_vary_ratio():
2     # Verschraenkungsentropie bei unterschiedliche Gewichtung
3     # der Terme up-up und down-down
4     S = []
5     # Setze Schrittgroesse fuer die Variation
6     steps = [i/100 for i in range(0,101)]
7     for i in steps:
8         # Zustand erstellen und normieren
9         factors = np.array([i, 0, 0, 1-i])
10        factors = 1/np.linalg.norm(factors) * factors
11        # C-Matrix erstellen
12        C = np.reshape(factors, (2,2))
13        # Verschraenkungsentropie berechnen und abspeichern
14        S.append(entanglementEntropy(C))
15    return S

```

A.3 Variation von Subsystemgrößen

In Kapitel 3.5 wird die Verschänkungsentropie bei Aufteilung des Systems in unterschiedlich große Subsysteme untersucht. Der dazugehörige Code ist hier zu finden.

Ein zufälliger Zustand wird in Z.6 erstellt, dabei liefert np.random.rand() zufällige Koeffizienten im Intervall $[0;1]$. Von diesen Koeffizienten wird jeweils 0.5 abgezogen, um gleichmäßig positive und negative Koeffizient zu erhalten. Der zweite Summand wird mit der imaginären Zahl “1j“ multipliziert, um auch komplexe Koeffizienten zu erhalten.

Wie in Appendix A.2 geht \hat{C} durch np.reshape() in Z.11 aus dem Zustand factors hervor. Hervorstechend ist hier, dass \hat{C} nicht immer eine quadratische Matrix ist, sondern sich nach den Dimensionen der Subsysteme 2^{cutoff} bzw. $2^{L-cutoff}$ richtet.

Außerdem ist wichtig zu beachten, dass diese Methode nur für $\text{reps}=1$ die exakte Verschränkungsentropien des zufälligen Zustands zurück gibt, bei einer größeren Anzahl an Wiederholungen lediglich einen Durchschnittswert.

```

1 def average_entanglement_vary_cutoff(dim, reps):
2     # berechnet durchschnittliche Verschraenkungsentropie S von
3     # reps zufaelligen Zustaenden der Dimenstion dim bei
4     # Aufteilung der Subsysteme an verschiedenen Stellen
5     S = np.zeros(dim-1)
6     for i in range(reps):
7         # erstellt und normiert zufaelligen Zustand
8         factors = (np.random.rand(2**dim)-0.5) + 1j * (np.
9         random.rand(2**dim)-0.5)
10        factors = 1/np.linalg.norm(factors) * factors
11
12        for cutoff in range(1,dim):
13            # erstellt C-Matrix
14            C = np.reshape(factors, (2**cutoff, 2**(dim-cutoff)))
15            # berechnet Verschraenkungsnetropie
16            S_cutoff = entanglementEntropy(C)
17            S[cutoff-1] += S_cutoff
18
19        # gibt Liste der Durchschnitte bei verschiedenen
20        # Auftrennungen (i-te Stelle = Auftrennung nach i+1-tem
21        # Freiheitsgrad) zur ck
22    return S/reps

```

A.4 Grundzustände bestimmen

Der Code zur Bestimmung der Grundzustände ist umfangreicher als die der vorherigen Beispiele. Zunächst wird der Ising Hamiltonian in Z.3 durch die Funktion `calc_Hi_transversefield()` berechnet, in der darauf folgenden Zeile seine Eigenwerte und Eigenzustände bestimmt. Diese sind aufsteigend sortiert, die minimalen Eigenwerte und dazugehörigen Grundzustände stehen also an erster bzw. an den ersten Stellen in `evals` und `evecs`. Somit steht an der ersten Stelle der Variablen immer ein Grundzustand.

Die Berechnung des Ising Hamiltonians findet in `calc_Hi_transversefield()` ab Z.8 nach der Definition (2.3) statt.

Die Funktionen `kron_pauli_x()` sowie `kron_pauli_z` funktionieren nach dem selben Prinzip und implementieren (4.5) bzw. (4.6). Sie basieren jeweils auf einer Liste `identity = kron_identity()`, in welcher an i -ter Stelle das Produkt aus $i+1$ Identitätsmatrizen steht (vgl. Z.39ff).

Die Kronecker-Multiplikation der Identitätsmatrizen wird in eine eigene Funktion verlagert, da dort die Multiplikation rekursiv geschieht (Z.42-Z.47), was die Effektivität deutlich erhöht. Besonders für größere Systeme steigt die Rechenzeit sonst rapide an, wenn die Multiplikationen in jedem Summanden neu durchgeführt werden müssen.

In einem weiter optimierten Fall würde `kron_identity()` nur einfach in `calc_Hi_transversefield()` aufgerufen werden, damit es nicht doppelt in `kron_pauli_x()` und `kron_pauli_z()` ausgeführt werden muss, jedoch waren die in dieser Arbeit betrachteten Systeme klein genug, sodass der zusätzliche Rechenaufwand nicht allzu stark ins Gewicht viel.

```

1 def Hi_eigen_transversefield(J,g,L):
2     # Berechnet Eigenwerte und Eigenzustaende des Transversfeld
   Ising Hamiltonians H
3     H = calc_Hi_transversefield(J,g,L)
4     evals, evecs = np.linalg.eigh(H)
5     return (evals, evecs)
6
7
8 def calc_Hi_transversefield(J,g,L):
9     # berechnet 2^L-dimensionalen Ising Hamiltonian
10    H = -J * np.sum(kron_pauli_x(L),0) + g * np.sum(
   kron_pauli_z(L),0)
11    return H
12
13
14 def kron_pauli_x(L):
15    # berechnet das Kroneckerprodukt s_i^x * s_(i+1)^x, an der
   j-ten Stelle der Liste result steht das Ergebnis fuer i=j
16    identity = kron_identity(L)
17    result = []
18    for i in range(L-1):
19        # alle Multiplikationen vor i. Stelle, und
   Multiplikation der Pauli-Matrizen
20        s = np.kron(np.kron(identity[i],pauli_x),pauli_x)
21        # alle Multiplikationen nach i. Stelle
22        s = np.kron(s, identity[L-i-2])
23        # in Liste abspeichern
24        result.append(s)
25    return result
26
27
28 def kron_pauli_z(L):

```

```

29     # berechnet das Kroneckerprodukt aus L-1
    Identitätsmatrizen und einer pauli_z Matrix an der i-ten
    Stelle
30     l = kron_identity(L)
31     res = []
32     for i in range(L):
33         s = np.kron(l[i], pauli_z)
34         s = np.kron(s, l[L-i-1])
35         res.append(s)
36     return res
37
38
39 def kron_identity(L):
40     # berechnet das Kroneckerprodukt aus Identitätsmatrizen,
    in der Ergebnisliste result steht an der i-ten Stelle das
    Kroneckerprodukt aus i+1 Identitätsmatrizen
41     result = [np.array(1)]
42     for i in range(L):
43         s = identity
44         # das Kroneckerprodukt aus i+1 Identitätsmatrizen
45         for j in range(i):
46             s = np.kron(s, identity)
47         result.append(s)
48     return result

```

A.5 Singulärwerte von Grundzuständen

Um die Singulärwerte der Grundzustände zu ermitteln, ermitteln wir zunächst die Grundzustände des Ising Hamiltonians durch die im vorherigen Appendix-Kapitel A.4 erklärte Funktion, und erschließen dann analog zu Appendix A.1 \hat{C} und Singulärwerte.

Wie in Appendix A.4 angeschnitten betrachten wir nur die erste Spalte $[,0]$ der aus `Hi_eigen_transversefield()` zurückgegebenen Eigenwerte, da diese aufgrund der aufsteigenden Sortierung der Eigenwerte garantiert ein Grundzustand ist.

```

1 def groundstate_singular_values(L):
2     # berechnet Singulärwerte eines Grundzustands des Ising
    Hamiltonian
3     # Eigenwerte und Eigenzustände sind aufsteigend sortiert,
    deshalb liegen Grundzustände mit minimaler Energie bei
   [:,0]
4     ground = Hi_eigen_transversefield(1,0,L)[1][:,0]

```

```
5     C_ground = np.reshape(ground, (2**int(np.ceil(L/2)), 2**int(np.floor(L/2))))
6     # Singulaerwerte berechnen
7     _, singularvalue_ground, _ = np.linalg.svd(C_ground)
8     return singularvalue_ground
```

A.6 Verschränkungsentropie von Grundzuständen

Das Verfahren zur Berechnung der Verschränkungsentropie eines Grundzustandes ist durch die bisher geschriebenen Funktionen sehr einfach.

Zunächst wird mit dem Code aus Appendix A.4 ein Grundzustand ermittelt, aus welchem dann in Z.5 \hat{C} hervorgehen kann. Anschließend kann mit der Funktion `entanglementEntropy()` aus Appendix A.1 die Verschränkungsentropie berechnet werden.

```
1 def groundstate_entanglement_entropy(L):
2     # berechnet Verschränkungsentropie eines Grundzustands des
3     # Ising Hamiltonian
4     # Eigenwerte und Eigenzustände sind aufsteigend sortiert,
5     # deshalb liegen Grundzustände mit minimaler Energie bei
6     #[:,0]
7     ground = Hi_eigen_transversefield(1, 0, L)[1][:, 0]
8     C_ground = np.reshape(ground, (2**int(np.ceil(L/2)), 2**int(np.floor(L/2))))
9     return entanglementEntropy(C_ground)
```

Anhang B

Basistransformationen

In diesem Abschnitt führen wir die Verfahren durch, welche nötig sind um die Grundzustände aus 4.4 aus einer z -Basis in eine x -Basis umzuwandeln.

B.1 Eigenwerte und Eigenzustände der Pauli-Matrizen

Die Pauli-Matrizen sind jene Operatoren, deren Eigenzustände genau die Spins entlang der jeweiligen Achse sind. Eine Einführung in die Pauli-Matrizen finden in Kapitel 2.4 statt.

In diesem Kapitel wollen wir ihre Eigenzustände und Eigenwerte bestimmen.

B.1.1 Pauli- x -Matrix

Zuerst bestimmen wir die Eigenvektoren und Eigenwerte der Pauli- x -Matrix

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

siehe auch (2.15) für die Definition von σ^x .

Dabei halten wir uns an die gängigen Verfahren zur Eigenwerts bzw. Eigenvektorbestimmung, wie zum Beispiel in [22] erläutert.

Zunächst widmen wir uns den Eigenwerten. Diese sind die Nullstellen des charakteristischen Polynoms $\chi(X)$ [22], wir berechnen es als

$$\chi(X) = \det(\sigma^x - X\mathbb{I}) = \det\left(\begin{pmatrix} -X & 1 \\ 1 & -X \end{pmatrix}\right) = X^2 - 1. \quad (\text{B.2})$$

Die Nullstellen des charakteristischen Polynoms (B.2), und somit die Eigenwerte, sind offensichtlich $E_{1,2} = \pm 1$.

Durch gesonderte Betrachtungen der beiden Eigenwerte, oder wenn wir es durch die Linse der Schrödingergleichung (4.7) betrachten die Energien, liefert uns die Eigenzustände von σ^x .

Dafür müssen wir das lineare Gleichungssystem

$$\sigma^x |\psi\rangle = E_i |\psi\rangle \Leftrightarrow (\sigma^x - E_i \mathbb{I}) |\psi\rangle = 0 \quad (\text{B.3})$$

lösen.

Eigenzustand für $E_1 = 1$

Einsetzen von $E_1 = 1$ in (B.3) ergibt

$$\left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right) |\psi\rangle = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} |\psi\rangle = 0. \quad (\text{B.4})$$

Wir können die erste Zeile des Gleichungssystems umformen als

$$\begin{aligned} -\psi_1 + \psi_2 &= 0 \\ \psi_2 &= \psi_1, \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

und sehen somit, dass es sich bei $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ um einen Eigenvektor handelt. Damit dieser ein Zustand des Hilbertraums wird, muss es normiert werden:

$$|x_1\rangle = \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.6})$$

Eigenzustand für $E_2 = -1$

Für $E_2 = -1$ können wir analog zum vorherigen Fall vorgehen.

Durch Einsetzen des Eigenwerts in (B.3) erhalten wir das Gleichungssystem

$$\left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) |\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} |\psi\rangle = 0. \quad (\text{B.7})$$

Wieder betrachten wir die erste Zeile und erhalten

$$\begin{aligned} \psi_1 + \psi_2 &= 0 \\ \psi_2 &= -\psi_1. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Wir erkennen leicht, dass folglich $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ ein Eigenvektor ist, und nach Normierung finden wir den Eigenzustand

$$|x_2\rangle = \frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle} |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.9})$$

B.1.2 Pauli- z -Matrix

Die Eigenzustände des Spin-Operators

$$\sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.10})$$

(vergleiche (2.15)) können analog zur denen von σ^x in Appendix B.1.1 bestimmt werden. Sie lauten

$$|z_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ und} \quad (\text{B.11})$$

$$|z_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.12})$$

B.2 Basisvektoren für 2²-dimensionale Systeme

Wir haben nun also die Eigenzustände $|x_1\rangle, |x_2\rangle$ bzw. $|z_1\rangle, |z_2\rangle$ der Spin-Operatoren σ^x bzw. σ^z gefunden. Bei ihnen handelt es sich um jene Zustände, welche bei einer Messung des Spins entlang der x - bzw. z -Achse festgestellt werden können.

Hier möchte ich gerne zeigen, dass es sich bei den Eigenzuständen in diesem Fall außerdem jeweils um eine Orthonormalbasis handelt.

Bei beiden Vektormengen handelt es sich offensichtlich um Basen, da sie linear unabhängig sind und ihre Anzahl 2 der Dimension des Hilbertraums $\dim(H) = 2^1$ entspricht.

Sie stehen außerdem jeweils orthogonal zueinander, wie wir leicht durch Nachrechnen mit dem Skalarprodukt verifizieren können:

$$\begin{aligned} \langle x_1|x_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = 0, \\ \langle z_1|z_2\rangle &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Es handelt sich also um eine Orthonormalbasis. Da alle Vektoren außerdem normiert sind, sind $|x_1\rangle, |x_2\rangle$ bzw. $|z_1\rangle, |z_2\rangle$ Orthonormalbasen [22].

Um aus diesen Basisvektoren nun Basen für 2^2 -dimensionale Systeme zu konstruieren, welche den Spinzustand von zwei Teilchen beschreiben, bilden wir das Kronecker-Produkt (vergleiche auch (2.5)).

Somit ergeben sich für die x -Basis die Basisvektoren

$$\begin{aligned}
 |Z_1\rangle = |z_1\rangle \otimes |z_1\rangle &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, & |Z_2\rangle = |z_1\rangle \otimes |z_2\rangle &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \\
 |Z_3\rangle = |z_2\rangle \otimes |z_1\rangle &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, & |Z_4\rangle = |z_2\rangle \otimes |z_2\rangle &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{B.14}$$

Bei ihnen handelt es sich ebenfalls um eine Orthonormalbasis, dies kann leicht nachgerechnet werden.

Die 2^2 -dimensionalen y -Basisvektoren sind in (2.8) gegeben.

B.3 Durchführung ausgewählter Basistransformationen

Jetzt, da wir zwei Orthonormalbasen hergeleitet und definiert haben, können wir uns Basistransformationen zuwenden.

B.3.1 Basistransformationsmatrix

Zuerst berechnen wir die Basistransformationsmatrix T_x^z [23] von der x -Basis in die z -Basis.

Dafür stellen wir die Vektoren der ursprünglichen Basis (in unserem Fall $|Z_1\rangle, \dots, |Z_4\rangle$), durch die Vektoren der Basis, zu welcher hin wir transformieren wollen (hier $|X_1\rangle, \dots, |X_4\rangle$), dar [23]:

$$\begin{aligned}
|Z_1\rangle &= \frac{1}{2}|X_1\rangle + \frac{1}{2}|X_2\rangle + \frac{1}{2}|X_3\rangle + \frac{1}{2}|X_4\rangle \\
|Z_2\rangle &= \frac{1}{2}|X_1\rangle - \frac{1}{2}|X_2\rangle + \frac{1}{2}|X_3\rangle - \frac{1}{2}|X_4\rangle \\
|Z_3\rangle &= \frac{1}{2}|X_1\rangle + \frac{1}{2}|X_2\rangle - \frac{1}{2}|X_3\rangle - \frac{1}{2}|X_4\rangle \\
|Z_4\rangle &= \frac{1}{2}|X_1\rangle - \frac{1}{2}|X_2\rangle - \frac{1}{2}|X_3\rangle + \frac{1}{2}|X_4\rangle
\end{aligned} \tag{B.15}$$

Die Koeffizienten beim Basisübergang ordnen wir nun als Spalten einer Matrix an, der sogenannten Basistransformationsmatrix, an [23]:

$$T_z^x = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \tag{B.16}$$

Diese Matrix hilft uns nun bei der Basistransformation: Durch Multiplikation mit dem Zustand in der alten Basis, erhalten wir die Darstellung des Vektors in der neuen Basis [22, 23].

B.3.2 Basistransformation ausgewählter Grundzustände des Ising Hamiltonians

Für die Grundzustände aus Kapitel 4.4 i) und ii) führen wir diese Basistransformation nun durch. Dafür wird jeweils der Grundzustand in der z -Basis mit der Transformationsmatrix T_z^x (B.16) multipliziert.

Basistransformation für i) $J = 1, g = 0$

$$\begin{aligned}
|g_1\rangle &= -\frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_z = -\frac{\sqrt{2}}{2} T_z^x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_z = -\frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_x \\
&= -\frac{\sqrt{2}}{2} (|X_1\rangle + |X_4\rangle) \equiv -\frac{\sqrt{2}}{2} (|\rightarrow\rightarrow\rangle + |\leftarrow\leftarrow\rangle), \\
|g_2\rangle &= -\frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_z = -\frac{\sqrt{2}}{2} T_z^x \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_z = -\frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}_x \\
&= -\frac{\sqrt{2}}{2} (|X_1\rangle - |X_4\rangle) \equiv -\frac{\sqrt{2}}{2} (|\rightarrow\rightarrow\rangle - |\leftarrow\leftarrow\rangle).
\end{aligned} \tag{B.17}$$

Basistransformation für ii) $J = -1, g = 0$

$$\begin{aligned}
 |g_1\rangle &= -\frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_Z = -\frac{\sqrt{2}}{2} T_z^x \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_Z = -\frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_X \\
 &= -\frac{\sqrt{2}}{2} (|X_2\rangle + |X_3\rangle) \equiv -\frac{\sqrt{2}}{2} (|\rightarrow\leftarrow\rangle + |\leftarrow\rightarrow\rangle), \\
 |g_2\rangle &= \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_Z = \frac{\sqrt{2}}{2} T_z^x \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_Z = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}_X \\
 &= \frac{\sqrt{2}}{2} (-|X_2\rangle - |X_3\rangle) \equiv \frac{\sqrt{2}}{2} (-|\rightarrow\leftarrow\rangle - |\leftarrow\rightarrow\rangle).
 \end{aligned} \tag{B.18}$$

Literaturverzeichnis

- [1] D. N. Page, “Average entropy of a subsystem,” *Physical Review Letters*, vol. 71, p. 1291–1294, Aug. 1993.
- [2] S. Iblisdir, R. Orús, and J. I. Latorre, “Matrix product states algorithms and continuous systems,” *Physical Review B*, vol. 75, Mar. 2007.
- [3] A. Haller, *Matrix Product States, A Variational Approach to Strongly Correlated Systems*. PhD thesis, Condensed Matter Theory - KOMET337 Institute of Physics, 2014.
- [4] S. Adler, “Where is quantum theory headed?,” *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 504, 01 2014.
- [5] J. Townsend, *A Modern Approach to Quantum Mechanics* -. Sausalito, California: University Science Books, 2012.
- [6] H. G. Evertz and W. Von der Linden, “Quantenmechanik,” Apr 2017.
- [7] B. Wang, F. Hu, H. Yao, and C. Wang, “Prime factorization algorithm based on parameter optimization of ising model,” *Scientific Reports*, vol. 10, no. 1, 2020.
- [8] E. Lieb, “Topics in quantum entropy and entanglement,” 2014.
- [9] T. Hartman, “Introduction to entanglement entropy,” 2015.
- [10] L. van Hove, “Von neumann’s contributions to quantum theory,” *Bulletin of the American Mathematical Society*, vol. 64, no. 3, p. 95–99, 1958.
- [11] M. Wilkens, “Theoretische physik iii – quantenmechanik i,handout hilbert,” 2006.
- [12] D. Cherney, T. Denton, R. Thomas, and A. Waldron, “Orthonormal bases,” 2009.
- [13] C. Löbhard, “2 vektorraum, basis und dimension,” 2016.
- [14] V. Sechovský, “Magnetism in solids: General introduction,” in *Encyclopedia of Materials: Science and Technology* (K. J. Buschow, R. W. Cahn, M. C. Flemings, B. Ilshner, E. J. Kramer, S. Mahajan, and P. Veyssièrè, eds.), pp. 5018–5032, Oxford: Elsevier, 2001.

- [15] R. Gross, *Festkörperphysik*. De Gruyter Oldenbourg, 2023.
- [16] X. Wu, D. Li, and Z. Dai, “Math 505 project : Ising model – phase transition,” 2014.
- [17] F. Ettliger, “4 determinanten, eigenwerte, diagonalisierung, jordansche normalform,” 2011.
- [18] D. Perez-Garcia, F. Verstraete, M. M. Wolf, and J. I. Cirac, “Matrix product state representations,” 2007.
- [19] K. S. Rai, J. I. Cirac, and Álvaro M. Alhambra, “Matrix product state approximations to quantum states of low energy variance,” 2023.
- [20] J. Eisert, M. Cramer, and M. B. Plenio, “Colloquium: Area laws for the entanglement entropy,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 82, p. 277–306, Feb. 2010.
- [21] E. Ellis-Monaghan, “Phase transitions in the ising model,” *Rose Hulman Undergraduate Mathematics Journal*, 2010.
- [22] T. Netzer, *Lineare Algebra*. Universität Innsbruck, Institut für Mathematik.
- [23] K. E. Smith, “Math 217: Summary of change of basis and all that...,” nd.