



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΔΠΜΣ “ΜΙΚΡΟΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΚΑΙ ΝΑΝΟΔΙΑΤΑΞΕΙΣ”

Μεταπτυχιακή Εργασία

**Εντροπία εναγκαλισμού και καταστάσεις τάξεως σε συστήματα
ισχυρά συσχετιζόμενων ηλεκτρονίων**

Κίμων Μωράτης

Επιβλέπων

Αν. Καθηγητής Γεώργιος Βαρελογιάννης

Αθήνα, Φεβρουάριος 2013

Ευχαριστώ θερμά, τον καθηγητή μου κ. Γεώργιο Βαρελογιάννη για το ενδιαφέρον και την καθοδήγησή που μου προσέφερε αφειδώς σε όλη την διάρκεια της προσπάθειάς μου. Χωρίς την αμέριστη υποστήριξή του η ολοκλήρωση της παρούσας εργασίας θα ήταν ανέφικτη.

**Κ.Μωράτης
Φεβρουάριος 2013**

Περίληψη

Επίκεντρο της παρούσας εργασίας είναι η εντροπία εναγκαλισμού σαν μέγεθος προς την ποσοτικοποίηση του. Στο πρώτο κεφάλαιο γίνεται μία αναφορά γύρω από τον ορισμό του εναγκαλισμού, ενώ αποσαφηνίζονται οι έννοιες των καθαρών καταστάσεων και των στατιστικών μειγμάτων.

Ακολουθεί εκτενής περιγραφή της εντροπίας εναγκαλισμού και παρατίθενται διάφορα παραδείγματα για φερμιόνια και μποζόνια σε μία διάσταση. Η μελέτη της εντροπίας επεκτείνεται και σε συστήματα περισσότερων διαστάσεων, ενώ γίνεται και μία αναφορά στην τοπολογική εντροπία εναγκαλισμού. Τέλος εξετάζονται συνοπτικά και κάποιες περιπτώσεις κλασσικών συστημάτων.

Εν συνεχεία αναλύεται η έννοια της συμφωνίας (concurrency) και ο ρόλος της σαν μέτρο του εναγκαλισμού, στα πλαίσια του εναγκαλισμού σχηματισμού (entanglement of formation). Σαν παράδειγμα για την συμφωνία παρουσιάζεται μία εργασία κατά την οποία γίνεται η μέτρησή της σε μία κατάσταση BCS και η προσέγγισή της στο συνεχές όριο.

Ακολουθώς παρατίθενται οι μέθοδοι μέσω των οποίων εξάγονται οι σχέσεις των εντροπιών Renyi και von Neumann. Στο ίδιο κεφάλαιο περιγράφονται και οι συσχετισμοί της στατιστικής φορτίου με την εντροπία εναγκαλισμού

Στην συνέχεια γίνεται ο διαχωρισμός μεταξύ των χωρικών και των σωματιδιακών καταμερισμών για την μέτρηση του εναγκαλισμού. Παρουσιάζεται ένα αναλυτικό παράδειγμα για την εξαγωγή της μήτρας πυκνότητας σε αυτές τις δύο περιπτώσεις και τονίζονται οι διαφορές τους.

Τα τελευταία κεφάλαια της θεωρίας παρουσιάζουν τον τρόπο εξαγωγής των ανηγμένων μητρών πυκνότητας από τις συναρτήσεις συσχετισμού και την δυναμική του εναγκαλισμού. Πιο συγκεκριμένα, στο τελευταίο κεφάλαιο της θεωρίας γίνεται η μελέτη της διάδοσης, της εξέλιξης και της δημιουργίας του εναγκαλισμού.

Τέλος παρατίθενται τα αποτελέσματα για την μέτρηση της εντροπίας von Neumann μέσω ενός προγράμματος που αναπτύχθηκε στα πλαίσια της εργασίας, για μία κατάσταση ροής, μία χειρόμορφη κατάσταση και μία τροποποιημένη εκδοχή της κατάστασης ροής στην οποία εισάγεται και ένας συντελεστής ο οποίος μεταβάλλεται σε συνάρτηση με την σχετική θέση του σημείου στο πλέγμα.

Abstract

The present work focuses on entanglement entropy as a measure of entanglement. In the first chapter we refer to the definition of entanglement and we clarify the concept of pure and mixed states.

Thereafter, an extensive description of the entanglement entropy follows and several examples concerning fermions and bosons in one dimension are given herewith. The entropy study is also expanding in systems of higher dimensions, while a reference to the topological entanglement entropy is made. Last a few cases of classical systems are briefly examined.

The concurrence and its role as a measure of entanglement are seen thoroughly in the framework of entanglement of formation. As an example of concurrence a related paper is presented according to which the concurrence measurement and its approach to the continuum limit is being held for a BCS state.

I forward afterwards the methods through which the relations of Renyi and von Neumann entropies are extracted. In the same chapter the correlations of charge statistics and entanglement entropy are described.

The distinction between spatial and particle partitioning for the entanglement measure is following. There is presented a detailed example for the calculation of the reduced density matrix in the aforementioned cases and their differences are stressed.

The last chapters of the theoretical basis present the way of extraction of the reduced density matrices through correlation functions and the entanglement dynamics. More specifically, during the last theory chapter, the study of propagation, evolution and formation of entanglement is being held.

Last, I forward the results concerning measurement of von Neumann entropy through a program developed in the contexts of the project for a flux state, a chiral state and a modified version of the flux state, where a coefficient which varies according to the relative position of a point of the grid is introduced.

Περιεχόμενα

| | |
|---|----|
| 1. Εισαγωγή στον εναγκαλισμό..... | 1 |
| 1.1 Οι εναγκαλισμένες καταστάσεις..... | 1 |
| 1.1.1 Καθαρές καταστάσεις..... | 1 |
| 1.1.2 Στατιστικά μείγματα..... | 2 |
| 1.2 Κριτήρια διαχωρισιμότητας..... | 3 |
| 1.2.1 Καθαρές καταστάσεις..... | 3 |
| 1.2.2 Στατιστικά μείγματα..... | 5 |
| 2. Η εντροπία εναγκαλισμού..... | 10 |
| 2.1 Συστήματα μίας διάστασης..... | 11 |
| 2.1.1 Μποζονικές αρμονικές αλυσίδες..... | 12 |
| 2.1.2 Φερμιονικές αλυσίδες και το μοντέλο XY..... | 14 |
| 2.1.3 Γενικές περιπτώσεις τοπικών χασματικών μοντέλων spin..... | 17 |
| 2.1.4 Αποτελέσματα από την θεωρία σύμμορφου πεδίου..... | 17 |
| 2.1.5 Καταστάσεις γινομένου πινάκων..... | 18 |
| 2.1.6 Εναγκαλισμός μονού-αντιγράφου..... | 20 |
| 2.2 Κανόνες επιφάνειας σε συστήματα υψηλότερων διαστάσεων..... | 20 |
| 2.2.1 Συνθήκες για έναν κανόνα επιφάνειας σε σχεδόν ελεύθερα μποζονικά και φερμιονικά μοντέλα..... | 21 |
| 2.2.2 Λογαριθμικές διορθώσεις σε κανόνες επιφάνειας για τα κρίσιμα φερμιόνια..... | 22 |
| 2.2.3 Διαφορές μεταξύ των κρίσιμων φερμιονίων και μποζονίων: Ημιχώροι..... | 22 |
| 2.2.4 Ο εναγκαλισμός σε θερμικές καταστάσεις μποζονίων..... | 23 |
| 2.2.5 Καταστάσεις που ικανοποιούν κανόνες επιφάνειας εκ κατασκευής: Καταστάσεις προβαλλόμενων εναγκαλισμένων ζευγών, καταστάσεις που παριστάνονται με γραφήματα και η επανακανονικοποίηση του εναγκαλισμού..... | 24 |
| 2.2.6 Η τοπολογική εντροπία εναγκαλισμού..... | 25 |
| 2.3 Κανόνες επιφάνειας για κλασσικά συστήματα..... | 26 |
| 2.3.1 Κλασσικά αρμονικά συστήματα..... | 26 |
| 2.3.2 Κλασσικοί συσχετισμοί σε κβαντικά μοντέλα spin..... | 27 |
| 3. Η συμφωνία (concurrency) και η μέτρηση του εναγκαλισμού..... | 29 |
| 3.1 Στατιστικά μείγματα..... | 29 |
| 3.1.1 Αρνητικότητα..... | 29 |
| 3.1.2 Κυρτοί Φραγμοί (Convex Roofs)..... | 30 |
| 3.1.3 Η Συμφωνία των Στατιστικών Μειγμάτων..... | 31 |
| 3.1.4 Ο Εναγκαλισμός Σχηματισμού των Στατιστικών Μειγμάτων..... | 33 |
| 4. Εναγκαλισμός και συμφωνία σε καταστάσεις BCS..... | 35 |
| 5. Ακριβείς συσχετισμοί μεταξύ της στατιστικής φορτίου και των εντροπιών εναγκαλισμού..... | 41 |

| | |
|--|----|
| 5.1 Εξαγωγή των σχέσεων..... | 43 |
| 5.2 Οι εντροπίες Renyi και το φάσμα του εναγκαλισμού..... | 46 |
| 6. Εναγκαλισμός μεταξύ καταμερισμών σωματιδίων σε καταστάσεις πολλών σωματιδίων..... | 49 |
| 6.1 Ένα βασικό παράδειγμα..... | 49 |
| 6.2 Γενικές θεωρήσεις..... | 50 |
| 6.2.1 Σύνορα..... | 50 |
| 6.2.2 Η κανονική μορφή των φερμιονίων..... | 50 |
| 6.2.3 Η ειδική περίπτωση του μακροσκοπικού εκφυλισμού..... | 51 |
| 6.2.4 Σχέσεις με τις συναρτήσεις συσχετισμού..... | 52 |
| 6.3 Φερμιονικά συστήματα: αντισυμμετρικότητα και συσχετισμοί..... | 52 |
| 6.3.1 Φερμιόνια χωρίς spin σε μία διάσταση..... | 52 |
| 6.4 Οι καταστάσεις του κλασματικού κβαντικού φαινομένου Hall..... | 54 |
| 6.4.1 Ανηγμένες τάξεις και τα ανώτερα όρια του εναγκαλισμού σε συστήματα φερμιονίων..... | 56 |
| 6.4.2 Οι ανηγμένες μήτρες πυκνότητας και οι συναρτήσεις συσχετισμού..... | 59 |
| 6.5 Το μοντέλο Calogero-Sutherland..... | 59 |
| 7. Υπολογισμός των ανηγμένων μητρών πυκνότητας από τις συναρτήσεις συσχετισμού..... | 61 |
| 8. Η δυναμική του εναγκαλισμού..... | 65 |
| 8.1 Η διάδοση του εναγκαλισμού..... | 65 |
| 8.1.1 Εναγκαλισμός κατά ζεύγη..... | 65 |
| 8.1.2 Η δυναμική της εντροπίας block..... | 70 |
| 8.1.3 Η δυναμική του χάους και ο εναγκαλισμός..... | 71 |
| 8.2 Η δημιουργία του εναγκαλισμού..... | 72 |
| 8.3 Η εξαγωγή του εναγκαλισμού..... | 73 |
| 8.4 Η δυναμική εξέλιξη του εναγκαλισμού σε Γκαουσιανές καταστάσεις..... | 73 |
| 9. Υπολογισμός της εντροπίας von Neumann χωρικών καταμερισμών σε καταστάσεις γραμμένες στην βάση των θέσεων..... | 76 |
| 9.1 Η μέτρηση της εντροπίας von Neumann σε μία κατάσταση ροής (flux state)..... | 77 |
| 9.2 Η μέτρηση της εντροπίας von Neumann σε μία χειρόμορφη κατάσταση (chiral state)..... | 83 |
| 9.3 Η μέτρηση της εντροπίας von Neumann σε μία τροποποιημένη εκδοχή της κατάστασης ροής..... | 89 |
| 9.4 Συμπεράσματα..... | 94 |

| | |
|--|-----|
| Παράρτημα Α: | |
| Ο κώδικας του προγράμματος για τον υπολογισμό της εντροπίας von Neumann..... | 95 |
| Βιβλιογραφία..... | 100 |

1. Εισαγωγή στον εναγκαλισμό

Τα κβαντικά συστήματα εμφανίζουν ιδιότητες οι οποίες δεν συναντώνται στα κλασικά, όπως για παράδειγμα η υπέρθεση των κβαντικών καταστάσεων και το φαινόμενο σήραγγας. Τα φαινόμενα που αναφέρθηκαν πιο πριν παρατηρούνται σε κβαντικά συστήματα ενός σωματιδίου και δεν αποτελούν τις μόνες διαφορές μεταξύ των κλασικών και των κβαντικών αντικειμένων. Υπάρχουν πολύ σημαντικές διαφοροποιήσεις και στα σύνθετα κβαντικά συστήματα -αυτά που αποτελούνται δηλαδή από δύο ή και παραπάνω υποσυστήματα. Ένα βασικό στοιχείο για την διαφοροποίηση μεταξύ των κλασικών και των κβαντικών συστημάτων, είναι το γεγονός ότι τα πρώτα σε αντίθεση με τα άλλα, μπορούν να περιγραφούν μέσω των κλασικών πιθανοτήτων. Αυτοί οι μη κλασικοί συσχετισμοί οδηγούν σε παράδοξα, όπως το σενάριο EPR (Einstein, Podolsky, Rosen), μέσω των οποίων φαίνεται ότι υπάρχει μία απομακρυσμένη δράση στην κβαντική μηχανική.

Οι καταστάσεις που παρουσιάζουν τέτοιους μη κλασικούς συσχετισμούς ονομάζονται εναγκαλισμένες, ενώ παρουσιάζει εξαιρετικό ενδιαφέρον η φύση τους και η μελέτη των μεγεθών που ποσοτικοποιούν τους εν λόγω συσχετισμούς.

1.1 Οι εναγκαλισμένες καταστάσεις

Ως σύνθετα κβαντικά συστήματα ορίζονται αυτά τα οποία μπορούν να διασπαστούν σε δύο ή περισσότερα υποσυστήματα, όπου το κάθε ένα από αυτά θα είναι ένα ολοκληρωμένο κβαντικό σύστημα. Συνήθως τα μεμονωμένα συστήματα χαρακτηρίζονται από την μεταξύ τους απόσταση η οποία πρέπει να είναι μεγαλύτερη από το μέγεθος τους. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι μία δέσμη ιόντων, της οποίας το κάθε σωματίδιο είναι ένα υποσύστημα, ενώ η δέσμη είναι το σύνθετο σύστημα που προκύπτει από αυτά. Επίσημως ο χώρος Hilbert H ο οποίος συνδέεται με ένα σύνθετο σύστημα, δίνεται από το τανυστικό γινόμενο $H = H_1 \otimes \dots \otimes H_N$ των χώρων που αντιστοιχούν σε κάθε υποσύστημα. Στις επόμενες ενότητες θα επικεντρωθούμε σε σύνθετα συστήματα που αποτελούνται από δύο διαφορετικά υποσυστήματα των οποίων ο χώρος Hilbert είναι

$$H = H_1 \otimes H_2.$$

1.1.1 Καθαρές Καταστάσεις

Θεωρούμε ότι το κάθε ένα υποσύστημα προετοιμάζεται σε μία καθαρή κατάσταση

$|\psi_i\rangle$ ($i=1,2$). Η κατάσταση του σύνθετου συστήματος $|\Psi_s\rangle$ θα δίνεται από το γινόμενο

$$|\Psi_s\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle. \quad (1.1)$$

Σε αυτό το σημείο θα κάνουμε την υπόθεση ότι κάποιος μπορεί να κάνει μετρήσεις μόνο τοπικά στο σύστημα, δηλαδή θα έχει πρόσβαση μόνο σε ένα από τα δύο υποσυστήματα κάθε φορά. Αρχικά πραγματοποιείται η μέτρηση μίας παρατηρήσιμης ποσότητας $a \otimes \mathbf{1}$, όπου a ένας ερμιτιανός τελεστής που δρα στον H_1 και $\mathbf{1}$ ο ταυτοτικός τελεστής που δρα στον H_2 . Μόλις ολοκληρωθεί η μέτρηση παρατηρούμε ότι η κατάσταση του πρώτου υποσυστήματος θα προβληθεί σε μία ιδιοκατάσταση του a , ενώ η κατάσταση του δεύτερου υποσυστήματος παραμένει αναλλοίωτη. Αν αργότερα πραγματοποιηθεί εκ νέου μία μέτρηση στο δεύτερο υποσύστημα, τότε τα αποτελέσματα που θα προκύψουν θα είναι ανεξάρτητα από αυτά της πρώτης μέτρησης. Ως εκ τούτου τα αποτελέσματα μιας μέτρησης σε διαφορετικά υποσυστήματα δεν συσχετίζονται μεταξύ τους και εξαρτώνται μόνο από τις καταστάσεις καθενός συστήματος.

Γενικά, μία καθαρή κατάσταση στον χώρο H μπορεί να περιγραφεί μέσω της υπέρθεσης καθαρών καταστάσεων όπως η (1.1), για παράδειγμα,

$$|\Psi_e\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle + |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle), \quad (1.2)$$

όπου $|\psi_i\rangle \neq |\phi_i\rangle (i=1,2)$. Έχει πολύ ενδιαφέρον να εξετάσουμε ποια θα είναι η μορφή της $|\Psi_e\rangle$ στην περίπτωση όπου κάποιος έχει πρόσβαση μόνο σε ένα από τα δύο υποσυστήματα. Η μέση τιμή ενός τοπικού τελεστή $a \otimes \mathbf{1}$ στο πρώτο υποσύστημα είναι

$$\begin{aligned} \langle a \rangle &= \langle \Psi_e | a \otimes \mathbf{1} | \Psi_e \rangle \\ &= \text{tr}(a \otimes \mathbf{1} |\Psi_e\rangle \langle \Psi_e|) \\ &= \text{tr}_1(a \text{tr}_2 |\Psi_e\rangle \langle \Psi_e|) \\ &= \text{tr}_1(a \rho_1), \end{aligned} \quad (1.3)$$

όπου $\text{tr}_{1,2}$ είναι το μερικό ίχνος πάνω σε ένα από τα δύο υποσυστήματα και $\rho_1 = \text{tr}_2 |\Psi_e\rangle \langle \Psi_e|$ είναι ο ανηγμένος πίνακας πυκνότητας για το πρώτο υποσύστημα. Από την στιγμή όπου η (1.3) ισχύει για οποιονδήποτε τοπικό τελεστή, καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι η κατάσταση του πρώτου υποσυστήματος δίνεται από την ρ_1 . Με ανάλογο τρόπο συμπεραίνουμε ότι και η κατάσταση του δεύτερου υποσυστήματος περιγράφεται από την ανηγμένη μήτρα πυκνότητας $\rho_2 = \text{tr}_1 |\Psi_e\rangle \langle \Psi_e|$. Παρολαυτά, η κατάσταση του σύνθετου συστήματος δεν είναι ίση με το γινόμενο των καταστάσεων των δύο υποσυστημάτων, $\rho = |\Psi_e\rangle \langle \Psi_e| \neq \rho_1 \otimes \rho_2$. Επιπλέον, αν πραγματοποιηθεί μία τοπική μέτρηση σε κάποιο υποσύστημα, αυτή θα επηρεάσει την συνολική κατάσταση και όχι μόνο αυτή του υποσυστήματος στο οποίο έγινε η μέτρηση. Από τα παραπάνω συμπεραίνουμε ότι οι πιθανότητες για το αποτέλεσμα μίας μέτρησης σε κάποιο υποσύστημα επηρεάζονται από τις μετρήσεις που έχουν προηγηθεί σε κάποιο άλλο υποσύστημα. Συνεπώς τα αποτελέσματα μίας μέτρησης σε σχετικά απομακρυσμένα και μη αλληλεπιδρώντα συστήματα, συσχετίζονται μεταξύ τους. Βασιζόμενοι σε αυτές τις παραδοχές, μπορούμε να πούμε ότι οι καταστάσεις που μπορούν να εκφραστούν μέσω ενός γινομένου καθαρών καταστάσεων, όπως στην περίπτωση της (1.1), ονομάζονται διαχωρίσιμες καταστάσεις. Αντίθετα, αν δεν υπάρχουν τοπικές καταστάσεις $|\psi_1\rangle \in H_1$ και $|\psi_2\rangle \in H_2$, το γινόμενο των οποίων να συνθέτει την κατάσταση του συνολικού συστήματος, τότε η κατάσταση $|\Psi\rangle$ λέγεται εναγκαλισμένη.

1.1.2 Στατιστικά Μείγματα

Μέχρι τώρα είδαμε μόνο καθαρές καταστάσεις. Γενικότερα όμως η κατάσταση ενός κβαντικού συστήματος μπορεί να αποτελείται από ένα μείγμα. Τα στατιστικά μείγματα είναι οι πιο κοινές καταστάσεις που συναντώνται σε μία πειραματική διαδικασία, αφού η πλήρης απομόνωση ενός κβαντικού συστήματος από το περιβάλλον είναι πολύ δύσκολη. Γενικά δεν είναι δυνατή η διαρκής παρακολούθηση των βαθμών ελευθερίας του περιβάλλοντος, οπότε η κατάσταση του συστήματος δίνεται από το ίχνος στο οποίο συμμετέχουν και τα στοιχεία του περιβάλλοντος.

Κατ' αντιστοιχία με την περίπτωση των καθαρών καταστάσεων, τα γινόμενα των στατιστικών μειγμάτων

$$\rho = \rho^{(1)} \otimes \rho^{(2)}, \quad (1.4)$$

όπου τα $\rho^{(1)}$ και $\rho^{(2)}$ αντιστοιχούν στα δύο υποσυστήματα, δεν εμφανίζουν συσχετισμούς. Η μέτρηση όμως πάνω σε ένα άθροισμα διαφορετικών διαχωρίσιμων καταστάσεων

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i^{(1)} \otimes \rho_i^{(2)}, \quad (1.5)$$

όπου $p_i > 0$ και $\sum_i p_i = 1$, θα επιστρέψει αποτελέσματα τα οποία συσχετίζονται μεταξύ τους. Δηλαδή υπάρχουν τοπικές παρατηρήσιμες ποσότητες a και b τέτοιες ώστε

$$\text{tr}(\rho(a \otimes b)) \neq \text{tr}(\rho(a \otimes \mathbf{1}))\text{tr}(\rho(\mathbf{1} \otimes b)) = \text{tr}_1 \rho_1 a \text{tr}_2 \rho_2 b. \quad (1.6)$$

Αυτοί οι συσχετισμοί μπορούν να προσεγγιστούν μέσω των κλασικών πιθανοτήτων p_i , οπότε μπορούν να θεωρηθούν κλασικοί. Οι καταστάσεις που έχουν την μορφή της (1.5) ονομάζονται διαχωρίσιμα στατιστικά μείγματα. Ένα στατιστικό μείγμα ρ , είναι εναγκαλισμένο εάν δεν υπάρχουν τοπικές καταστάσεις $\rho_i^{(1)}, \rho_i^{(2)}$ και μη αρνητικά βάρη p_i για τα οποία η ρ να μπορεί να περιγραφεί μέσω ενός αθροίσματος αντίστοιχο με αυτό της (1.5). Οι μετρήσεις σε διαφορετικά υποσυστήματα των εναγκαλισμένων καταστάσεων συνεπάγονται κάποιους συσχετισμούς στα αποτελέσματα, οι οποίοι σε αντίθεση με τα κλασικά συστήματα, δεν μπορούν να προσεγγιστούν με τις κλασικές πιθανότητες.

1.2 Κριτήρια Διαχωρισιμότητας

Αν και οι πιο πάνω ορισμοί για τις διαχωρίσιμες και τις εναγκαλισμένες καταστάσεις φαίνονται απλοί εκ πρώτης όψεως, δεδομένης μίας κατάστασης είναι σχετικά σύνθετη η διαδικασία της διερεύνησης για το αν είναι διαχωρίσιμη ή όχι. Ως διαχωρισιμότητα ορίζεται η δυνατότητα διαχωρισμού μίας καθαρής κατάστασης, ή ενός στατιστικού μείγματος σε ένα γινόμενο επιμέρους καταστάσεων και σε έναν γραμμικό συνδυασμό τανυστικών γινομένων αντίστοιχα. Πολλές φορές υπάρχουν περιπτώσεις όπου δεν είναι εύκολη η εύρεση ενός τρόπου για τον διαχωρισμό μίας κατάστασης. Αυτό μπορεί να οφείλεται είτε στο γεγονός ότι η κατάσταση είναι εναγκαλισμένη, οπότε δεν μπορεί να διαχωριστεί σε κάποιο γινόμενο καταστάσεων, ή ότι η κατάσταση είναι πράγματι διαχωρίσιμη αλλά ο συνδυασμός που διερευνάται δεν είναι σωστός.

Γι' αυτόν τον λόγο υπάρχει η ανάγκη της διαμόρφωσης κάποιων απλών κριτηρίων έτσι ώστε να γίνεται η διερεύνηση για το αν μία κατάσταση είναι διαχωρίσιμη ή εναγκαλισμένη. Για τις καθαρές καταστάσεις υπάρχουν κριτήρια μέσω των οποίων ξεχωρίζουν οι διαχωρίσιμες από τις εναγκαλισμένες καταστάσεις πολύ γρήγορα. Για τα στατιστικά δείγματα υπάρχουν αντίστοιχα εργαλεία τα οποία όμως μπορούν να χρησιμοποιηθούν αποτελεσματικά μόνο για χαμηλοδιάστατα συστήματα. Όπως θα δούμε πιο κάτω, για συστήματα μεγαλύτερων διαστάσεων αυτά τα εργαλεία μπορούν να παράσχουν περιορισμένο αριθμό πληροφοριών. Πριν προχωρήσουμε στα στατιστικά μείγματα, θα εξετάσουμε τι συμβαίνει στην περίπτωση των καθαρών καταστάσεων.

1.2.1 Καθαρές Καταστάσεις

Έστω ότι έχουμε την πιο κάτω κατάσταση

$$|\psi\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle + 2|1\rangle}{\sqrt{5}}. \quad (1.7)$$

Η $|\psi\rangle$ είναι διαχωρίσιμη και μπορεί να γραφεί ως ακολούθως

$$|\psi\rangle = \frac{|00\rangle + 2|01\rangle + |10\rangle + 2|11\rangle}{\sqrt{10}}, \quad (1.8)$$

όπου η δυνατότητα διαχωρισμού είναι λιγότερο προφανής.

Απ' ότι φαίνεται η διαχωρισιμότητα της $|\psi\rangle$ μπορεί να φανεί ευκολότερα αν η τελευταία αναπτυχθεί στην βάση των καταστάσεων $\{|0\rangle + |1\rangle/\sqrt{2}, |0\rangle - |1\rangle/\sqrt{2}\}$ στον χώρο H_1 και

$\{|0\rangle + 2|1\rangle/\sqrt{5}, 2|0\rangle - |1\rangle/\sqrt{5}\}$ στον χώρο H_2 , απ' ότι στην βάση $\{|0\rangle, |1\rangle\}$. Όπως θα δούμε υπάρχει πάντα μία βάση καταστάσεων μέσω των οποίων μπορούν να εντοπιστούν οι ιδιότητες του εναγκαλισμού. Η αναπαράσταση μίας κατάστασης σε αυτή την βάση είναι γνωστή ως ανάλυση κατά Schmidt.

Ανάλυση κατά Schmidt

Δεδομένων δύο βάσεων, $\{|\varphi_i\rangle\}$ και $\{|\phi_j\rangle\}$ που ανήκουν στους χώρους H_1 και H_2 αντίστοιχα, τότε κάθε καθαρή κατάσταση $|\psi\rangle$ που ανήκει στον $H = H_1 \otimes H_2$ μπορεί να εκφραστεί μέσω του αθροίσματος

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} d_{ij} |\varphi_i\rangle \otimes |\phi_j\rangle. \quad (1.9)$$

Οι συντελεστές επεκτατικότητας d_{ij} δίνονται από την επικάλυψη της κατάστασης με τα διανύσματα βάσης $d_{ij} = \langle \varphi_i | \otimes \langle \phi_j | \psi \rangle$. Αν κάποιος κάνει αλλαγή βάσης $|\tilde{\varphi}_i\rangle = U |\varphi_i\rangle$ και $|\tilde{\phi}_j\rangle = V |\phi_j\rangle$, όπου U και V μοναδιαίοι μετασχηματισμοί στους χώρους H_1 και H_2 αντίστοιχα, ο d_{ij} μετασχηματίζεται ως ακολούθως

$$\begin{aligned} \tilde{d}_{ij} &= \langle \tilde{\varphi}_i | \otimes \langle \tilde{\phi}_j | \psi \rangle \\ &= \langle \varphi_i | U^\dagger \otimes \langle \phi_j | V^\dagger | \psi \rangle \\ &= \sum_{pq} \langle \varphi_i | U^\dagger | \varphi_p \rangle \langle \phi_j | V^\dagger | \phi_q \rangle \langle \varphi_p | \otimes \langle \phi_q | \psi \rangle \\ &= [u d v]_{ij}. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Στην τρίτη γραμμή έγινε χρήση των ταυτοτικών τελεστών $\sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = \mathbf{1}$ και $\sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = \mathbf{1}$, ενώ παράλληλα ορίστηκαν και οι μοναδιαίοι πίνακες $u_{ip} = \langle \varphi_i | U^\dagger | \varphi_p \rangle$, $v_{jq} = \langle \phi_j | V^\dagger | \phi_q \rangle$. Για την νέα βάση, η κατάσταση δίνεται από την σχέση

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} [u d v]_{ij} |\tilde{\varphi}_i\rangle \otimes |\tilde{\phi}_j\rangle. \quad (1.11)$$

Για τον διαχωρισμό της $|\psi\rangle$ χρησιμοποιούμε το γεγονός ότι για κάθε μιγαδικό πίνακα d , υπάρχει πάντα δύο μοναδιαίοι μετασχηματισμοί u και v , έτσι ώστε ο πίνακας $u d v$ να είναι διαγώνιος. Με αυτόν τον τρόπο μπορεί να γίνει η ανάλυση σε ιδιάζουσες τιμές του d σε πίνακα με διαγώνια στοιχεία S_i τα

οποία είναι γνωστά ως ιδιάζουσες τιμές. Συνεπώς για κάθε κατάσταση $|\psi\rangle$ υπάρχουν βάσεις $\tilde{\varphi}_i^S$ και $\tilde{\phi}_j^S$ μέσω των οποίων, η (1.11) ανάγεται στην

$$|\psi\rangle = \sum_i \sqrt{\lambda_i} |\varphi_i^S\rangle \otimes |\phi_i^S\rangle, \quad (1.12)$$

όπου τα $\lambda_i = S_i^2$ είναι γνωστά ως συντελεστές Schmidt. Αντίστοιχα με τις ιδιοτιμές ενός πίνακα, οι ιδιάζουσες τιμές ορίζονται με μοναδικό τρόπο, άρα για μία κατάσταση $|\psi\rangle$ οι συντελεστές Schmidt είναι επίσης μοναδικοί. Μία βάση Schmidt $\{|\varphi_i^S\rangle \otimes |\phi_j^S\rangle\}$ δίνεται από διαχωρίσιμες καταστάσεις, συνεπώς όλες οι πληροφορίες για τον εναγκαλισμό μίας κατάστασης εμπεριέχονται στους συντελεστές Schmidt. Όταν δύο τουλάχιστον συντελεστές Schmidt είναι διαφορετικοί του μηδενός τότε η κατάσταση $|\psi\rangle$ δεν είναι διαχωρίσιμη και δεν μπορεί να γραφεί στην μορφή που έχει η σχέση (1.1). Κατά συνέπεια καταλήγουμε στο ότι μία κατάσταση είναι διαχωρίσιμη αν έχει μόνο

έναν συντελεστή Schmidt διάφορο του μηδενός.

Ανηγμένη Μήτρα Πυκνότητας

Από την στιγμή που οι συντελεστές Schmidt είναι απαραίτητοι για τον διαχωρισμό μεταξύ διαχωρίσιμων και εναγκαλισμένων καταστάσεων, πρέπει να βρεθεί μία μέθοδος για τον υπολογισμό τους. Σε αυτά τα πλαίσια, οι ανηγμένες μήτρες πυκνότητας μπορούν να φανούν πολύ χρήσιμες. Εξετάζοντας για παράδειγμα το πρώτο υποσύστημα, η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας μέσω της ανάλυσης κατά Schmidt γίνεται

$$\begin{aligned}\rho_1 &= \text{tr}_2 |\psi\rangle\langle\psi| \\ &= \text{tr}_2 \sum_{ij} \sqrt{\lambda_i \lambda_j} |\phi_i^S\rangle\langle\phi_j^S| \otimes |\phi_i^S\rangle\langle\phi_j^S| \\ &= \sum_i \lambda_i |\phi_i^S\rangle\langle\phi_i^S|.\end{aligned}\tag{1.13}$$

Στην πιο πάνω σχέση έγινε χρήση της ορθοκανονικότητας της βάσης Schmidt κατά τον υπολογισμό του ίχνους για το δεύτερο υποσύστημα.

Παρατηρούμε ότι οι συντελεστές Schmidt δίνονται από τις ιδιοτιμές της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας ρ_1 . Με αντίστοιχο τρόπο προσεγγίζεται και η μήτρα πυκνότητας ρ_2 . Οι πίνακες ρ_1 και ρ_2 έχουν τις ίδιες μη μηδενικές ιδιοτιμές, ενώ τα διανύσματα βάσης Schmidt δίνονται από τις ιδιοκαταστάσεις τους. Μέχρι στιγμής έχει βρεθεί μία απλή μέθοδος για τον υπολογισμό των συντελεστών Schmidt μίας κατάστασης $|\psi\rangle$. Ταυτόχρονα όμως για να είναι διαχωρίσιμη μία κατάσταση, απαιτείται ακριβώς ένας συντελεστής Schmidt να είναι διάφορος του μηδενός, άρα ο εναγκαλισμός μίας καθαρής κατάστασης $|\psi\rangle$ συσχετίζεται με τον βαθμό ανάμιξης των ανηγμένων μητρών πυκνότητας. Τα κριτήρια διαχωρισιμότητας μίας καθαρής κατάστασης επαναδιατυπώνονται ως ακολούθως

$$\begin{aligned}\text{tr} \rho_r^2 = 1 &\Rightarrow \rho_r \text{ καθαρή} \Rightarrow |\psi\rangle \text{ διαχωρίσιμη} \\ \text{tr} \rho_r^2 < 1 &\Rightarrow \rho_r \text{ μείγμα} \Rightarrow |\psi\rangle \text{ εναγκαλισμένη}\end{aligned}\tag{1.14}$$

όπου ο δείκτης r συμβολίζει ένα από τα δύο υποσυστήματα.

1.2.2 Στατιστικά Μείγματα

Τα στατιστικά μείγματα δεν μπορούν να αναλυθούν με τον ίδιο τρόπο όπως οι καθαρές καταστάσεις. Εάν μία κατάσταση είναι στατιστικό μείγμα, ο βαθμός ανάμιξης των μητρών ανηγμένης πυκνότητας δεν δίνει πληροφορίες για τον εναγκαλισμό. Γι' αυτό τον λόγο πρέπει να βρεθούν κάποια νέα κριτήρια μέσω των οποίων θα ξεχωρίζουν τα εναγκαλισμένα στατιστικά μείγματα από τα διαχωρίσιμα. Τα πιο βασικά από αυτά τα εργαλεία είναι οι ανιχνευτές του εναγκαλισμού και οι θετικές απεικονίσεις. Όπως θα δούμε οι δύο μέθοδοι σχετίζονται.

Οι Ανιχνευτές του Εναγκαλισμού

Ο ανιχνευτής του εναγκαλισμού W είναι ένας ερμιτιανός τελεστής ο οποίος δρα στον H , δεν είναι θετικά ορισμένος, αλλά επιστρέφει θετικές μέσες τιμές

$$\langle\psi_S|W|\psi_S\rangle \geq 0,\tag{1.15}$$

για όλες τις διαχωρίσιμες καθαρές καταστάσεις $|\psi_s\rangle$. Κάθε διαχωρίσιμο στατιστικό μείγμα μπορεί να εκφραστεί μέσω ενός γραμμικού συνδυασμού προβολών πάνω σε καθαρές διαχωρίσιμες καταστάσεις $\rho_s = \sum_i p_i |\psi_s^{(i)}\rangle \langle \psi_s^{(i)}|$ με $p_i > 0$ και $\sum_i p_i = 1$. Αυτό έχει σαν συνέπεια, η μέση τιμή ενός ανιχνευτή εναγκαλισμού να είναι μη αρνητική σε συνάρτηση με οποιοδήποτε διαχωρίσιμο στατιστικό μείγμα

$$\text{tr}(\rho_s, W) = \sum_i p_i \langle \psi_s | W | \psi_s \rangle \geq 0. \quad (1.16)$$

Στην περίπτωση όπου η μέση τιμή μίας μήτρας πυκνότητας είναι μικρότερη του μηδέν

$$\text{tr}(\rho W) < 0, \quad (1.17)$$

τότε η ρ είναι εναγκαλισμένη και ο W εντοπίζει τον εναγκαλισμό. Το βασικό πλεονέκτημα είναι ότι σε κάθε εναγκαλισμένη κατάσταση αντιστοιχεί ένας ανιχνευτής ο οποίος μπορεί να την εντοπίσει.

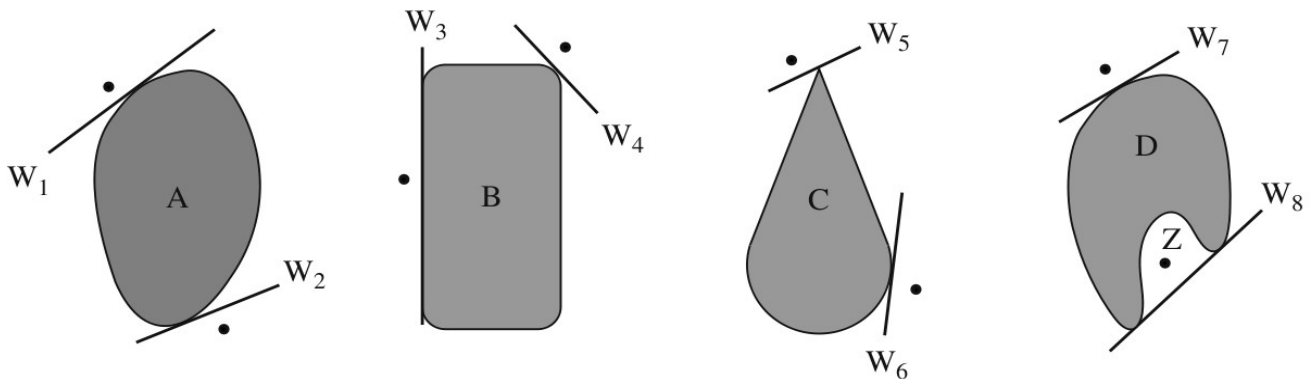
Η Γεωμετρία των Κβαντικών Καταστάσεων

Σε αυτό το σημείο θα προσπαθήσουμε να προσεγγίσουμε τις κβαντικές καταστάσεις από μία γεωμετρική άποψη. Μπορούμε να θεωρήσουμε ότι οι μήτρες πυκνότητας είναι διανύσματα σε έναν χώρο Hilbert-Schmidt. Προκειμένου να καθοριστεί γεωμετρικά αυτός ο χώρος απαιτείται ένα βαθμωτό γινόμενο το οποίο δίνεται εν προκειμένω από την σχέση

$$\langle A | B \rangle = \text{tr} A^\dagger B. \quad (1.18)$$

Οι διαχωρίσιμες καταστάσεις συνθέτουν ένα κυρτό σύνολο. Αυτό σημαίνει ότι για δύο διαχωρίσιμες καταστάσεις $\rho_s^{(1)}$ και $\rho_s^{(2)}$, ένα οποιοδήποτε άθροισμα της μορφής

$\lambda \rho_s^{(1)} + (1-\lambda) \rho_s^{(2)}$ ($1 \geq \lambda \geq 0$) είναι επίσης διαχωρίσιμο. Η γεωμετρική ερμηνεία της πιο πάνω παραδοχής είναι ότι το σύνολο των διαχωρίσιμων καταστάσεων δεν εμφανίζει κάποια “αυλάκωση”, όπως φαίνεται στο σχήμα 1.1.



Σχήμα 1.1. Τέσσερις διαφορετικές απεικονίσεις συνόλων, εκ των οποίων τα A, B, C είναι κυρτά ενώ το D δεν είναι. Για ένα οποιοδήποτε σημείο εκτός των κυρτών γραμμών, υπάρχει μία ευθεία (όπως οι W_i , $i=1, \dots, 6$) η οποία διαχωρίζει το σημείο από το υπόλοιπο σχήμα. Για την περίπτωση του μη-κυρτού συνόλου D τα πράγματα είναι διαφορετικά, αφού για το σημείο Z δεν υπάρχει μία τέτοια ευθεία. Κάτι ανάλογο ισχύει και στην περίπτωση των ανιχνευτών του εναγκαλισμού, αφού το σύνολο των διαχωρίσιμων καταστάσεων είναι κυρτό. Υπάρχει δηλαδή ένας ανιχνευτής (κατ' αντιστοιχία με μία από τις γραμμές W_i) για μία εναγκαλισμένη κατάσταση (κατ' αντιστοιχία με κάποιο από τα σημεία) ο οποίος την διαχωρίζει από το κυρτό σχήμα (η περιφέρεια των σκιασμένων περιοχών).

Τα σχήματα A, B και C απεικονίζουν κυρτά σύνολα, ενώ το D όχι. Η βασική διαφορά των συνόλων A, B και C με το σύνολο D, είναι ότι στην περίπτωση των τριών πρώτων και για οποιοδήποτε σημείο εκτός του συνόλου, μπορεί να υπάρξει μία ευθεία γραμμή η οποία το διαχωρίζει από τα υπόλοιπα στοιχεία του συνόλου. Αυτό όπως βλέπουμε πιο κάτω δεν ισχύει για το σύνολο D.

Παρόλο που το σύνολο των διαχωρίσιμων καταστάσεων έχει περισσότερες διαστάσεις και είναι πιο πολύπλοκο από τα σχήματα που βλέπουμε πιο πάνω, αυτή η υποτυπώδης απεικόνιση μας επιτρέπει να καταλάβουμε τον βασικό μηχανισμό των ανιχνευτών του εναγκαλισμού.

Η Γεωμετρική Ερμηνεία των Ανιχνευτών του Εναγκαλισμού

Μία διαχωρίσιμη κατάσταση χαρακτηρίζεται από την συνθήκη $\text{tr } \rho W \geq 0$. Προκειμένου να μηδενιστεί η ποσότητα $\text{tr } \sigma W$ πρέπει το σ να είναι ένας γραμμικός συνδυασμός των τελεστών O_i οι οποίοι είναι ορθογώνιοι στον W ,

$$\sigma = \sum_i a_i O_i, \quad \text{με} \quad \text{tr}(O_i W) = 0. \quad (1.19)$$

Μέσω της συνθήκης $\text{tr } \sigma W = 0$ ορίζεται μία υπερεπιφάνεια στον χώρο των τελεστών, κατ' αναλογία με τις γραμμές W_i του σχήματος 1.1. Το πρόσημο της ποσότητας $\text{tr } \rho W$ προσδιορίζει σε ποια περιοχή της υπερεπιφάνειας βρίσκεται το ρ . Από την στιγμή όπου όλες οι διαχωρίσιμες καταστάσεις συνθέτουν ένα κυρτό σύνολο, υπάρχει ένας ανιχνευτής για οποιαδήποτε εναγκαλισμένη κατάσταση ο οποίος την εντοπίζει.

Λόγω της πολύπλοκης δομής των συνόλων των διαχωρίσιμων καταστάσεων, απαιτούνται πάρα πολλοί ανιχνευτές προκειμένου να χαρακτηριστεί πλήρως. Για μία τυχαία κατάσταση ρ μπορεί να μην είναι εφικτό να βρεθεί κάποιος ανιχνευτής. Αυτό δεν σημαίνει όμως ότι αυτή η κατάσταση είναι απαραίτητα διαχωρίσιμη. Συνεπώς ένας ανιχνευτής παρέχει ένα απαραίτητο κριτήριο για την διαχωρισιμότητα: η μέση τιμή μίας διαχωρίσιμης κατάστασης θα είναι αρνητική για οποιονδήποτε ανιχνευτή. Μία κατάσταση δεν μπορεί να είναι διαχωρίσιμη αν αυτή η μέση τιμή είναι μη αρνητική.

Θετικές Απεικονίσεις

Ένας άλλος τρόπος για τον έλεγχο της διαχωρισιμότητας είναι οι θετικές γραμμικές απεικονίσεις A μέσω των οποίων, το σύνολο των τελεστών $B(H)$ οι οποίοι δρουν στον χώρο H , απεικονίζονται στο σύνολο των τελεστών $B(\tilde{H})$ που δρουν στον χώρο \tilde{H} . Ο \tilde{H} μπορεί -αν και δεν είναι απαραίτητο να είναι ίδιος με τον H . Η απεικόνιση A είναι θετική αν ο $\tilde{\rho} = \Lambda(\rho)$ είναι ένας θετικός τελεστής, για οποιονδήποτε θετικό τελεστή ρ . Σε αυτή την περίπτωση θα εξετάσουμε ένα διπλά χωρισμένο σύστημα. Αυτή η απεικόνιση μπορεί να επεκταθεί στον χώρο που προκύπτει από το γινόμενο $H = H_1 \otimes H_2$ έτσι ώστε η Λ_E να δρα στον $B(H_1)$ με τον ίδιο τρόπο που δρα η A , δηλαδή

$$\Lambda_E = \Lambda \otimes \mathbf{1}. \quad (1.20)$$

Μια ιδιότητα αυτών των απεικονίσεων είναι ότι η Λ_E δεν είναι απαραίτητα θετική. Δηλαδή για κάποιες απεικονίσεις A υπάρχουν καταστάσεις ρ στον $H = H_1 \otimes H_2$ για τις οποίες ο $\Lambda_E(\rho)$ δεν είναι θετικός τελεστής.

Σε αυτό το σημείο θα θεωρήσουμε μία διαχωρίσιμη κατάσταση ρ_s στην οποία θα εφαρμόσουμε μία γραμμική θετική απεικόνιση

$$\Lambda_E(\rho_s) = \sum_i p_i \Lambda(\rho_i^{(1)}) \otimes \rho_i^{(2)}. \quad (1.21)$$

Από την στιγμή όπου η Λ είναι θετική, τότε και ο τελεστής $\Lambda(\rho_i^{(1)})$ είναι επίσης θετικός. Επίσης από την στιγμή όπου οι p_i και $\rho_i^{(2)}$ είναι θετικές ποσότητες, τότε ο τελεστής $\Lambda_E(\rho_s)$ και η μέση τιμή του είναι επίσης θετικοί. Εάν βρεθεί μία θετική απεικόνιση Λ τέτοια ώστε ο $\Lambda_E(\rho)$ να έχει έστω και μία αρνητική ιδιοτιμή, τότε σίγουρα η κατάσταση ρ είναι εναγκαλισμένη. Αν κάποιος θέλει να αποδείξει την διαχωρισιμότητα μίας κατάστασης ρ στον $H_1 \otimes H_2$, τότε είναι απαραίτητο να χρησιμοποιήσει απεικονίσεις Λ που θα απεικονίζουν τον $B(H_2)$ στον $B(H_1)$, δηλαδή ο τελεστής $(\mathbf{1} \otimes \Lambda)(\rho)$ θα δρα στον $H_1 \otimes H_2$. Μία κατάσταση είναι διαχωρίσιμη, αν και μόνο αν ο $(\mathbf{1} \otimes \Lambda)(\rho)$ είναι θετικός για όλες τις θετικές γραμμικές απεικονίσεις του $B(H_2)$ στον $B(H_1)$. Ο χαρακτηρισμός των θετικών απεικονίσεων είναι ένα ανοιχτό πρόβλημα, οπότε αυτές οι απεικονίσεις παρέχουν μόνο ένα βασικό κριτήριο διαχωρισιμότητας όπως στην περίπτωση των ανιχνευτών. Εάν βρεθεί μία απεικόνιση Λ τέτοια ώστε ο $(\mathbf{1} \otimes \Lambda)(\rho)$ να μην είναι θετικός τελεστής, τότε η κατάσταση ρ είναι εναγκαλισμένη. Από την άλλη αν δεν βρεθεί κάποια απεικόνιση, τότε δεν είναι δυνατόν να γνωρίζει κάποιος εάν η κατάσταση είναι όντως εναγκαλισμένη, ή αν απλά δεν έχει βρει ακόμα την σωστή απεικόνιση.

Γενικά οι θετικές απεικονίσεις είναι αποτελεσματικές μόνο σε συστήματα χαμηλών διαστάσεων. Για παράδειγμα, σε ένα σύστημα που αποτελείται από δύο qubits η διαχωρισιμότητα μπορεί να ελεγχθεί με μία μόνο θετική απεικόνιση, την $T(\rho) = \rho^T$ η οποία είναι ο ανάστροφος πίνακας της ρ . Αυτό οφείλεται στο ότι οποιαδήποτε θετική απεικόνιση από τον $B(\mathbb{C}^2)$ στον εαυτό του μπορεί να γραφεί

$$\Lambda = \Lambda_{CP}^1 + \Lambda_{CP}^2 \circ T, \quad (1.22)$$

όπου οι $\Lambda_{CP}^i (i=1,2)$ είναι θετικές απεικονίσεις. Συνεπώς, η απαίτηση ότι ο $(\mathbf{1} \otimes \Lambda)(\rho)$ πρέπει να είναι θετικός για οποιαδήποτε θετική απεικόνιση Λ , ανάγεται ως ακολούθως

$$\begin{aligned} (\mathbf{1} \otimes \Lambda)(\rho) &= (\mathbf{1} \otimes \Lambda_{CP}^1)(\rho) + (\mathbf{1} \otimes \Lambda_{CP}^2)(\mathbf{1} \otimes T)(\rho) \\ &= (\mathbf{1} \otimes \Lambda_{CP}^1)(\rho) + (\mathbf{1} \otimes \Lambda_{CP}^2)(\rho^{pt}) \geq 0, \end{aligned} \quad (1.23)$$

όπου $\rho^{pt} = (\mathbf{1} \otimes T)(\rho)$ ο μερικός ανάστροφος του ρ . Από την στιγμή όπου οι Λ_{CP}^i είναι πλήρως θετικές, τότε και οι $\mathbf{1} \otimes \Lambda_{CP}^i$ είναι θετικές απεικονίσεις. Άρα ο $(\mathbf{1} \otimes \Lambda_{CP}^i)(\rho)$ είναι μη αρνητικός -δεν έχει αρνητική ιδιοτιμή δηλαδή. Ο ρ^{pt} δεν είναι απαραίτητα θετικός τελεστής αφού η $\mathbf{1} \otimes T$ δεν είναι θετική απεικόνιση. Αν ο μερικός ανάστροφος του ρ είναι μη-αρνητικός τότε επίσης και ο $(\mathbf{1} \otimes \Lambda_{CP}^2)(\rho^{pt})$ είναι μη αρνητικός. Σε αυτή την περίπτωση καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι ο $(\mathbf{1} \otimes \Lambda)(\rho)$ είναι μη-αρνητικός για τυχαίες θετικές απεικονίσεις Λ , πράγμα το οποίο συνεπάγεται ότι η ρ είναι διαχωρίσιμη.

Από την άλλη γνωρίζουμε ήδη ότι η ρ είναι εναγκαλισμένη αν ο μερικός ανάστροφος του πίνακά της έχει μία τουλάχιστον αρνητική ιδιοτιμή. Συνεπώς από τον πίνακα ρ^{pt} μπορούμε να καταλάβουμε αν μία κατάσταση είναι διαχωρίσιμη ή εναγκαλισμένη για συστήματα διαστάσεων 2×2 και 2×3 .

Σε συστήματα υψηλότερων διαστάσεων η (1.22) δεν μπορεί να χαρακτηρίσει πλέον όλες τις θετικές απεικονίσεις, ενώ υπάρχουν εναγκαλισμένες καταστάσεις με θετικό μερικό ανάστροφο πίνακα (ppt). Σε αυτά τα συστήματα το κριτήριο ppt χρησιμοποιείται κυρίως για τον εντοπισμό της διαχωρισιμότητας, αλλά ταυτόχρονα είναι σε θέση να ανιχνεύσει εναγκαλισμένες καταστάσεις.

Μία τυχαία κατάσταση ενός διπλά διαχωρισμένου συστήματος μπορεί να αναλυθεί σε ένα γινόμενο τυχαίων βάσεων ως ακολούθως

$$\rho = \sum_{i,j,k,l} \rho_{ij,kl} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j| \otimes |\phi_k\rangle\langle\phi_l|. \quad (1.24)$$

Σε αυτήν την περίπτωση, ο μερικός ανάστροφος της πιο πάνω κατάστασης προκύπτει με μία μικρή αναδιάταξη των στοιχείων του πίνακα και γράφεται

$$\rho^{pt} = (\mathbf{1} \otimes T)(\rho) = \sum_{i,j,k,l} \rho_{ij,kl} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j| \otimes |\phi_k\rangle\langle\phi_l|. \quad (1.25)$$

Είναι φανερό ότι ο ρ^{pt} εξαρτάται από τα στοιχεία της βάσης με την οποία κατασκευάζεται. Παρόλαυτα το κριτήριο διαχωρισιμότητας βασίζεται στο φάσμα του ρ^{pt} , το οποίο είναι ανεξάρτητο από την βάση που θα επιλεγεί.

Ανιχνευτές και Θετικές Απεικονίσεις

Μέχρι στιγμής οι ανιχνευτές και οι θετικές απεικονίσεις έχουν μελετηθεί σαν δύο ανεξάρτητες διαδικασίες. Οι ανιχνευτές του εναγκαλισμού γίνονται αντιληπτοί όταν εξετάζονται από μία γεωμετρική προοπτική, κάτι το οποίο δεν συμβαίνει με τις ιδιότητες των θετικών απεικονίσεων. Αυτές οι μέθοδοι όμως σχετίζονται πολύ πιο στενά απ' ό,τι φαίνεται εκ των προτέρων. Ας θεωρήσουμε μία θετική απεικόνιση Λ , τέτοια ώστε η απεικόνιση $\mathbf{1} \otimes \Lambda$ που θα εφαρμοστεί σε μία κατάσταση ρ θα επιστρέψει έναν μη θετικό τελεστή -δηλαδή η Λ δεν είναι μία τελείως θετική απεικόνιση. Σε αυτή την περίπτωση, ο $(\mathbf{1} \otimes \Lambda)(\rho)$ έχει ένα ιδιοδιάνυσμα $|\chi\rangle$ το οποίο αντιστοιχεί σε μία αρνητική ιδιοτιμή λ ,

$$(\mathbf{1} \otimes \Lambda)(\rho)|\chi\rangle = \lambda|\chi\rangle. \quad (1.26)$$

Τώρα μπορούμε να δείξουμε ότι η ποσότητα $W = (\mathbf{1} \otimes \Lambda^\dagger)(|\chi\rangle\langle\chi|)$ είναι ένας ανιχνευτής εναγκαλισμού. Για μία τυχαία διαχωρίσιμη κατάσταση $|\phi_s\rangle$ έχουμε ότι

$$\begin{aligned} \langle\phi_s|W|\phi_s\rangle &= \text{tr} [((\mathbf{1} \otimes \Lambda^\dagger)(|\chi\rangle\langle\chi|))|\phi_s\rangle\langle\phi_s|] \\ &= \text{tr} [|\chi\rangle\langle\chi|((\mathbf{1} \otimes \Lambda)(|\phi_s\rangle\langle\phi_s|))] \geq 0, \end{aligned} \quad (1.27)$$

όπου η ανισότητα οφείλεται στο ότι η Λ είναι θετική, έτσι ώστε ο $(\mathbf{1} \otimes \Lambda)(|\phi_s\rangle\langle\phi_s|)$ να είναι θετικός τελεστής. Και πράγματι ο ανιχνευτής εντοπίζει τον εναγκαλισμό της ρ

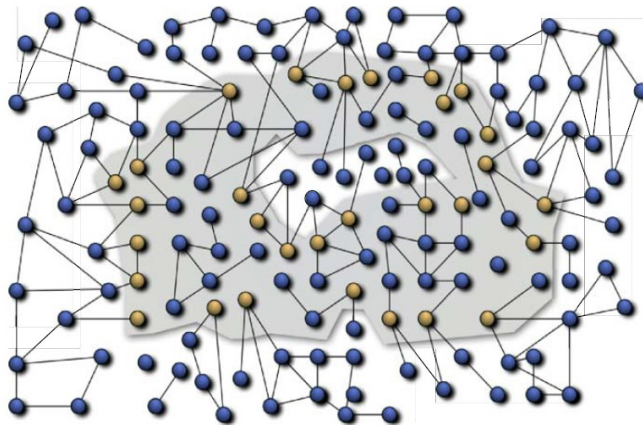
$$\begin{aligned} \text{tr}(\rho W) &= \text{tr}[\rho((\mathbf{1} \otimes \Lambda^\dagger)(|\chi\rangle\langle\chi|))] \\ &= \text{tr} [((\mathbf{1} \otimes \Lambda)(\rho))|\chi\rangle\langle\chi|] \\ &= \langle\chi|(\mathbf{1} \otimes \Lambda)(\rho)|\chi\rangle = \lambda < 0, \end{aligned} \quad (1.28)$$

όπως φαίνεται και από την πιο πάνω σχέση.

2. Η εντροπία εναγκαλισμού

Οι φυσικές αλληλεπιδράσεις σε συστήματα πολλών σωματιδίων είναι συνήθως τοπικές, καθώς μεμονωμένα στοιχεία αλληλεπιδρούν κυρίως με τα γειτονικά τους. Η εντροπία μίας ανηγμένης κατάστασης σε κάποια υποπεριοχή, αυξάνεται όσο μεγαλώνει το πλαίσιο που φράσσει την τελευταία. Στην κλασική μηχανική η εντροπία ποσοτικοποιεί το κατά πόσο είμαστε αβέβαιοι για την ακριβή κατάσταση στην οποία βρίσκεται ένα σύστημα. Με άλλα λόγια προσδιορίζει την ποσότητα της πληροφορίας που μας λείπει, προκειμένου να προσδιορίσουμε μία συγκεκριμένη μικροκατάσταση του συστήματος, από όλες της πιθανές που συνθέτουν την μακροσκοπική εικόνα του. Αν δεν είμαστε σίγουροι για την μικροκατάσταση ενός συστήματος, τότε η έννοια της εντροπίας έρχεται να συμπληρώσει αυτό το γνωστικό κενό.

Στην κβαντική μηχανική, θετικές τιμές για την εντροπία μπορούν να προκύψουν χωρίς να είναι απαραίτητα ελλειπείς οι πληροφορίες που έχουμε για το σύστημα. Πιο συγκεκριμένα θα εξετάσουμε ένα σύστημα πολλών σωματιδίων όπως αυτό του σχήματος 1, όπου κάθε κορυφή i του πλέγματος L αντιστοιχεί σε ένα μεμονωμένο κβαντικό σύστημα. Το εν λόγω σύστημα βρίσκεται στην θεμελιώδη και μη εκφυλισμένη κατάσταση $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ και σε θερμοκρασία μηδέν, συνεπώς η εντροπία von Neumann γίνεται ίση με μηδέν. Αν διαχωρίσουμε μία περιοχή αυτού του συστήματος προσδιορίζοντας την μέσω του συνόλου I και τα υπόλοιπα σημεία που δεν ανήκουν σε αυτή μέσω του $O=L\setminus I$ και πάρουμε την ανηγμένη κατάσταση $\rho_I = \text{tr}_O[\rho]$, η οποία δεν είναι καθαρή, τότε η εντροπία von Neumann $S(\rho_I)$ θα είναι μη μηδενική.



Σχήμα 2.1 Ένα πλέγμα L , στο οποίο διακρίνεται μία περιοχή $I \subset L$ (σκιασμένη επιφάνεια). Οι κορυφές απεικονίζουν το σύνολο ∂I του I του οποίου η επιφάνεια είναι $s(I) = |\partial I|$.

Σε αντίθεση με τις θερμικές καταστάσεις, αυτή η εντροπία δεν οφείλεται στην ελλιπή γνώση αναφορικά με την μικροκατάσταση, αφού και για μηδενικές θερμοκρασίες παίρνει τιμή διάφορη του μηδενός. Η εντροπία αυτή οφείλεται στον εναγκαλισμό ο οποίος αποτελεί θεμελιώδη ιδιότητα της κβαντικής μηχανικής. Η εντροπία μιας υποπεριοχής ή η εντροπία εναγκαλισμού μπορεί να ορίσει ένα μέσο μέτρησης του εναγκαλισμού στις καθαρές καταστάσεις.

Στην κβαντική μηχανική η εντροπία von Neumann

$$S(\rho) = -\text{Tr} \rho \ln \rho \quad (2.1)$$

παίζει αντίστοιχο ρόλο με αυτόν την εντροπίας Shannon στην κλασική θεωρία πιθανοτήτων. Είναι και οι δύο συναρτησιακά της κατάστασης, είναι ταυτόχρονα μονότονες σύμφωνα με μία συγκεκριμένη μορφή απεικόνισης και τέλος μπορούν να προσδιοριστούν μονοσήμαντα σύμφωνα

με τις εκάστοτε φυσικές προϋποθέσεις.

Η εντροπία Shannon μπορεί να προκύψει από την εντροπία von Neumann για διαγώνιες μήτρες πυκνότητας. Υπάρχει ένας γενικός κανόνας βάση του οποίου, μέσω των τεχνικών ολοκλήρωσης και εξεύρεσης ιχνών είναι δυνατόν, να περάσουμε από το κλασικό διακριτό ή συνεχές φάσμα στα αντίστοιχα κβαντικά. Η μελέτη της κβαντικής εντροπίας βασίζεται κατά κανόνα στην μελέτη ανισοτήτων. Αυτό που μας ενδιαφέρει ουσιαστικά είναι η κατασκευή συναρτήσεων τελεστών από ανισότητες, οι οποίες ισχύουν μεταξύ συναρτήσεων που είναι ορισμένες στο σύνολο \mathbb{R} . Σε γενικές γραμμές είναι απλό να οριστούν οι συναρτήσεις τελεστών οι οποίοι περιγράφονται μέσω ενός πίνακα. Από την στιγμή όπου αυτοί οι πίνακες μπορούν να διαγωνοποιηθούν μέσω μοναδιακών μετασχηματισμών, δηλαδή $A = \text{diag}(\lambda_i)U^\dagger$, μπορούμε να θέσουμε $f(A) = U \text{diag}(f(\lambda_i))U^\dagger$, όπου f μπορεί να είναι οποιαδήποτε συνάρτηση στο \mathbb{R} .

Εκ πρώτης όψεως κάποιος θα μπορούσε να σκεφτεί ότι η εντροπία μίας καθορισμένης περιοχής I , θα έχει πάντα έναν εκτατικό χαρακτήρα. Κάτι τέτοιο γίνεται αντιληπτό μέσω της διακύμανσης του όγκου το οποίο παρατηρείται στις θερμικές καταστάσεις. Στην περίπτωση των θεμελιωδών καταστάσεων όμως αυτό που συναντάται είναι κανόνες επιφάνειας με ή χωρίς διορθώσεις, συνήθως λογαριθμικές. Αυτό σημαίνει ότι στο όριο μίας καθορισμένης περιοχής η διακύμανση της εντροπίας είναι σχεδόν γραμμική. Σε αυτή την περίπτωση, η εντροπία πληρεί έναν κανόνα επιφάνειας.

Αυτό που μας ενδιαφέρει κυρίως στην μελέτη της εντροπίας εναγκαλισμού είναι το πως γίνεται η κατανομή των συσχετισμών σε συστήματα πολλών σωματιδίων. Ειδικότερα μέσω των κανόνων επιφάνειας μπορούμε να δούμε πως κατανέμονται οι κβαντικοί συσχετισμοί σε αυτού του είδους τα συστήματα. Οι αλληλεπιδράσεις στα κβαντικά συστήματα πολλών σωματιδίων είναι συνήθως τοπικές, πράγμα το οποίο σημαίνει ότι η ισχύς των πρώτων για τα επιμέρους στοιχεία έχει σχετικά μικρή εμβέλεια και αφορά έναν καθορισμένο αριθμό γειτόνων.

Άλλη μία περίπτωση που παρουσιάζει ενδιαφέρον είναι η πολυπλοκότητα των κβαντικών συστημάτων και ο τρόπος προσομοίωσής τους. Είναι γεγονός ότι το ποσοστό εναγκαλισμού της θεμελιώδους κατάστασης ενός τέτοιου συστήματος επηρεάζει το σύνολο των παραμέτρων που θα χρειαστούν για την περιγραφή της.

Παράλληλα, αυτό που μελετάται είναι η τοπολογική εντροπία εναγκαλισμού η οποία αποτελεί δείκτη της τοπολογικής τάξης. Η τοπολογική τάξη είναι κάτι καινούργιο για τα συστήματα πολλών σωματιδίων, το οποίο δεν μπορεί να περιγραφεί μέσω τοπικών παραμέτρων τάξης.

2.1 Συστήματα μίας διάστασης

Τα περισσότερα αποτελέσματα σχετικά με τους κανόνες επιφάνειας αφορούν μονοδιάστατες αλυσίδες όπως οι αρμονικές ή οι αλυσίδες spin. Αν διαχωρίσουμε ένα συνεχές σύνολο $I = \{1, \dots, n\}$ από μία αλυσίδα, τότε τα όριά του αποτελούνται ή από μία περιοχή οπότε έχουμε ανοιχτές συνοριακές συνθήκες είτε από δύο οπότε σε αυτή την περίπτωση έχουμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Σε αυτή την περίπτωση οι κανόνες επιφάνειας, επιβάλουν ότι η εντροπία είναι άνω φραγμένη μέσω μίας σταθεράς η οποία είναι ανεξάρτητη από το μέγεθος του συνόλου n και του πλέγματος $|L|$,

$$S(\rho_1) = O(1). \quad (2.2)$$

Πιο κάτω θα δούμε ότι για την περίπτωση των κβαντικών αλυσίδων, η εικόνα για την διακύμανση της εντροπίας είναι πιο ξεκάθαρη. Το αν ισχύει ή όχι ένας κανόνας επιφάνειας εξαρτάται κυρίως από το κατά πόσο το σύστημα βρίσκεται κοντά σε κάποιο κρίσιμο κβαντικό σημείο.

2.1.1 Μποζονικές αρμονικές αλυσίδες

Τα μποζονικά αρμονικά συστήματα, όπως επίσης και τα φερμιονικά μαζί με τις αντίστοιχες αλυσίδες spin όπως το μοντέλο XY παίζουν καθοριστικό ρόλο στην μελέτη των συστημάτων πολλών σωματιδίων. Τα αρμονικά πλεγμιακά συστήματα μπορούν να μοντελοποιήσουν διάφορες περιπτώσεις των πεδίων Klein-Gordon, τους τρόπους ταλάντωσης κρυσταλλικών πλεγμάτων, ή παγιδευμένων ιόντων, ενώ παράλληλα μπορούν να κάνουν και προσεγγίσεις χαμηλής τάξης σε μη αρμονικά συστήματα.

Η Χαμιλτονιανή ενός αρμονικού πλέγματος L δίνεται από την σχέση

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j \in L} (p_i P_{i,j} p_j + x_i X_{i,j} x_j), \quad (2.3)$$

όπου οι $X, P \in \mathbb{R}^{|L| \times |L|}$ είναι πραγματικοί, συμμετρικοί και θετικοί πίνακες οι οποίοι καθορίζουν την δομή της σύζευξης των συστημάτων. Οι κανονικοί τελεστές x_i, p_i ικανοποιούν τις κανονικές μεταθετικές σχέσεις $[x_i, p_k] = i \delta_{j,k}$. Λαμβάνοντας υπόψιν τους τελεστές καταστροφής για τα μποζόνια $b_j = (x_j + i p_j) / \sqrt{2}$, η Χαμιλτονιανή (2.3) γίνεται

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} (b_i^\dagger A_{i,j} b_j + b_i A_{i,j} b_j^\dagger + b_i B_{i,j} b_j + b_i^\dagger B_{i,j} b_j^\dagger), \quad (2.4)$$

όπου $A = (X + P)/2$, $B = (X - P)/2$. Οι θεμελιώδης και οι θερμικές καταστάσεις της πιο πάνω Χαμιλτονιανής χαρακτηρίζονται πλήρως από τις ροπές δεύτερης τάξης των κανονικών τελεστών, οι οποίες ορίζουν τον πίνακα συνδιακύμανσης

$$\Gamma_{i,j} = \langle \{r_i, r_j\} \rangle = \langle r_i r_j \rangle + \langle r_j r_i \rangle, \quad (2.5)$$

όπου $r = (x_1, \dots, x_{|L|}, p_1, \dots, p_{|L|})$ είναι το διάνυσμα των κανονικών τελεστών. Ο πίνακας συνδιακύμανσης της θεμελιώδους κατάστασης της (2.3) είναι $\Gamma = \Gamma_x \oplus \Gamma_p$, όπου $\Gamma_x = \Gamma_p^{-1}$ και $\Gamma_p = X^{1/2} (X^{1/2} P X^{1/2})^{-1/2} X^{1/2}$. Στους πίνακες συνδιακύμανσης, οι μοναδιακές διαδικασίες εκφράζονται μέσω συμπλεκτικών μετασχηματισμών S οι οποίοι διατηρούν τις μεταθετικές σχέσεις $\sigma_{k,l} = i[r_k, r_l]$, για παράδειγμα $S \sigma S^T = \sigma$. Σύμφωνα με το θεώρημα του Williamson, για κάθε θετικό πίνακα $A \in \mathbb{R}^{2N \times 2N}$, υπάρχει ένας συμπλεκτικός μετασχηματισμός S τέτοιος ώστε $SAS^T = D$, όπου D είναι ένας διαγώνιος πίνακας με φάσμα ίδιο με αυτό των θετικών τετραγωνικών ριζών του $(i\sigma A)^2$. Οι ιδιοτιμές d_i του D είναι οι συμπλεκτικές ιδιοτιμές του A .

Προκειμένου να προσδιορίσουμε το περιεχόμενο του εναγκαλισμού, θα πρέπει να ορίσουμε κάποια μέτρα για αυτόν και να τα υπολογίσουμε σύμφωνα με τις ιδιότητες του πίνακα συνδιακύμανσης. Το πρώτο βέβαια από αυτά είναι η εντροπία του εναγκαλισμού. Το θεώρημα του Williamson δείχνει ότι κάθε συνάρτηση μίας κατάστασης η οποία παραμένει αμετάβλητη καθορίζεται πλήρως από τις συμπλεκτικές ιδιοτιμές. Η εντροπία μίας Γκαουσιανής κατάστασης ρ με συμπλεκτικές ιδιοτιμές d_1, \dots, d_N του πίνακα συνδιακύμανσης της δίνεται από την σχέση

$$S(\rho) = \sum_{j=1}^N \left(\frac{d_j+1}{2} \log_2 \frac{d_j+1}{2} - \frac{d_j-1}{2} \log_2 \frac{d_j-1}{2} \right). \quad (2.6)$$

Άλλο ένα βασικό μέγεθος για αυτήν την μελέτη είναι η λογαριθμική αρνητικότητα η οποία αποτελεί μέτρο του εναγκαλισμού και ορίζεται από την σχέση $E_N(\rho, I) = \log_2 \|\rho^{I_i}\|$, όπου

$\|A\|_1 = \text{tr}[(A^\dagger A)^{1/2}]$ είναι το μέτρο του ίχνους και $\rho^{\Gamma'}$ ο μερικώς ανάστροφος του ρ ως προς το εσωτερικό I . Ο μερικώς ανάστροφος ως προς το δεύτερο υποσύστημα ορίζεται ως $(|i\rangle\langle k| \otimes |j\rangle\langle l|)^{\Gamma'} = |i\rangle\langle k| \otimes |l\rangle\langle j|$. Για τους πίνακες συνδιακύμανσης ο μερικώς ανάστροφος είναι μερικώς αντιστρέψιμος χρονικά, δηλαδή $p_i \rightarrow -p_i$ αν το $i \in I$, ενώ το x_i παραμένει αμετάβλητο. Τότε για την κατάσταση ρ με πίνακα συνδιακύμανσης $\Gamma = \Gamma_x \oplus \Gamma_p$ βρίσκουμε ότι η $\rho^{\Gamma'}$ έχει πίνακα συνδιακύμανσης $\Gamma' = \Gamma_x \oplus (F \Gamma_p F)$, όπου ο διαγώνιος πίνακας F παίρνει τιμές $F_{i,j} = \pm \delta_{i,j}$, ανάλογα με το αν η συντεταγμένη ανήκει στο I ή το O . Για μία κατάσταση με πίνακα συνδιακύμανσης $\Gamma = \Gamma_x \oplus \Gamma_p$ η λογαριθμική αρνητικότητα είναι

$$E_N(\rho, I) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{|L|} \log_2 \max \{1, \lambda_k(\Gamma_p^{-1} F \Gamma_x^{-1} F)\}, \quad (2.7)$$

όπου με λ_k συμβολίζονται οι ιδιοτιμές. Η λογαριθμική αρνητικότητα έχει δύο σημαντικά στοιχεία. Σε μαθηματικό επίπεδο, η σημασία της $E_N(\rho, I)$ οφείλεται στο ότι

$$E_N(\rho, I) \geq S(\rho_I) \quad (2.8)$$

το οποίο ισχύει για όλες τις καθαρές καταστάσεις ρ . Ο συγκεκριμένος άνω φραγμός της εντροπίας εναγκαλισμού είναι απλούστερος στον υπολογισμό του, κάτι το οποίο καθιστά την μελέτη των κανόνων επιφάνειας δυνατή και για συστήματα περισσότερων διαστάσεων. Επίσης, σε αντίθεση με την εντροπία εναγκαλισμού, η αρνητικότητα αποτελεί μέτρο του εναγκαλισμού και για στατιστικά μείγματα. Σύμφωνα με την (2.8), για την εντροπία εναγκαλισμού μίας διχοτομημένης αλυσίδας θα ισχύει

$$S(\rho_I) \leq E_N(\rho_I) = \frac{1}{4} \log_2 \left(\frac{a+2|b|}{a-2|b|} \right) = \frac{1}{2} \log_2 \left(\frac{\|X\|^{1/2}}{\Delta E} \right), \quad (2.9)$$

όπου μέσω του b αποδίδεται η δύναμη σύζευξης και μέσω του a ο όρος της αντίστοιχης θέσης. Ο πίνακας $X = \text{circ}(a, b, 0, \dots, 0, b)$ και το ενεργειακό χάσμα πάνω από την θεμελιώδη κατάσταση $\Delta E = \lambda_{\min}^{1/2}(X)$. Η ποσοτικοποίηση του εναγκαλισμού σε συνάρτηση με την αρνητικότητα είναι ακριβής, ενώ η πιο πάνω σχέση είναι τελείως ανεξάρτητη από το μέγεθος του συστήματος N .

Σε αυτό το σημείο θα εξετάσουμε ένα αρκετά σημαντικό μοντέλο, στο οποίο το ενεργειακό χάσμα μηδενίζεται στο θερμοδυναμικό όριο όπου το N απειρίζεται. Για $a = m^2 + 2N^2$, $b = -N^2$ και θέτοντας στα πλεγματικά σημεία όπου $i = xN$ και ορίζοντας τους κανονικούς τελεστές $x_i = N^{-1/2} \varphi(x)$, $p_i = N^{-1/2} \pi(x)$, προκύπτει η Χαμιλτονιανή πεδίου Klein-Gordon

$$H = \frac{1}{2} \int_0^1 dx \left[\pi^2(x) + \left(\frac{\partial}{\partial x} \varphi(x) \right)^2 + m^2 \varphi^2(x) \right]. \quad (2.10)$$

Από την εξίσωση (2.9) για τον εναγκαλισμό προκύπτει ότι

$$E_N(\rho_I) = \frac{1}{4} \log_2 \left(1 + \frac{4N^2}{m^2} \right). \quad (2.11)$$

Σε αυτή την περίπτωση ο εναγκαλισμός δεν συγκλίνει αλλά αποκλίνει σύμφωνα με το μήκος της καταμημένης αλυσίδας.

2.1.2 Φερμιονικές αλυσίδες και το μοντέλο XY

Η διακύμανση της εντροπίας εναγκαλισμού σαν συνάρτηση του μεγέθους σχετίζεται με το αν το σύστημα είναι κβαντικά κρίσιμο ή όχι. Οι Χαμιλτονιανές των σχεδόν ελεύθερων φερμιονικών συστημάτων είναι της μορφής

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j \in L} (f_i^\dagger A_{i,j} f_j - f_i A_{i,j} f_j^\dagger + f_i B_{i,j} f_j - f_i^\dagger B_{i,j} f_j^\dagger), \quad (2.12)$$

όπου f_i, f_i^\dagger φερμιονικοί τελεστές και μπορούν να μελετηθούν με αναλυτικές τεχνικές αντίστοιχες με αυτές των μποζονίων. Ο τελεστής της εξίσωσης (2.12) θέλουμε να είναι ερμιτιανός οπότε για τους πίνακες A και B θα πρέπει να ισχύει $A^T = A$ και $B^T = -B$. Ο ρόλος των κανονικών συντεταγμένων προκύπτει μέσω των τελεστών Majorana $x_j = (f_j^\dagger + f_j)$ και $p_j = (f_j^\dagger - f_j)$, ενώ ο ρόλος των συμπλεκτικών μετασχηματισμών προκύπτει από τους αντίστοιχους ορθογώνιους. Το ενεργειακό χάσμα πάνω από την θεμελιώδη κατάσταση δίνεται από την μικρότερη μη μηδενική ιδιάζουσα τιμή του αθροίσματος $A+B$. Η μέση τιμή της θεμελιώδους κατάστασης είναι $\langle \cdot \rangle = \text{tr}[\cdot P_0] / q$, όπου η P_0 προβάλλεται πάνω στον τομέα της θεμελιώδους κατάστασης. Τότε όπως και στην περίπτωση των μποζονίων, η θεμελιώδης κατάσταση μπορεί να χαρακτηριστεί πλήρως μέσω του πίνακα συνδιακύμανσης με στοιχεία

$$-i \Gamma_{i,j} = \langle [r_i, r_j] \rangle = \langle r_i r_j \rangle - \langle r_j r_i \rangle, \quad (2.13)$$

όπου $r = (x_1, \dots, x_{|L|}, p_1, \dots, p_{|L|})$. Από τα πιο πάνω προκύπτει ότι

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 & -V \\ V^T & 0 \end{pmatrix}, \quad V = |A+B|^+(A+B), \quad (2.14)$$

όπου μέσω του $+$ υποδηλώνεται ο γενικευμένος αντίστροφος ενός πίνακα. Για μία μοναδική θεμελιώδη κατάσταση θα είναι $V = |A+B|^{-1}(A+B)$. Η εντροπία ενός συνεχούς φραγμού I φερμιονίων στην θεμελιώδη κατάσταση μέσω των ιδιαιζόντων ιδιοτιμών σ_κ του υποπίνακα V_I του V . Σε αυτή την περίπτωση θα είναι $S(\rho_I) = \sum_\kappa f(\sigma_\kappa)$, όπου

$$f(x) = -\frac{1-x}{2} \log_2 \left(\frac{1-x}{2} \right) - \frac{1+x}{2} \log_2 \left(\frac{1+x}{2} \right). \quad (2.15)$$

Σε αυτό το σημείο πρέπει να τονιστεί ότι τα φερμιονικά μοντέλα σχετίζονται άμεσα με αυτά των spin, όπως φαίνεται από τον μετασχηματισμό Jordan-Wigner

$$\sigma_i^z = 1 - 2 f_i^\dagger f_i, \quad \frac{\sigma_i^x + i \sigma_i^y}{2} = \prod_{k=1}^{i-1} (1 - 2 f_k^\dagger f_k) f_i, \quad (2.16)$$

όπου οι $\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z$ είναι οι τελεστές Pauli για κάθε θέση $i \in L$. Το φερμιονικό μοντέλο της (2.12) είναι ισοδύναμο με ένα μοντέλο spin με αλληλεπιδράσεις μικρής ή μεγάλης εμβέλειας. Το πιο σημαντικό μοντέλο από αυτά είναι το XY παρουσία ενός εγκάρσιου μαγνητικού πεδίου στο οποίο οι αλληλεπιδράσεις θα είναι μεταξύ των γειτόνων. Σε αυτή την περίπτωση παίρνουμε την σχέση

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i, j \rangle} \left(\frac{1+\gamma}{4} \sigma_i^x \sigma_j^x + \frac{1-\gamma}{4} \sigma_i^y \sigma_j^y \right) - \frac{\lambda}{2} \sum_{i \in L} \sigma_i^z, \quad (2.17)$$

όπου με το $\langle i, j \rangle$ συμβολίζεται το άθροισμα πάνω στους κοντινούς γείτονες, γ είναι ο παράγοντας ανισοτροπίας και λ το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Μέσω της μη μεταβλητότητας του μοντέλου αντιλαμβανόμαστε ότι το φάσμα μπορεί να υπολογιστεί μέσω ενός διακριτού μετασχηματισμού Fourier, άρα

$$E_k = \{[\lambda - \cos(2\pi k/N)]^2 + \gamma^2 \sin^2(2\pi k/N)\}^{1/2}, \quad (2.18)$$

για $k=1, \dots, N$. Κατά μήκος των γραμμών $|\lambda|=1$ και στο τμήμα $\gamma=0$, $|\lambda| \leq 1$, το σύστημα είναι σε κρίσιμο σημείο, $\lim_{N \rightarrow \infty} \Delta E(N) = 0$. Για όλα τα υπόλοιπα σημεία του επιπέδου (γ, λ) υπάρχει μία σταθερά $c > 0$ ανεξάρτητη από το N , τέτοια ώστε $\Delta E \geq c$. Οι περιπτώσεις για $\gamma=1$ είναι τα γνωστά μοντέλα Ising. Η πιο σημαντική περίπτωση είναι η ιστροπική των μοντέλων XY, τα οποία αναφέρονται ως μοντέλα XX κάτι το οποίο συμβαίνει όταν $\gamma=0$. Τα μοντέλα XX είναι σε κρίσιμη κατάσταση σε οποιοδήποτε σημείο για $|\lambda| \leq 1$.

Έστω ότι έχουμε μία μη εκφυλισμένη θεμελιώδη κατάσταση, τέτοια ώστε μέσω της εντροπίας εναγκαλισμού $S(\rho_l)$ να είναι εφικτή η ποσοτικοποίηση του εναγκαλισμού. Για ένα μεταγραφικά αναλλοίωτο σύστημα, οι τιμές $V_{i,j} = V_{i-j}$ του V θα είναι

$$V_l = \frac{1}{|L|} \sum_{k=1}^{|L|} g_k e^{2\pi i l k / |L|}, \quad g_k = \lambda_k \left(\frac{A+B}{|A+B|} \right). \quad (2.19)$$

Για $N=|L| \rightarrow \infty$ μπορούμε να γράψουμε την σχέση

$$V_l = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi g(\varphi) e^{i l \varphi}, \quad (2.20)$$

για $|l| \leq N/2$, όπου η $g: [0, 2\pi) \rightarrow \mathbb{C}$ ονομάζεται σύμβολο του V . Η επιφάνεια Fermi ορίζεται από τις ασυνέχειες του συμβόλου. Για να προσδιορίσουμε την εντροπία $S(\rho_l)$ θα πρέπει να γνωρίζουμε τις ιδιάζουσες τιμές των υποπινάκων $n \times n$ διαστάσεων $V_l = V_n$ του V . Στα ιστροπικά μοντέλα, ο V γίνεται συμμετρικός και οι ιδιάζουσες τιμές γίνονται ίσες με την απόλυτη τιμή των ιδιοτιμών. Για να γίνει πιο σαφής η δομή του εναγκαλισμού των υπο-φραγμών αυτών των συστημάτων, είναι απαραίτητη η κατανόηση των πινάκων που είναι της μορφής $T_{i,j} = T_{i-j}$. Αυτοί οι πίνακες ονομάζονται Toeplitz. Ένας πίνακας Toeplitz $n \times n$ διαστάσεων ορίζεται πλήρως από το σύνολο $2n-1$ T_l , όπου $l=1-n, \dots, n-1$.

Το φάσμα των τιμών $\lambda_1(T_n), \dots, \lambda_n(T_n)$ των T_n είναι οι ρίζες του χαρακτηριστικού πολυωνύμου

$$\det(T_n - \lambda \mathbf{1}) = \prod_{k=1}^n [\lambda_k(T_n) - \lambda]. \quad (2.21)$$

Συνεπώς, για τον προσδιορισμό της ασυμπτωτικής συμπεριφοράς του φάσματος των T_n είναι αρκετό να γνωρίζουμε την ασυμπτωτική συμπεριφορά της πιο πάνω ορίζουσας. Από την στιγμή όπου η g γραφτεί σε κανονική μορφή, τότε κάποιος μπορεί να ανιχνεύσει την ασυμπτωτική συμπεριφορά της ακολουθίας των οριζουσών Toeplitz. Επισημαίνεται ότι στην δική μας περίπτωση τον ρόλο των πινάκων T_n τον αναλαμβάνουν οι $V_n - z \mathbf{1}$.

Αυτή η μέθοδος χρησιμοποιήθηκε για τον υπολογισμό της ασυμπτωτικής συμπεριφοράς της εντροπίας των φραγμών για το μοντέλο XX και για άλλα ιστροπικά μοντέλα. Αυτό που παρατηρήθηκε (Jin και Korepin, 2004) είναι ότι υπάρχει μία μοναδική μεταπηδήση από το 1 στο -1 για το σύμβολο που ορίζει τους πίνακες Toeplitz, οπότε εμφανίζεται ο συντελεστής $1/3$ μπροστά από τον όρο $\log_2(n)$ στην σχέση για την εντροπία εναγκαλισμού του μοντέλου XX. Ο συντελεστής αυτός, σχετίζεται με το σύμμορφο φορτίο το οποίο εξετάζεται στην ομόνυμη θεωρία πεδίου. Στις γενικότερες περιπτώσεις των ιστροπικών μοντέλων, ο αριθμός των μεταπηδήσεων καθορίζει τον συντελεστή στην κλιμάκωση του εναγκαλισμού. Κατά συνέπεια σε αυτά τα σχεδόν ελεύθερα, ιστροπικά μοντέλα η σχέση μεταξύ της κρισιμότητας και της λογαριθμικής απόκλισης είναι ξεκάθαρη, καθώς αν δεν υφίσταται μία επιφάνεια Fermi (και κατ' επέκταση καθόλου μεταπηδήσεις), το σύστημα θα εμφανίζει χάσματα και θα είναι μη κρίσιμο. Σε αυτήν την περίπτωση η εντροπία θα καταρρέει σε μία σταθερά.

Στην αντίθετη περίπτωση όπου εμφανίζεται η επιφάνεια Fermi, θα υπάρξουν μεταπηδήσεις στο σύμβολο και το σύστημα θα είναι κρίσιμο, οπότε μπορεί να βρεθεί μία λογαριθμικά αποκλίνουσα εντροπία. Ο συντελεστής θα εξαρτάται από τον αριθμό των μεταπηδήσεων.

Έστω ότι έχουμε μία οικογένεια σχεδόν ελεύθερων, ιστροπικών, Χαμιλτονιανών για ένα σύστημα φερμιονίων, με περιοδικές συνοριακές συνθήκες και με $B=0$, όπως αυτή της εξίσωσης (2.12). Τότε η εντροπία εναγκαλισμού ενός φραγμού $I=\{1,\dots,n\}$ συνεχών spin, κλιμακώνεται σύμφωνα με την ακόλουθη σχέση

$$S(\rho_1) = \xi \log_2(n) + O(1), \quad (2.22)$$

όπου $\xi > 0$ μία σταθερά που εξαρτάται από τον αριθμό των μεταπηδήσεων. Για παράδειγμα στο μοντέλο XX η κλιμάκωση της εντροπίας θα καθορίζεται από την σχέση

$$S(\rho_1) = \frac{1}{3} \log_2(n) + O(1). \quad (2.23)$$

Για τον υπολογισμό των ιδιζόντων τιμών των πινάκων V στην ανιστροπική περίπτωση δεν είναι αρκετό να χρησιμοποιήσουμε σκέτους τους πίνακες Toeplitz, αλλά πρέπει να ορίσουμε μπλοκ τέτοιων πινάκων των οποίων τα στοιχεία θα είναι πίνακες 2×2 . Σε αυτή την περίπτωση μπορεί να βρεθεί η σύγκλιση της εντροπίας εναγκαλισμού, ενώ ο συντελεστής για τον κανόνα επιφάνειας μπορεί να υπολογιστεί ακριβώς στο μοντέλο XX. Έχει αποδειχθεί ότι η εντροπία εναγκαλισμού μπορεί να αποκλίνει λογαριθμικά σε ένα κρίσιμο (ανιστροπικό) μοντέλο Ising, σύμφωνα με την σχέση

$$S(\rho_1) = \Omega(\log_2 n), \quad (2.24)$$

όπου το Ω ορίζει ασυμπτωτικά ένα κατώτατο όριο το οποίο μπορεί να έχει αυτήν την συμπεριφορά. Το εφελτήριο για την εξαγωγή αυτού του αποτελέσματος ήταν το αποτέλεσμα της μελέτης των Eisert και Cramer (2005), ήταν το κατώτερο όριο που ορίστηκε μέσω της νόρμας του τελεστή ρ_I

$$\|\rho_I\|_\infty = -\log_2 \det[(\mathbf{1} + V_n)/2] \geq -\frac{1}{2} \log_2 |\det(V_n)|. \quad (2.25)$$

Από αυτό το σημείο και έπειτα, δεν χρειαζόμαστε τις ιδιάζουσες τιμές των V_n (κάτι το οποίο θα απαιτούσε την μελέτη μίας πολύπλοκης παράστασης με μπλοκ πινάκων Toeplitz). Αφού η απόλυτη τιμή της ορίζουσας προκύπτει μέσω του γινομένου των μέτρων των ιδιοτιμών, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την συνήθη μέθοδο Fisher-Hartwig προκειμένου να χειριστούμε ασυμπτωτικά τις ιδιοτιμές.

Άλλος ένας χρήσιμος τρόπος για τον υπολογισμό των φραγμών της εντροπίας εναγκαλισμού στα φερμιονικά συστήματα είναι μέσω των τετραγωνικών φραγμών στην συνάρτηση της εντροπίας. Από τους εν λόγω τετραγωνικούς φραγμούς, όπως βλέπουμε στην πιο κάτω σχέση, μπορούν να προκύψουν οι φραγμοί της συνάρτησης f που εμφανίζεται στην σχέση για την εντροπία μίας κατάστασης φερμιονίων (εξίσωση 13)

$$(1-x^2)^{1/2} \geq f(x) \geq 1-x^2. \quad (2.26)$$

Με βάση αυτό συνεπάγεται ότι ο φραγμός θα είναι της μορφής $\text{tr}[(\mathbf{1}-V_I V_I^T)^{1/2}] \geq S(\rho_I) \geq \text{tr}[\mathbf{1}-V_I V_I^T]$, όπου V_I είναι ο υποπίνακας του V που σχετίζεται με το εσωτερικό I . Ένας τρόπος με τον οποίο μπορούν να προκύψουν οι κανόνες επιφάνειας για συμμετρικά διχοτομημένες αλυσίδες η μέθοδος corner transfer matrix.

2.1.3 Γενικές περιπτώσεις τοπικών χασματικών μοντέλων spin

Σε αυτήν την ενότητα θα μελετηθούν τα χασματικά μοντέλα spin τοπικών αλληλεπιδράσεων και μίας διάστασης. Κάθε θέση σε αυτά τα μοντέλα μπορεί να υποστηρίξει ένα κβαντικό σύστημα d διαστάσεων, ενώ παράλληλα μπορεί να βρεθεί με ακρίβεια ένας κανόνας επιφάνειας. Καθώς η τιμή του d είναι αυθαίρετη μπορούμε να θεωρήσουμε Χαμιλτονιανές πάνω στην αλυσίδα $L=\{1,\dots,N\}$ οι οποίες προβλέπουν αλληλεπιδράσεις μόνο μεταξύ των κοντινών γειτόνων. Οι Χαμιλτονιανές αυτές είναι της μορφής

$$H = \sum_{j \in L} H_{j,j+1}, \quad (2.27)$$

όπου η $H_{j,j+1}$ υποστηρίζεται μόνο στις θέσεις j και $j+1$. Ταυτόχρονα επιβάλουμε έναν περιορισμό $\|H_{j,j+1}\| \leq J$ ώστε οι αλληλεπιδράσεις να είναι πεπερασμένες για κάποιο $J > 0$.

Κατά συνέπεια η εντροπία εναγκαλισμού για αυτές τις Χαμιλτονιανές, οι οποίες έχουν μία μοναδική θεμελιώδη κατάσταση και ένα φασματικό χάσμα ΔE στην πρώτη διεγερμένη, θα είναι

$$S(\rho_I) \leq S_{max} = c_0 \zeta \log(6\zeta) \log(d) 2^{6\zeta \log(d)}. \quad (2.28)$$

Στην πιο πάνω εξίσωση η $c_0 > 0$ είναι μία σταθερά και $\zeta = \max(2u/\Delta E, \zeta_c)$, όπου u η ταχύτητα του ήχου.

Σύμφωνα με το θεώρημα των Lieb-Robinson για τις Χαμιλτονιανές που έχουν την μορφή της (2.27), υπάρχει μία ταχύτητα του ήχου u και δύο σταθερές $\mu, c > 0$ τέτοιες ώστε για δύο τελεστές A και B οι οποίοι υποστηρίζονται μόνο από τα μη συνεχή σύνολα X και Y να ισχύει ότι

$$\|[A(t), B]\| \leq c \|A\| \|B\| \exp\{-\mu[\text{dist}(X, Y) - u|t|]\}. \quad (2.29)$$

Η απόσταση μεταξύ των συνόλων είναι $\text{dist}(X, Y) = \min_{i \in X, j \in Y} (|i - j|)$ και όπου

$$A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt}. \quad (2.30)$$

2.1.4 Αποτελέσματα από την θεωρία σύμμορφου πεδίου

Στα κρίσιμα μοντέλα τα μήκη συσχέτισης αποκλίνουν με αποτέλεσμα αυτά να παραμένουν αμετάβλητα στις κατά τόπους κλιμακώσεις. Το πιο πάνω γεγονός μας επιτρέπει να αναλύσουμε αυτά τα μοντέλα με βάση τις θεωρίες σύμμορφου πεδίου.

Σύμφωνα με την υπόθεση της καθολικότητας, διάφορες σημαντικές ιδιότητες παύουν να σχετίζονται με τις μικροσκοπικές λεπτομέρειες. Αυτές οι καθολικές ποσότητες εξαρτώνται μόνο από τις στοιχειώδεις ιδιότητες του συστήματος όπως την συμμετρία και τις χωρικές διαστάσεις. Τα μοντέλα που βασίζονται στην ίδια τάξη καθολικότητας χαρακτηρίζονται από τις ίδιες Χαμιλτονιανές σταθερού σημείου. Οι Χαμιλτονιανές αυτές υπόκεινται σε εκ νέου κανονικοποιήσεις, αλλά παραμένουν αμετάβλητες σε μετασχηματισμούς στροφής. Τα μοντέλα που περιγράφει η σύμμορφη θεωρία πεδίου έχουν την συμμετρία της ομώνυμης ομάδας (συμπεριλαμβανομένων των μεταφορών των περιστροφών και των κλιμακώσεων). Η τάξη της καθολικότητας περιγράφεται από ένα κεντρικό φορτίο c , το οποίο ποσοτικοποιεί κατά κάποιο τρόπο τους “βαθμούς ελευθερίας της θεωρίας”. Για τα ελεύθερα μποζόνια είναι $c=1$, ενώ για την τάξη της καθολικότητας του μοντέλου Ising είναι $c=1/2$.

Για τα μοντέλα που περιγράφονται από την σύμμορφη θεωρία πεδίου, υπάρχουν πολύ καλές μέθοδοι μέσω των οποίων μπορούν να υπολογιστούν οι καθολικές ιδιότητες αλλά και οι εντροπίες εναγκαλισμού των επιμέρους υποσυστημάτων.

Για την διεξαγωγή των υπολογισμών, παρατηρούμε ότι παρατηρούμε ότι οι δυνάμεις της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας ρ_I^n για κάθε θετικό ακέραιο n , μπορούν να προσδιοριστούν. Οι σειρές $tr[\rho_I^n] = \sum_j \lambda_j(\rho_I)^n$ συγκλίνουν και είναι αναλυτικές για κάθε $Re(n) > 2$. Η παράγωγος μπορεί να υπολογιστεί οπότε μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την σχέση

$$S(\rho_I) = \lim_{n \rightarrow 1} -\frac{1}{\ln 2} \frac{\partial}{\partial n} tr[\rho_I^n], \quad (2.31)$$

για να υπολογίσουμε την εντροπία εναγκαλισμού. Η πιο πάνω διαδικασία η οποία είναι γνωστή ως “το τρικ του αντίγραφου” οδηγεί για συστήματα 1+1 διαστάσεων στην έκφραση

$$S(\rho_I) = \frac{c}{3} \log_2(l/a) + O(1). \quad (2.32)$$

Στην πιο πάνω σχέση το c αντιστοιχεί στο κεντρικό φορτίο, με l συμβολίζεται το μήκος ενός διαστήματος που σχηματίζει μία περιοχή I και με a συμβολίζεται η αποκοπή υπερύθρου, η οποία ορίζει μία πλεγματική απόσταση. Οι εντροπίες Renyi για $a > 1$ είναι

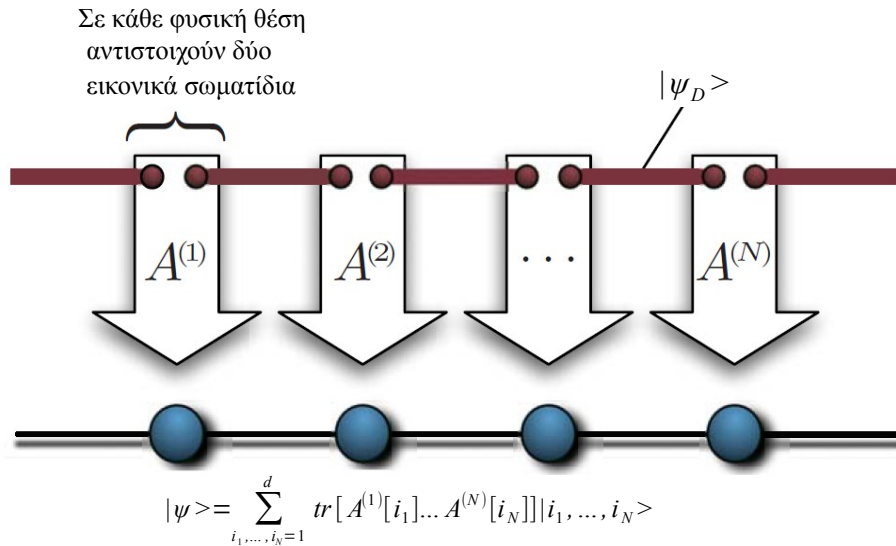
$$S_a(\rho_I) = \frac{c}{6} (1+1/a) \log_2(l/a) + O(1). \quad (2.33)$$

Στην περίπτωση όπου βρισκόμαστε κοντά στο κρίσιμο σημείο, όπου το μήκος συσχέτισης $\xi > 0$ είναι μεγάλο αλλά πεπερασμένο, μπορούμε να περιγράψουμε αρκετά καλά το σύστημα μέσω της θεωρίας σύμμορφου πεδίου. Η εντροπία εναγκαλισμού τείνει στην τιμή

$$S(\rho_I) \rightarrow \frac{c}{3} \log_2(\xi/a). \quad (2.34)$$

2.1.5 Καταστάσεις γινομένου πινάκων

Οι καταστάσεις γινομένου πινάκων (matrix product states) παίζουν καθοριστικό ρόλο στα πλαίσια των κανόνων επιφάνειας για την εντροπία εναγκαλισμού. Ουσιαστικά ορίζουν την κατηγορία των καταστάσεων που αποτελούν την βάση για τις προσομοιώσεις ισχυρά συσχετιζόμενων κβαντικών αλυσίδων. Οι καταστάσεις γινομένου πινάκων (εν συντομία MPS από εδώ και στο εξής), ορίζονται πάνω σε κβαντικές αλυσίδες αποτελούμενες από N θέσεις, κάθε μία εκ των οποίων συνιστά ένα σύστημα d σταθμών.



Σχήμα 2.2 Η απεικόνιση δεσμού-σθένους των καταστάσεων γινομένου πινάκων.

Ένας τρόπος για να δούμε των καταστάσεων MP είναι μέσω της απεικόνισης δεσμού-σθένους, όπου κάθε στοιχείο περιγράφεται από μία εικονική δομή δύο σωματιδίων. Κάθε θέση χώρου Hilbert \mathbb{C}^d , συνδέεται με έναν χώρο Hilbert $\mathbb{C}^D \otimes \mathbb{C}^D$, όπου με D συνήθως συμβολίζεται η διάσταση του χώρου συσχέτισης. Το D , κάποιες φορές συναντάται και ως *επικουρική* ή *εικονική διάσταση*. Στα εικονικά συστήματα D διαστάσεων ξεκινάμε από μία καθαρή κατάσταση που ορίζεται από το διάνυσμα $|\psi_D\rangle^{\otimes}$, όπου η μέγιστα εναγκαλισμένη κατάσταση είναι

$$|\psi_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{D}} \sum_{k=1}^D |k, k\rangle. \quad (2.35)$$

Εφαρμόζοντας μία τοπική γραμμική απεικόνιση σε κάθε ένα από τα ζεύγη των συστημάτων που συνδέονται με όλα τα στοιχεία του κέντρου της αλυσίδας, προκύπτει ότι

$$A^{(k)} = \sum_{j=1}^d \sum_{a, b=1}^D A_{a, b}^{(k)}[j] |j\rangle \langle a, b|, \quad (2.36)$$

όπου $k=1, \dots, N$. Για κάθε θέση $k \in L$ η συλλογή των μιγαδικών αριθμών $A_{a, b}^{(k)}[j]$ αντιστοιχεί στα στοιχεία των d πινάκων $A^{(k)}[1], \dots, A^{(k)}[d]$. Για μία κβαντική αλυσίδα spin με $d=2$, έχουμε δύο πίνακες $A^{(k)}[1], A^{(k)}[2]$ για κάθε θέση. Μέσω της πιο πάνω διαδικασίας προκύπτουν καταστάσεις της μορφής

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_N=1}^d \text{tr}[A^{(1)}[i_1] \dots A^{(N)}[i_N]] |i_1, \dots, i_N\rangle. \quad (2.37)$$

Για ανοιχτές συνοριακές συνθήκες σε μία αλυσίδα $L = \{1, \dots, N\}$, οι $A^{(1)}[i_1]$ και $A^{(N)}[i_N]$ αντιστοιχούν στα διανύσματα γραμμής και στήλης. Από τον τρόπο κατασκευής των καταστάσεων MP καταλαβαίνουμε ότι ικανοποιούν έναν κανόνα επιφάνειας. Πιο συγκεκριμένα, από τον ορισμό τους προκύπτει ότι

$$S(\rho_I) \leq 2 \log_2(D), \quad (2.38)$$

άρα η εντροπία είναι πάντα άνω φραγμένη από μία σταθερά στο N . Ως εκ τούτου, οι καταστάσεις MP έχουν εκ κατασκευής μία ιδιότητα κανόνων επιφάνειας. Όπως είδαμε νωρίτερα, οι θεμελιώδεις καταστάσεις διαφόρων Χαμιλτονιανών εμφανίζουν μία επιφανειακή κλιμάκωση όταν το σύστημα δεν είναι κρίσιμο και μία λογαριθμική απόκλιση όταν είναι κρίσιμο. Αυτό σημαίνει ότι οι καταστάσεις MP μπορούν να περιγράψουν τις θεμελιώδεις καταστάσεις μη κρίσιμων συστημάτων, κάτι το οποίο δεν ισχύει γενικά για τα κρίσιμα συστήματα.

2.1.6 Εναγκαλισμός μονού-αντιγράφου

Η εντροπία εναγκαλισμού μπορεί να ποσοτικοποιήσει τον εναγκαλισμό με ακρίβεια. Αυτό που μας ενδιαφέρει για τις καθαρές καταστάσεις, είναι ο ρυθμός με τον οποίο μπορούν να εξαχθούν όσο το δυνατόν περισσότερο εναγκαλισμένα ζεύγη από έναν αριθμό συστημάτων τα οποία έχουν προετοιμαστεί με πανομοιότυπο τρόπο (*distillable entanglement*).

Έστω D ένας ακέραιος μέσω του οποίου μπορούμε να μετατρέψουμε μία κατάσταση στην μέγιστα δυνατά εναγκαλισμένη κατάσταση $|\psi_D\rangle\langle\psi_D|$ μέσω τοπικών πράξεων, δηλαδή

$$\rho \rightarrow |\psi_D\rangle\langle\psi_D|. \quad (2.39)$$

Η πιο πάνω εξίσωση μπορεί να ισχύει αν και μόνο αν και μόνο αν $\|\rho_I\| \leq 1/D$, οπότε

$$E_1(\rho_I) = \log_2(\|\rho_I\|^{-1}). \quad (2.40)$$

Από αυτό καταλαβαίνουμε ότι η εντροπία εναγκαλισμού μπορεί να προκύψει από την εντροπία a -Renyi στο όριο για μεγάλες τιμές του a . Στα κρίσιμα συστήματα, η δομή του φάσματος μας οδηγεί στην λογαριθμική απόκλιση της εντροπίας εναγκαλισμού, ενώ η δομή του είναι τέτοια που διέπει όλες της εντροπίες Renyi. Για παράδειγμα, στα σχεδόν ελεύθερα μοντέλα από την στιγμή όπου η εντροπία εναγκαλισμού αποκλίνει, το ίδιο θα ισχύει και για τον εναγκαλισμό μονού αντιγράφου. Σε αυτή την περίπτωση εμφανίζεται ένας συντελεστής ο οποίος τείνει ασυμπτωτικά στο $1/2$ της τιμής της εντροπίας εναγκαλισμού.

Έστω ότι έχουμε μία οικογένεια σχεδόν ελεύθερων φερμιονικών Χαμιλτονιανών. Τότε αν η εντροπία εναγκαλισμού κλιμακώνεται σύμφωνα με την σχέση $S(\rho_I) = \xi \log_2(n) + O(1)$, για μία σταθερά $\xi > 0$, η κλιμάκωση του εναγκαλισμού μονού αντιγράφου θα προσδιορίζεται από την σχέση

$$E_1(\rho_I) = \frac{\xi}{2} \log_2(n) + O(1). \quad (2.41)$$

Αυτό σημαίνει ότι ακριβώς ο μισός εναγκαλισμός μπορεί να υπολογιστεί από μία μεμονωμένη κρίσιμη αλυσίδα.

2.2 Κανόνες επιφάνειας σε συστήματα υψηλότερων διαστάσεων

Αυτό που θα μας απασχολήσει σε αυτή την ενότητα είναι αν η εντροπία εναγκαλισμού μίας υποπεριοχής I , δεδομένης της θεμελιώδους κατάστασης, πληρεί κάποιον κανόνα επιφάνειας. Είναι αυτονόητο ότι και σε αυτή την περίπτωση οι εντροπικές ποσότητες κλιμακώνονται σύμφωνα με την συνοριακή επιφάνεια μίας υποπεριοχής. Αν και στην περίπτωση των σχεδόν ελεύθερων φερμιονικών ή μποζονικών μοντέλων έχει σημειωθεί αρκετή πρόοδος, ο τρόπος προσέγγισης του πιο πάνω ερωτήματος εξακολουθεί να είναι αρκετά πολύπλοκος. Οι δυσκολίες προκύπτουν στο σπάσιμο της μεταγραφικής συμμετρίας στα μεταγραφικά αμετάβλητα συστήματα, στην προσπάθεια

να διαχωριστεί μία υποπεριοχή. Οι πρώτοι κανόνες επιφάνειας προσδιορίστηκαν από τους Plenio et al. (2005), ενώ διατυπώθηκαν και κάποιες βελτιώσεις για τις αυθαίρετες αρμονικές αλληλεπιδράσεις από τους Cramer et al. (2006). Συνεπώς για τα εν λόγω ελεύθερα μποζονικά μοντέλα μπορούμε να πούμε ότι το πρόβλημα έχει γενικότερα λυθεί.

Στα κρίσιμα φερμιονικά μοντέλα (Barthel et al. 2006, Gioen και Klich 2006, Li et al. 2006, Wolf 2006, Cramer et al. 2007, Farkas και Zimboras 2007), έχουν παρατηρηθεί μικρές παραβιάσεις στους κανόνες επιφάνειας, καθώς προκειμένου να ικανοποιούνται οι τελευταίοι απαιτούνται κάποιες λογαριθμικές διορθώσεις. Με εξαίρεση τα σχεδόν ελεύθερα μοντέλα, δεν έχουν βρεθεί ακόμα ακριβή αποτελέσματα για άλλες καταστάσεις μηδενικής θερμοκρασίας, εκτός ίσως από αυτές που είναι κατασκευασμένες με τέτοιο τρόπο ώστε να ικανοποιούν έναν κανόνα επιφάνειας.

Για τα μοντέλα που θα εξετάσουμε παρακάτω (τοπικά και χασματικά) περιμένουμε να ισχύουν κάποιοι κανόνες επιφάνειας λόγω της κλίμακας μήκους που παρέχεται από το μήκος συσχέτισης.

2.2.1 Συνθήκες για έναν κανόνα επιφάνειας σε σχεδόν ελεύθερα μποζονικά και φερμιονικά μοντέλα

Για να προσεγγίσουμε αυτά τα μοντέλα θα ακολουθήσουμε την γενική περιγραφή των Cramer et al. (2006), βάση της οποίας το μοντέλο ορίζεται πάνω σε ένα γενικό πλέγμα L , το οποίο αποδίδεται μέσω ενός απλού γραφήματος. Θεωρούμε ένα σύνολο τετραγωνικών Χαμιλτονιανών μποζονίων (εξίσωση 2.4) και φερμιονίων (εξίσωση 2.12). Το πιο σημαντικό βήμα είναι η σύνδεση των συναρτήσεων συσχέτισης με εντροπικές ποσότητες. Όπως και στην περίπτωση των αρμονικών αλυσίδων, είναι γενικά πολύπλοκη η προσέγγιση αυτούσιας της εντροπίας εναγκαλισμού. Προκειμένου να ορίσουμε έναν άνω φραγμό στην εντροπία εναγκαλισμού θα χρησιμοποιήσουμε την λογαριθμική αρνητικότητα, της οποίας η αναλυτική αντιμετώπιση είναι πιο εύκολη καθώς ανά πάσα στιγμή μπορούμε να αναφερθούμε σε ολόκληρο το σύστημα αντί για τα επιμέρους υποσυστήματα I . Γενικά βρίσκουμε ότι η λογαριθμική αρνητικότητα είναι άνω φραγμένη από μία νόρμα L_1 ενός υποπίνακα του πίνακα συνδιακύμανσης (Plenio et al. 2005). Η εντροπία στα φερμιόνια φράσσεται κατευθείαν χρησιμοποιώντας τον φραγμό που ορίζει η εξίσωση (2.26).

Η εντροπία εναγκαλισμού των θεμελιωδών καταστάσεων των τετραγωνικών Χαμιλτονιανών των μποζονίων πρέπει να ικανοποιεί την σχέση

$$S(\rho_I) \leq E_N(\rho, I) \leq 8 \| \Gamma_x \| \sum_{i \in I, j \in O} | \langle p_i p_j \rangle |. \quad (2.42)$$

Η εντροπία εναγκαλισμού των θεμελιωδών καταστάσεων των φερμιονικών τετραγωνικών Χαμιλτονιανών ικανοποιεί την σχέση

$$S(\rho_I) \leq 2 \sum_{i \in I, j \in O} | \langle f_i^\dagger f_j \rangle + \langle f_i f_j \rangle |. \quad (2.43)$$

Αυτό είναι ένα κομβικό σημείο για τις βασικές αποδείξεις, καθώς ο υπολογισμός των εντροπικών ποσοτήτων ανάγεται στην καταμέτρηση όρων οι οποίοι προκύπτουν από την συσχέτιση μεταξύ δύο σημείων. Επισημαίνεται ότι τα αποτελέσματα της λογαριθμικής αρνητικότητας απλοποιούν σημαντικά το πρόβλημα.

Σε αυτό το σημείο είμαστε σε θέση να ορίσουμε το όριο της κλιμάκωσης του εναγκαλισμού των θεμελιωδών καταστάσεων στην περιοχή του φραγμού $s(I)$, μίας καθορισμένης περιοχής I (Cramer 2006, Cramer et al. 2006, Cramer και Eisert 2006).

Έστω $\eta = D+1+2\varepsilon$, $\varepsilon > 0$, η θεμελιώδης κατάσταση είναι μοναδική και ικανοποιεί τις συνθήκες $i, j \in L, i \neq j$ και K_0 μία σταθερά, όπου

$$\frac{K_0}{\text{dist}^n(i, j)} \geq \begin{cases} |\langle p_i p_j \rangle| & \text{για τα μποζόνια} \\ |\langle f_i^\dagger f_j \rangle + \langle f_i f_j \rangle| & \text{για τα φερμιόνια.} \end{cases} \quad (2.44)$$

Τότε θα είναι

$$S(\rho_I) \geq K_0 c_D \zeta(1+\varepsilon) s(I) \times \begin{cases} \| \Gamma_x \| & \text{για τα μποζόνια} \\ 1 & \text{για τα φερμιόνια,} \end{cases} \quad (2.45)$$

όπου ζ η συνάρτηση ζήτα του Riemann και c_D μία σταθερά που εξαρτάται από την διάσταση του πλέγματος. Στα χασματικά μοντέλα, οι συναρτήσεις συσχέτισης φθίνουν εκθετικά. Η εφαρμογή του θεωρήματος Lieb-Robinson σε αυτή την περίπτωση δεν είναι εφικτή, καθώς οι τελεστές που συμμετέχουν δεν είναι φραγμένοι. Αυτό οδήγησε στην ανάγκη να αναπτυχθεί μία τεχνική για την περιγραφή της ομαδοποίησης των συσχετισμών σε αυτά τα μοντέλα. Για γενικά πλέγματα και χασματικές τετραγωνικές Χαμιλτονιανές μποζονίων και φερμιονίων έχει αποδειχθεί ότι οι συναρτήσεις συσχετισμού δύο σημείων φθίνουν εκθετικά, οπότε αυτό σε συνδυασμό με το θεώρημα του Bernstein μπορεί να οδηγήσει στην εμφάνιση ενός κανόνα επιφάνειας.

2.2.2 Λογαριθμικές διορθώσεις σε κανόνες επιφάνειας για τα κρίσιμα φερμιόνια

Αυτό που θα μας απασχολήσει σε αυτό το σημείο είναι το πως μεταβάλλεται η κλιμάκωση της εντροπίας στην περίπτωση των κρίσιμων φερμιονικών μοντέλων. Η εντροπία εναγκαλισμού για τα φερμιονικά μοντέλα μελετήθηκε για πρώτη φορά από τον Wolf (2006) για τα κυβικά πλέγματα. Το τετραγωνικό όριο στην εξίσωση (2.26) παίζει σημαντικό ρόλο καθώς σχετίζει τα όρια της εντροπίας με τον πίνακα συνδιακύμανσης για την θεμελιώδη κατάσταση.

Για ένα κυβικό υποπλέγμα $I = \{1, \dots, n\}^{\times D}$ και για ένα ισοτροπικό σχεδόν ελεύθερο μοντέλο όπως αυτό της εξίσωσης (2.12) με μία θάλασσα Fermi πεπερασμένης και μη μηδενικής επιφάνειας, υπάρχουν σταθερές $c_0, c_1 > 0$ τέτοιες ώστε η θεμελιώδης κατάσταση να πληρεί την συνθήκη

$$c_0 n^{D-1} \log_2(n) \leq S(\rho_I) \leq c_1 n^{D-1} \log_2^2(n). \quad (2.46)$$

Είναι πολύ ενδιαφέρον το γεγονός ότι τα κρίσιμα φερμιόνια δεν ικανοποιούν κάποιον κανόνα επιφάνειας, αλλά παρουσιάζουν λογαριθμικές διορθώσεις. Υπό αυτή την έννοια τα κρίσιμα φερμιονικά μοντέλα φαίνεται να είναι περισσότερο εναγκαλισμένα από τα αντίστοιχα μποζονικά.

2.2.3 Διαφορές μεταξύ των κρίσιμων φερμιονίων και μποζονίων: Ημιχώροι

Η κλιμάκωση των εντροπιών για τα μποζόνια και τα φερμιόνια σε υψηλότερες χωρικές διαστάσεις εμφανίζει αξιοσημείωτες διαφορές. Έστω ότι έχουμε ένα κυβικό πλέγμα n^D θέσεων με περιοδικές συνοριακές συνθήκες και $I = \{1, \dots, m\} \times \{1, \dots, n\}^{\times D-1}$. Τότε μπορούμε να μετασχηματίσουμε την Χαμιλτονιανή σε ένα σύστημα μη συζευγμένων μονοδιάστατων αλυσίδων μέσω ενός διακριτού μετασχηματισμού Fourier. Αφού ολοκληρωθεί αυτή η διαδικασία, ο εναγκαλισμός μεταξύ του I και του O δίνεται από το άθροισμα του εναγκαλισμού μεταξύ των θέσεων $I' = \{1, \dots, m\}$ και $O' = \{m+1, \dots, n\}$ των n^{D-1} αλυσίδων

$$\frac{S(\rho_I)}{s(I)} = \frac{1}{n^{D-1}} \sum_{i=1}^{n^{D-1}} S(\rho_{I'}^i). \quad (2.47)$$

Ασυμπτωτικά, στο όριο $n \rightarrow \infty$ η εντροπία εναγκαλισμού των φερμιονικών ισοτροπικών μοντέλων στους ημιχώρους ικανοποιεί την σχέση

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{S(\rho_I)}{s(I)} = \frac{\log_2(m)}{6} \sum_{s=1}^{\infty} s u_s + O(1). \quad (2.48)$$

Στην πιο πάνω σχέση

$$u_s = \frac{|\{\varphi \in [0, 2\pi)^{D-1} | \sigma(\varphi) = s\}|}{(2\pi)^{D-1}} \quad (2.49)$$

είναι το ολοκλήρωμα πάνω στις ανεξάρτητες αλυσίδες φ με s ασυνέχειες της μορφής $\sigma(\varphi)$. Σε αυτό το σημείο συναντάμε μία λογαριθμική απόκλιση της εντροπίας εναγκαλισμού στο m και ο συντελεστής εξαρτάται από την τοπολογία της επιφάνειας Fermi. Αν η επιφάνεια Fermi έχει μηδενικό μέτρο τότε $u_s = 0$ και για το σύστημα ισχύει ο κανόνας επιφάνειας.

Στα μποζόνια θα μελετήσουμε την περίπτωση όπου $m=n/2$ για την Χαμιλτονιανή Klein-Gordon (εξίσωση 2.10). Με την ολοκλήρωση του μετασχηματισμού των ασύζευκτων αλυσίδων, εμφανίζονται Χαμιλτονιανές οι οποίες εμπεριέχουν τον πίνακα σύζευξης κοντινών γειτόνων X , οπότε προκύπτει το αποτέλεσμα

$$\frac{E_N(\rho_I)}{s(I)} = \int \frac{d\varphi}{4(2\pi)^{D-1}} \log_2 \left(\frac{D - \sum_{d=1}^{d-1} \cos(\varphi_d) + 1}{D - \sum_{d=1}^{d-1} \cos(\varphi_d) - 1} \right) \quad (2.50)$$

Στο όριο $n \rightarrow \infty$. Αυτή η έκφραση είναι ανεξάρτητη της μάζας m και πεπερασμένη. Σε αντίθεση με τα συστήματα φερμιονίων, στην περίπτωση που εξετάζουμε ισχύει ένας κανόνας επιφάνειας ανεξάρτητα από το αν το σύστημα είναι κρίσιμο. Από τα πιο πάνω συμπεραίνουμε ότι αυτό που παίζει καθοριστικό ρόλο είναι ο τύπος των σωματιδίων που συνθέτουν το προς μελέτη σύστημα και όχι η κατάσταση στην οποία βρίσκεται.

2.2.4 Ο εναγκαλισμός σε θερμικές καταστάσεις μποζονίων

Σε αυτή την ενότητα θα εξετάσουμε τους κανόνες επιφάνειας για τον εναγκαλισμό στις καταστάσεις Gibbs,

$$\rho_\beta = \frac{\exp(-\beta H)}{\text{tr}[\exp(-\beta H)]} \quad (2.51)$$

Για μία αντίστροφη θερμοκρασία $\beta > 0$. Ο πίνακας συνδιακύμανσης θα είναι $\Gamma = \Gamma_x \oplus \Gamma_p$, όπου

$$\Gamma_x = X^{-1/2} (X^{1/2} P X^{1/2})^{1/2} (\mathbf{1} + G) X^{-1/2},$$

$$\Gamma_p = X^{1/2} (X^{1/2} P X^{1/2})^{-1/2} (\mathbf{1} + G) X^{1/2},$$

$$G = 2 \{ \exp[\beta (X^{1/2} P X^{1/2})^{1/2}] - 1 \}.$$

Χρησιμοποιώντας τις μεθόδους των Benzi και Golub (1999) και των Cramer και Eisert (2006) μπορούμε να βρούμε την κατάλληλη μείωση των συσχετισμών η οποία μπορεί να οδηγήσει σε έναν κανόνα επιφάνειας για τον εναγκαλισμό. Το αποτέλεσμα αποδίδεται (Cramer et al. 2006) μέσω της λογαριθμικής αρνητικότητας. Η λογαριθμική αρνητικότητα των θερμικών καταστάσεων που προκύπτουν από τετραγωνικές Χαμιλτονιανές μποζονίων για $[X, P] = 0$, θα πρέπει να ικανοποιεί την σχέση $E_N(\rho_I) \leq \xi s(I)$ για μία σταθερά $\xi > 0$.

Είναι σημαντικό να τονιστεί ότι μίας υποπεριοχής δεν ποσοτικοποιεί πλέον τον εναγκαλισμό μεταξύ της τελευταίας και του υπόλοιπου πλέγματος.

2.2.5 Καταστάσεις που ικανοποιούν κανόνες επιφάνειας εκ κατασκευής: Καταστάσεις προβαλλόμενων εναγκαλισμένων ζευγών, καταστάσεις που παριστάνονται με γραφήματα και η επανακανονικοποίηση του εναγκαλισμού

Σε αυτή την ενότητα θα εξετάσουμε τις καταστάσεις για τις οποίες ισχύει κάποιος κανόνας επιφάνειας από την στιγμή που κατασκευάζονται. Αυτές είναι καταστάσεις προβαλλόμενων εναγκαλισμένων ζευγών, δηλαδή καταστάσεις γινομένου πινάκων σε υψηλότερες διαστάσεις και καταστάσεις που προκύπτουν από την επανακανονικοποίηση του εναγκαλισμού. Αυτές οι καταστάσεις έχουν σχεδιαστεί με τέτοιο τρόπο ώστε να προσεγγίζουν πραγματικές καταστάσεις τοπικών συστημάτων πολλών σωματιδίων. Η κατασκευή των καταστάσεων προβαλλόμενων ζευγών μοιάζει με αυτή των καταστάσεων MP σε κυβικά πλέγματα υψηλότερων διαστάσεων

$L = \{1, \dots, N\}^{\times D}$, ή γενικά σε πλέγματα που ορίζονται από ένα απλό γράφημα της μορφής $G(L, E)$. Σε αυτή την περίπτωση πρέπει να συσχετίσουμε έναν φυσικό χώρο με έναν χώρο Hilbert \mathbb{C}^d για κάθε μία από τις κορυφές L του G . Τότε ένα μέγιστα εναγκαλισμένο ζεύγος διάστασης $D \times D$ (όπου D κάποιος θετικός ακέραιος) τοποθετείται μεταξύ δύο κορυφών συνδεδεμένων μέσω μίας άκρης $e \in E$. Για το κυβικό πλέγμα ξεκινάμε από ένα κυβικό δίκτυο πλήρως εναγκαλισμένων καταστάσεων και εφαρμόζουμε μία γραμμική απεικόνιση $P^{(k)}: \mathbb{C}^D \otimes \dots \otimes \mathbb{C}^D \rightarrow \mathbb{C}^d$ για κάθε φυσική θέση ως ακολούθως

$$P^{(k)} = \sum_{j=1}^d \sum_{i_1, \dots, i_{|S_1(k)|}}^D A_{j, i_1, \dots, i_{|S_1(k)|}}^{(k)} |j\rangle \langle i_1, \dots, i_{|S_1(k)|}|. \quad (2.52)$$

Στην πιο πάνω σχέση η ποσότητα $|S_1(k)|$ αντιστοιχεί στον βαθμό της κορυφής $k \in L$. Η κατάσταση που προκύπτει από την παραπάνω διαδικασία είναι της μορφής

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_{|L|}=1}^d C[\{A_{il}^{(k)}\}_l] |i_1, i_2, \dots, i_{|L|}\rangle, \quad (2.53)$$

όπου C η συναίρεση των τανυστών υψηλότερης τάξης σε συνάρτηση με τις κορυφές E του γραφήματος. Οι $A^{(k)}$ είναι τανυστές των οποίων η τάξη αντιστοιχεί στον βαθμό της κορυφής του πλέγματος (π.χ. για μία μονοδιάστατη αλυσίδα θα είναι ένας τανυστής δεύτερης τάξης, για τα εξαγωνικά πλέγματα θα είναι τανυστής τρίτης τάξης, για τα κυβικά πλέγματα με $D=2$ θα είναι τανυστής τέταρτης τάξης κ.ο.κ.). Αυτή η κατασκευή είναι το φυσικό ανάλογο της κατασκευής του δεσμού σθένους για τις καταστάσεις γινομένου πινάκων.

Αυτή η κατηγορία των καταστάσεων είναι πλήρης, αφού κάθε κατάσταση ενός δεδομένου πεπερασμένου πλέγματος μπορεί να προσδιοριστεί με μεγάλη ακρίβεια χρησιμοποιώντας μία από αυτές.

2.2.6 Η τοπολογική εντροπία εναγκαλισμού

Η τοπολογική εντροπία εναγκαλισμού είναι μία ποσότητα που κατασκευάζεται με τέτοιο τρόπο ώστε να μπορεί να χαρακτηρίσει κβαντικές καταστάσεις πολλών σωματιδίων οι οποίες παρουσιάζουν τοπολογική τάξη. Εκατέρωθεν του κρίσιμου σημείου ενός συστήματος στο οποίο λαμβάνει χώρα μία κβαντική μεταβολή φάσης, το εν λόγω σύστημα μπορεί να έχει διαφορετικό είδος κβαντικής τάξης η οποία όμως δεν χαρακτηρίζεται απαραίτητα από μία τοπική παράμετρο τάξης. Η τοπολογική τάξη γίνεται αισθητή μέσω του εκφυλισμού της πολλαπλότητας της θεμελιώδους κατάστασης η οποία εξαρτάται από την τοπολογία όλου του συστήματος και τις διεγέρσεις των οιονεί σωματιδίων. Αυτά τα χαρακτηριστικά αποδίδουν μεγάλο ενδιαφέρον στα εν λόγω συστήματα στον τομέα των κβαντικών υπολογισμών, αφού εκμεταλλευόμενοι κατάλληλα τον εκφυλισμό μπορούμε να κατασκευάσουμε κβαντικές μνήμες οι οποίες θα είναι ανθεκτικές στις κατά τόπους διακυμάνσεις. Η τοπολογική εντροπία εναγκαλισμού αποτελεί πλέον ένα εργαλείο μέσω του οποίου μπορούν να ανιχνευτούν τέτοιες τοπολογικές τάξεις.

Μεγάλο ενδιαφέρον παρουσιάζει η δουλειά των Kitaev και Preskill (2006) οι οποίοι εξέτασαν την περίπτωση ενός δίσκου στο επίπεδο I ο οποίος φράσσεται από ένα όριο μήκους L . Αυτός ο δίσκος είναι πολύ μεγαλύτερος από το μήκος συσχέτισης, οπότε μπορούμε να υποθέσουμε ότι ισχύει ένας κανόνας επιφάνειας. Η εντροπία εναγκαλισμού της ρ_I θα έχει την μορφή

$$S(\rho_I) = aL - \gamma + O(1), \quad (2.54)$$

όπου ο τελευταίος όρος μηδενίζεται στο όριο $L \rightarrow \infty$. Ο συντελεστής a είναι μη καθολικός ενώ η σταθερά $\gamma > 0$ είναι και προσδιορίζει ένα καθολικό χαρακτηριστικό του εναγκαλισμού της θεμελιώδους κατάστασης. Αυτή η ποσότητα αναφέρεται ως τοπολογική εντροπία εναγκαλισμού. Για την αποφυγή σύγχυσης κατά τον διαχωρισμό του σταθερού όρου από τον γραμμικό στην (2.54), το επίπεδο χωρίζεται σε τέσσερις περιοχές όπου το μέγεθος της κάθε μίας είναι συγκρίσιμο με το μήκος συσχέτισης. Η A, η B και η C τοποθετούνται σε γειτονικές θέσεις στις 3 πανομοιότυπες περιοχές που ορίζουν τον δίσκο, ενώ η D αποτελεί το εξωτερικό του δίσκου. Οι αντίστοιχες αναγωγές συμβολίζονται με ρ_A για την περιοχή A και ρ_{AB} για την από κοινού περιοχή των A και B. Τότε η τοπολογική εντροπία εναγκαλισμού ορίζεται ως

$$S_{\text{τοπο}} = S(\rho_A) + S(\rho_B) + S(\rho_C) - S(\rho_{AB}) - S(\rho_{BC}) - S(\rho_{AC}) + S(\rho_{ABC}). \quad (2.55)$$

Αυτός είναι ένας γραμμικός συνδυασμός των επιμέρους εντροπιών, ο οποίος κατασκευάζεται με τέτοιο τρόπο ώστε οι εξαρτήσεις από το μήκος των επιμέρους συνόρων των περιοχών να μηδενίζονται. Παράλληλα για την ίδια περίπτωση είναι αποδεκτοί διαφορετικοί ορισμοί οι οποίοι όμως έχουν σαν αποτέλεσμα παρεμφερείς ιδιότητες. Πράγματι οι Levin και Wen (2006) πρότειναν έναν διαφορετικό συνδυασμό εντροπιών. Η πτυχή που παρουσιάζει ενδιαφέρον και εδώ είναι ο μηδενισμός των πιο πάνω εξαρτήσεων των συνοριακών όρων. Θεωρώντας κάποιος δεδομένη την συμπεριφορά της σχέσης (2.54) καταλήγει στο συμπέρασμα

$$S_{\text{τοπο}} = -\gamma. \quad (2.56)$$

Η $S_{\text{τοπο}}$ είναι εκ κατασκευής τοπολογικά αμετάβλητη και εξαρτάται μόνο από μία καθολική ποσότητα (αναλλοίωτη κάτω από ομαλές παραμορφώσεις και μακριά από τα κρίσιμα σημεία) και από το πως είναι τοποθετημένες οι περιοχές μεταξύ τους. Η γεωμετρία των περιοχών δεν μας ενδιαφέρει, δεδομένου ότι το μήκος συσχέτισης είναι πολύ μικρότερο από τις περιοχές οπότε θεωρείται αμελητέο. Συνεπώς η τοπολογική τάξη είναι μία καθολική ιδιότητα η οποία εντοπίζεται μέσω της εντροπίας εναγκαλισμού. Η πιο πάνω κατασκευή μπορεί να χρησιμοποιηθεί και σε αριθμητικούς υπολογισμούς.

Ο ακριβής υπολογισμός για το πώς η εντροπία εναγκαλισμού εντοπίζει την παρουσία τοπολογικής τάξης σε ένα πραγματικό χρονοανεξάρτητο μοντέλο, στο οποίο λαμβάνει χώρα μία κβαντική μεταβολή φάσης μελετήθηκε συστηματικά από τους Hamma et al. Πιο συγκεκριμένα η μεταβολή ήταν από μία φάση πολωμένου spin σε μία φάση τοπολογικής τάξης.

Για την μελέτη αυτών των ποσοτήτων μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την κατάσταση toric code του Kitaev (2003). Έστω ότι έχουμε το τετραγωνικό πλέγμα $I = \{1, \dots, n\}^{\times 2}$ με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στις κορυφές του οποίου τοποθετούμε κβαντικά spin δύο διαστάσεων. Το πλέγμα αυτό χωρίζεται σε δύο υποπλέγματα διαφορετικών χρωμάτων, έστω κόκκινο και άσπρο. Το λευκό και κόκκινο υποπλέγμα p και s αντίστοιχα συνδέεται με έναν από τους μετατιθέμενους τελεστές

$$A_s = \prod_{j \in \partial s} \sigma_j^z, \quad B_p = \prod_{j \in \partial p} \sigma_j^x, \quad (2.57)$$

αντίστοιχα όπου όπως και πριν οι σ_i^x , σ_i^y και σ_i^z συμβολίζουν τους πίνακες του Pauli. Τότε η Χαμιλτονιανή του συστήματος θα είναι

$$H = -\sum_s A_s - \sum_p B_p. \quad (2.58)$$

Για κάθε κλειστή διαδρομή g , ο τελεστής $\prod_{j \in g} \sigma_j^z$ μετατίθεται με όλους τους τελεστές της εξίσωσης (2.57). Η πολλαπλότητα της θεμελιώδους κατάστασης εξαρτάται από την τοπολογία του πλέγματος και στην περίπτωση που εξετάζουμε είναι τετραπλά εκφυλισμένη. Κατά τον υπολογισμό της τοπολογικής εντροπίας εναγκαλισμού για την κατάσταση toric code προκύπτει ότι $\gamma = \log(2)$.

Ένα αρκετά σημαντικό μοντέλο είναι αυτό του κυψελοειδούς πλέγματος που προτάθηκε από τον Kitaev το 2003. Σε αυτό το μοντέλο, η θεμελιώδης κατάσταση μπορεί να περιγραφεί μέσω απλών δικτύων τανυστών. Οι εντροπίες εναγκαλισμού τοπολογικών χρωματικών κωδικών μελετήθηκαν το 2008 από τον Kargarian και τους Bombin και Martin-Delgado.

2.3 Κανόνες επιφάνειας για κλασσικά συστήματα

2.3.1 Κλασσικά αρμονικά συστήματα

Μέχρι στιγμής έχουμε ασχοληθεί μόνο με την περίπτωση κλασσικών συστημάτων πάνω σε κάποιο πλέγμα. Αυτό που θα εξετάσουμε, είναι τι συμβαίνει αν έχουμε ένα κλασσικό σύστημα πάνω σε ένα πλέγμα και αν για αυτό ισχύει κάποιος κανόνας επιφάνειας. Προφανώς σε αυτό το σημείο η έννοια του εναγκαλισμού δεν έχει κάποιο νόημα. Επίσης η εντροπία Shannon μίας οριακής κατανομής μία καθορισμένης περιοχής I δεν μπορεί να ποσοτικοποιήσει συσχετισμούς με κάποια λογική διαδικασία.

Δεδομένης μίας κατανομής πιθανότητας p στο πλέγμα L , είναι εφικτή η ποσοτικοποίηση των συσχετισμών μεταξύ των οριακών κατανομών σε συνάρτηση με την καθορισμένη περιοχή I και την συμπληρωματική της O , μέσω της αμοιβαίας πληροφορίας. Από αυτό μπορούμε να αντιληφθούμε την ποσότητα της πληροφορίας που μπορούμε να αντλήσουμε από την O κάνοντας μετρήσεις στην I και το αντίστροφο. Η αμοιβαία πληροφορία είναι πάντα θετική -δεν μπορούν να υπάρξουν αρνητικοί συσχετισμοί- ενώ μηδενίζεται κάτω από πολύ συγκεκριμένες συνθήκες. Δεδομένων των οριακών κατανομών p_I και p_O της κατανομής πιθανότητας p στο I και το O , η αμοιβαία πληροφορία ορίζεται από την σχέση

$$I(I:O) = S(p_I) + S(p_O) - S(p), \quad (2.59)$$

όπου $S(p) = -\sum_j p_j \log_2(p_j)$ είναι η εντροπία Shannon. Σε αυτό το σημείο επισημαίνεται ότι το παράδοξο του Gibbs δεν επηρεάζει την αμοιβαία πληροφορία. Πιο κάτω θα δούμε τον τρόπο με τον οποίο κλιμακώνεται η αμοιβαία πληροφορία σύμφωνα με το μέγεθος μίας περιοχής, ενός αρμονικά συζευγμένου κλασσικού συστήματος. Έστω ότι έχουμε το κλασσικό αρμονικό πλεγματοκό σύστημα με Χαμιλτονιανή

$$H = \frac{1}{2} \left(\sum_{j \in L} p_j^2 + \sum_{j,k \in L} x_j V_{j,k} x_k \right), \quad (2.60)$$

όπου $x = (x_1, \dots, x_N)$ και $p = (p_1, \dots, p_N)$ είναι τα διανύσματα θέσης και ορμής των κλασσικών ταλαντωτών που είναι διατεταγμένοι σε ένα κυβικό πλέγμα $L = \{1, \dots, N\}^{\times D}$. Οι συντεταγμένες του χώρου των φάσεων θα είναι $\xi = (x, p)$. Ο πίνακας $V \in \mathbb{R}^{|L| \times |L|}$ του οποίου το εύρος είναι πεπερασμένο, ορίζει τις αλληλεπιδράσεις. Η κατάσταση του συστήματος ορίζεται από την πυκνότητα του χώρου των φάσεων, άρα για κάθε μη μηδενική αντίστροφη θερμοκρασία $\beta > 0$, η κατανομή του χώρου των φάσεων δίνεται από την σχέση

$$\rho_\beta(\xi) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(\xi)}, \quad \text{όπου } Z = \int d\xi e^{-\beta H(\xi)}. \quad (2.61)$$

Για να ορίσουμε την αμοιβαία πληροφορία θα ακολουθήσουμε μία τετριμμένη διαδικασία, βάση της οποίας θα χωρίσουμε τον χώρο των φάσεων σε κυβικά κελιά, όγκου h^{2N^D} όπου $h > 0$ μία σταθερά. Από την πυκνότητα του χώρου των φάσεων μπορούμε να προσδιορίσουμε την διακριτή κατανομή πιθανότητας, μέσω της μέσης τιμής της πυκνότητας του χώρου των φάσεων πάνω σε αυτά τα κελιά, $p_j = \int_{\text{cell}} d\xi \rho(\xi)$ για $j \in L$. Η διακριτή κλασσική εντροπία ορίζεται από την εντροπία Shannon αυτής της κατανομής πιθανότητας από την σχέση

$$S_C(h) = -\sum_{j \in L} p_j \log_2(p_j). \quad (2.62)$$

Σε αυτό το σημείο επιστρέφουμε στην περίπτωση του συστήματος με εσωτερική περιοχή I και εξωτερική O . Οι αντίστοιχες κλασσικές διακριτές εντροπίες ορίζονται ως $S_I(h)$ και $S_O(h)$. Οι τιμές αυτών των εντροπιών εξαρτώνται προφανώς από την τιμή του h και στο όριο $h \rightarrow 0$ αποκλίνουν λογαριθμικά. Η πιο πάνω παρατήρηση είναι οικεία στα πλαίσια της κλασσικής στατιστικής θερμοδυναμικής, αφού η απόκλιση αναλύεται μέσω του τρίτου θερμοδυναμικού νόμου. Η κλασσική αμοιβαία πληροφορία ενός αρμονικού πλεγματοκό συστήματος ορίζεται ως $I(I:O) = \lim_{h \rightarrow 0} [S_I(h) + S_O(h) - S_C(h)]$. Σε αυτό το σημείο είμαστε σε θέση να διατυπώσουμε έναν κανόνα επιφάνειας για τα κλασσικά αρμονικά συστήματα.

Έστω ότι έχουμε ένα πλεγματοκό αρμονικό σύστημα με Χαμιλτονιανή αυτή της εξίσωσης (2.60) σε ένα γενικό πλέγμα $G = (L, E)$. Τότε η κλασσική αμοιβαία πληροφορία $I(I:O)$ της κατάστασης Gibbs, ικανοποιεί για κάποια θερμοκρασία $\beta > 0$ έναν κανόνα επιφάνειας

$$I(I:O) = O(s(I)). \quad (2.63)$$

2.3.2 Κλασσικοί συσχετισμοί σε κβαντικά μοντέλα spin

Η περίπτωση των συστημάτων πεπερασμένων διαστάσεων είναι ακόμα πιο απλή. Σε αντίθεση με την πολυπλοκότητα για την εξαγωγή ενός κανόνα επιφάνειας για τα συστήματα υψηλότερων διαστάσεων, σε αυτή την περίπτωση τα μαθηματικά που απαιτούνται είναι στοιχειώδη. Αποδεχόμενοι μία απλή παραδοχή μπορούμε να δούμε ότι οι συνολικοί συσχετισμοί στα κβαντικά

(και τα κλασσικά) συστήματα σε μη μηδενικές θερμοκρασίες ικανοποιούν πάντα έναν κανόνα επιφάνειας. Η σχετική ποσότητα που προσδιορίζει του συσχετισμούς είναι πάλι η αμοιβαία πληροφορία

$$I(I:O) = S(\rho_I) + S(\rho_O) - S(\rho), \quad (2.64)$$

όπου το S αντιστοιχεί είτε στην κβαντική εντροπία von Neumann, ή στην εντροπία Shannon της κατανομής πιθανότητας.

Έστω ότι έχουμε ένα σύστημα (κλασσικό ή κβαντικό) πεπερασμένων διαστάσεων d το οποίο ορίζεται σε ένα μεταγραφικά αμετάβλητο πλέγμα $G=(L, E)$. Έστω ότι έχουμε την κατάσταση Gibbs μίας τοπικής Χαμιλτονιανής σε κάποια θερμοκρασία $\beta > 0$, τότε στην κλασσική περίπτωση όπου η κάθε θέση του πλέγματος αντιστοιχεί σε κάποιο spin, θα είναι

$$I(I:O) \leq |s(I)| \log_2(d). \quad (2.65)$$

Για ένα κβαντικό σύστημα με τοπικούς χώρους Hilbert \mathbb{C}^d , η αμοιβαία πληροφορία θα ικανοποιεί τον ακόλουθο κανόνα επιφάνειας

$$I(I:O) \leq \beta \|h\| |s(I)|, \quad (2.66)$$

όπου $\|h\|$ η μεγαλύτερη ιδιοτιμή όλων των Χαμιλτονιανών κατά μήκος του ορίου των περιοχών I και O . Οι Χαμιλτονιανές με αλληλεπιδράσεις δύο θέσεων μπορούν να γραφούν ως

$H = H_I + H_\partial + H_O$, όπου η H_I και H_O περιλαμβάνουν όλους τους όρους αλληλεπίδρασης, ενώ η H_∂ εμπεριέχει τους όρους που συνδέουν τις δύο περιοχές. Η κατάσταση Gibbs ρ_β για κάποια θερμοκρασία $\beta > 0$, ελαχιστοποιεί την ελεύθερη ενέργεια $F(\rho) = \text{tr}[H\rho] - S(\rho)/\beta$.

Συνεπώς

$$F(\rho_\beta) \leq F(\rho_I \otimes \rho_O), \quad (2.67)$$

από όπου προκύπτει η σχέση $I(I:O) \leq \beta \text{tr}[H_\partial(\rho_I \otimes \rho_O - \rho_\beta)]$. Στο όριο $\beta \rightarrow \infty$ δεν μπορεί να οριστεί κάποιος κανόνας επιφάνειας για μηδενική θερμοκρασία καθώς το δεξί μέλος της (2.66) αποκλίνει.

3. Η συμφωνία (concurrence) και η μέτρηση του εναγκαλισμού

Άλλο ένα μονότονο που χρησιμοποιείται συχνά είναι η *συμφωνία* c . Για διμερή συστήματα, η c ορίζεται συχνά μέσω των τοπικών μητρών Pauli

$$\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

και αναπαρίσταται σε μία δεδομένη ορθοκανονική βάση $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ των παραγοντικών χώρων H_1 και H_2 του H ,

$$c(\psi) = |\langle \psi^* | \sigma_y \otimes \sigma_y | \psi \rangle|. \quad (3.2)$$

Η $\langle \psi^* |$ συμβολίζει τον μιγαδικό συζυγή της $\langle \psi |$. Αν η $\langle \psi |$ είναι της μορφής $\langle \psi | = \sum_{ij} \beta_{ij} \langle i | j |$, τότε η $\langle \psi^* |$ γράφεται $\langle \psi^* | = \sum_{ij} \beta_{ij}^* \langle i | j |$.

Μία πιθανή γενίκευση του πιο πάνω ορισμού για συστήματα μεγαλύτερων διαστάσεων γράφεται

$$c(\psi) = \sqrt{2(1 - \text{tr} \rho_r^2)}. \quad (3.3)$$

Σε συνάρτηση με τους συντελεστές Schmidt η συμφωνία διατυπώνεται ως ακολούθως

$$c(\psi) = \sqrt{2 \sum_{i \neq j} \lambda_i \lambda_j}. \quad (3.4)$$

Η (3.2) παραμένει αναλλοίωτη από την μετάθεση των λ_i

$$(\lambda_1 - \lambda_2) \left(\frac{\partial c}{\partial \lambda_1} - \frac{\partial c}{\partial \lambda_2} \right) = \frac{(\lambda_1 - \lambda_2)}{2c} \left(\sum_{i \neq 1} \lambda_i - \sum_{i \neq 2} \lambda_i \right), \quad (3.5)$$

επιβεβαιώνοντας την ιδιότητα της ως μονότονο εναγκαλισμού.

3.1 Στατιστικά μείγματα

Για τις καθαρές καταστάσεις ήμασταν σε θέση να ορίσουμε πλήρως κάποια μέτρα εναγκαλισμού. Στην περίπτωση των στατιστικών μειγμάτων είναι πιο πολύπλοκο να βρεθεί μία ποσότητα η οποία θα είναι φθίνουσα έπειτα από ένα σύνολο πράξεων. Η βασική διαφορά μεταξύ των στατιστικών μειγμάτων και των καθαρών καταστάσεων, είναι ότι οι τελευταίες δεν έχουν κανέναν κλασσικό συσχετισμό. Οι κλασσικοί συσχετισμοί θα πρέπει να διαφοροποιηθούν από τους πραγματικούς κβαντικούς συσχετισμούς του μονοτόνου εναγκαλισμού ενός στατιστικού μείγματος.

3.1.1 Αρνητικότητα

Μέχρι στιγμής έχουν βρεθεί πολύ λίγες ποσότητες οι οποίες δεν είναι αύξουσες έπειτα από την δράση τοπικών πράξεων. Το πιο σημαντικό παράδειγμα είναι η αρνητικότητα. Νωρίτερα, είδαμε ότι ο μερικός ανάστροφος ρ^{pt} ενός στατιστικού μείγματος ρ μπορεί να καθοριστεί την διαχωρισιμότητα του. Αν κάποια από τις ιδιοτιμές λ_i του ρ^{pt} είναι αρνητική, τότε ο ρ είναι εναγκαλισμένος. Από εκεί προέκυψε και ο ορισμός της αρνητικότητας

$$N(\rho) = \frac{(\sum_i |\lambda_i|) - 1}{2}, \quad (3.6)$$

όπου αποδεικνύεται ότι από πλευράς μονοτονίας φθίνει έπειτα από την δράση τοπικών πράξεων. Αν ο ρ^{pt} είναι θετικός, τότε η N εξαφανίζεται, ενώ αν ο ρ^{pt} έχει τουλάχιστον μία αρνητική ιδιοτιμή τότε η N παίρνει θετικές τιμές. Σε σχέση με τα υπόλοιπα μονότονα εναγκαλισμού των στατιστικών μειγμάτων, η N μπορεί να υπολογιστεί εύκολα αφού είναι μία αλγεβρική συνάρτηση του φάσματος του ρ^{pt} . Ο εναγκαλισμός όμως που αποδίδεται από την αρνητικότητα αφορά μόνο για καταστάσεις οι οποίες εντοπίζονται από τον αρνητικό ανάστροφο τους. Κατά συνέπεια η αρνητικότητα είναι πλήρως αξιόπιστη μόνο για συστήματα 2×2 ή 2×3 .

3.1.2 Κυρτοί Φραγμοί (Convex Roofs)

Η αποτυχία του εντοπισμού όλων των εναγκαλισμένων καταστάσεων καλύπτεται από τα μέτρα των κυρτών φραγμών. Αυτό που απαιτείται όμως είναι επιπλέον παραμετροποίηση η οποία πολλές φορές καθιστά δύσκολη την αλγεβρική επίλυση του προβλήματος. Από την στιγμή όπου ένα στατιστικό μείγμα μπορεί να αναλυθεί σε έναν πιθανοκρατικό συνδυασμό καθαρών καταστάσεων

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (3.7)$$

με τους παράγοντες p_i θετικούς, μπορούμε να εκφράσουμε τον εναγκαλισμό της ρ σε συνάρτηση με τα στοιχεία των καθαρών καταστάσεων του. Μία γενίκευση ενός μονότονου μίας καθαρής κατάστασης είναι η μέση τιμή $\sum_i p_i M(\psi_i)$ του μονότονου M . Παρόλαυτα ένα στατιστικό μείγμα μπορεί να αναλύεται σε παραπάνω από ένα σύνολο καθαρών καταστάσεων, με αποτέλεσμα σε κάθε περίπτωση η μέση τιμή να είναι διαφορετική. Μία γενική περίπτωση ενός στατιστικού μείγματος το οποίο φθίνει έπειτα από την δράση τοπικών πράξεων, είναι το infimum όλων των καθαρών καταστάσεων στις οποίες μπορεί να αναλυθεί

$$M(\rho) = \inf_{\{p_i, |\psi_i\rangle\}} \sum_i p_i M(\psi_i). \quad (3.8)$$

Η πιο πάνω ποσότητα λέγεται κυρτός φραγμός. Προκειμένου να λυθεί τι πρόβλημα της παραμετροποίησης για την (3.8), πρέπει να βρεθεί ένας τρόπος ώστε να διερευνηθούν όλοι οι συνδυασμοί των καταστάσεων στις οποίες μπορεί να αναλυθεί η ρ . Δεδομένων των ιδιοκαταστάσεων $|\varphi_j\rangle$ και των ιδιοτιμών μ_i της ρ , κάθε γραμμικός συνδυασμός των καταστάσεων

$$\sqrt{p_i} |\psi_i\rangle = \sum_j V_{ij} \sqrt{\mu_j} |\varphi_j\rangle, \quad (3.9)$$

ορίζει έναν αποδεκτό τρόπο με τον οποίο μπορεί να αναλυθεί. Προκειμένου να γίνει αυτό όμως θα πρέπει να ισχύει ότι $\sum_k V_{ik}^\dagger V_{jk} = \delta_{jk}$. Για παράδειγμα, για έναν αριστερά αντιστρέψιμο πίνακα V έχουμε

$$\begin{aligned} \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| &= \sum_{ijk} V_{ij} \sqrt{\mu_j} |\varphi_j\rangle\langle\varphi_k| \sqrt{\mu_k} V_{ik}^* \\ &= \sum_{ijk} V_{ki}^\dagger V_{ij} \sqrt{\mu_j \mu_k} |\varphi_j\rangle\langle\varphi_k| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum \delta_{jk} \sqrt{\mu_j \mu_k} |\varphi_j\rangle \langle \varphi_k| \\
&= \sum_j \mu_j |\varphi_j\rangle \langle \varphi_j| = \rho,
\end{aligned} \tag{3.10}$$

οπότε με αυτόν τον τρόπο μπορεί να αναλυθεί η ρ σε ένα σύνολο καθαρών καταστάσεων.

3.1.3 Η Συμφωνία των Στατιστικών Μειγμάτων

Από την στιγμή όπου μπορεί να αναλυθεί ένα στατιστικό μείγμα σε καθарές καταστάσεις, μπορούμε να ασχοληθούμε με τον προσδιορισμό της συμφωνίας (*concurrence*) τους. Μέχρι στιγμής, η συμφωνία είναι η μόνη ποσότητα για την οποία μπορεί να υπολογισθεί αλγεβρικά ένας κυρτός φραγμός. Αργότερα, θα δούμε ότι μπορεί να υπολογιστεί αλγεβρικά ο κυρτός φραγμός της εντροπίας εναγκαλισμού. Αυτός ο υπολογισμός όμως βασίζεται στην ήδη γνωστή λύση της συμφωνίας.

Μία πολύ βασική ιδιότητα της συμφωνίας η οποία δεν συναντάται στα άλλα μονότονα είναι η ομοιογένεια

$$c(\eta|\psi\rangle\langle\psi|) = \eta c(|\psi\rangle), \text{ για } \eta \geq 0, \tag{3.11}$$

η οποία μας επιτρέπει να επαναδιατυπώσουμε την σχέση (3.8) ως εξής

$$c(\rho) = \inf_{\{|\psi_i\rangle\}} \sum_i c(\psi_i). \tag{3.12}$$

Στην πιο πάνω σχέση, όλα εκφράζονται σε συνάρτηση με τις καταστάσεις $|\psi_i\rangle = \sqrt{p_i} |\psi_i\rangle$. Αυτό μας επιτρέπει να ξαναγράψουμε την (2.62) στην κλειστή μορφή

$$\begin{aligned}
c(\rho) &= \inf_{\{|\psi_i\rangle\}} \sum_i c(\psi_i) \\
&= \inf_{\{|\psi_i\rangle\}} \sum_i |\langle \psi_i^* | \sigma_y \otimes \sigma_y | \psi_i \rangle| \\
&= \inf_V \sum_i \left| \sum_{jk} V_{ij} \langle \varphi_j^* | \sigma_y \otimes \sigma_y | \varphi_k \rangle V_{ki}^T \right| \\
&= \inf_V \sum_i \left| [V \tau V^T]_{ii} \right|,
\end{aligned} \tag{3.13}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τις σχέσεις (3.2) και (3.8). Ο τ είναι ένας μιγαδικός συμμετρικός πίνακας, $\tau = \tau^T$ με στοιχεία

$$\tau_{ij} = \langle \varphi_i^* | \sigma_y \otimes \sigma_y | \varphi_j \rangle. \tag{3.14}$$

Οι πράξεις στην (3.13) θυμίζουν την διαδικασία διαγωνιοποίησης ενός ερμιτιανού πίνακα H μέσω ενός μοναδιαίου μετασχηματισμού $U H U^\dagger$. Η διαφορά όμως έγκειται στο γεγονός ότι ο τ είναι συμμετρικός και όχι ερμιτιανός και αντί για τον συζυγή του αντίστοιχου μοναδιαίου μετασχηματισμού, έχουμε τον ανάστροφο του. Παρόλ'αυτα ένας συμμετρικός πίνακας μπορεί να διαγωνοποιηθεί με παρόμοιο τρόπο.

Νωρίτερα, είχαμε αναφερθεί στην ανάλυση σε ιδιάζουσες τιμές ενός πίνακα. Πιο συγκεκριμένα, οποιοσδήποτε πίνακας A μπορεί να διαγωνοποιηθεί με δύο μοναδιαίους μετασχηματισμούς u_1 και u_2 ως εξής: $u_1 A u_2$.

Αυτό ισχύει και για την ειδική περίπτωση του συμμετρικού πίνακα που εξετάζουμε εδώ, με την προϋπόθεση ότι ο u_2 είναι ίσος με τον u_1^T . Άρα το infimum μπορεί να γραφεί στην μορφή

$$c(\rho) = \inf_V \sum_i |[V U^\dagger U \tau U^T U^* V^T]_{ii}| = \inf_V \sum_i |[\tilde{V} \tau_d \tilde{V}^T]|, \quad (3.15)$$

όπου $\tilde{V} = V U^\dagger$ και $\tau_d = U \tau U^T = \text{diag}[S_1, S_2, S_3, S_4]$ είναι η διαγώνια μορφή του τ . Η σειρά των διαγώνιων στοιχείων δεν έχει προσδιοριστεί και μπορεί να επιλεγεί τυχαία. Πιο κάτω θα ακολουθήσουμε την σύμβαση ότι το S_1 είναι το μεγαλύτερο από αυτά τα στοιχεία.

Με την διαγώνια μορφή τ_d του τ έχουμε απλοποιήσει αρκετά το πρόβλημα. Αντί για 20 πραγματικές παραμέτρους που χαρακτηρίζουν έναν γενικό μιγαδικό συμμετρικό πίνακα, έχουμε μείνει μόνο με 4. Βέβαια δεν είναι ακόμα προφανές το πως θα κατασκευαστεί ένας βέλτιστος πίνακας \tilde{V} . Αντί να αναπτυχθεί μία συστηματική μέθοδος γι' αυτό, θα κάνουμε μία “εικασία” η οποία θα επιστρέψει και το επιθυμητό αποτέλεσμα. Ας θεωρήσουμε αρχικά τον V ίσο με τον \tilde{V}

$$V = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & e^{i\varphi_2} & e^{i\varphi_3} & e^{i\varphi_4} \\ 1 & e^{i\varphi_2} & -e^{i\varphi_3} & -e^{i\varphi_4} \\ 1 & -e^{i\varphi_2} & e^{i\varphi_3} & -e^{i\varphi_4} \\ 1 & -e^{i\varphi_2} & -e^{i\varphi_3} & e^{i\varphi_4} \end{bmatrix}, \quad (3.16)$$

όπου ακόμα έχουμε τις ελεύθερες φάσεις $\varphi_2, \varphi_3, \varphi_4$ τις οποίες μπορούμε να προσαρμόσουμε. Επιλέγοντας κατάλληλα παίρνουμε την σχέση

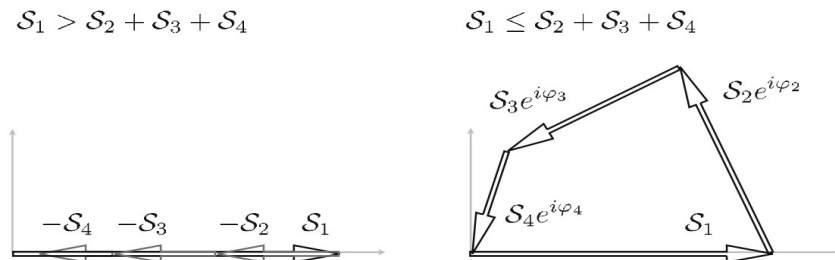
$$\sum_i |V \tau_d V^T| = \left| S_1 + \sum_{i>1} e^{2i\varphi_i} S_i \right|. \quad (3.17)$$

Η πιο πάνω έκφραση μπορεί να ελαχιστοποιηθεί επιλέγοντας κατάλληλα τις ελεύθερες φάσεις, κάτι το οποίο μπορεί να γίνει σχετικά εύκολα διακρίνοντας δύο περιπτώσεις. Στην περίπτωση όπου

$S_1 \geq \sum_{i>1} S_i$, η καλύτερη επιλογή για τις φάσεις είναι $\varphi_2 = \varphi_3 = \varphi_4 = \pi/2$, οπότε οδηγούμαστε στην ισότητα $\sum_i |V \tau_d V^T| = S_1 - \sum_{i>1} S_i$. Στην περίπτωση όπου $S_1 < \sum_{i>1} S_i$, τότε μπορούν να επιλεγθούν με τέτοιον τρόπο οι φάσεις ώστε $\sum_i |V \tau_d V^T| = 0$, Δηλαδή μπορούσαμε να αναλύσουμε την αρχική κατάσταση σε ένα σύνολο καθαρών καταστάσεων, η μέση συμφωνία της οποίας είναι $\max(S_1 - \sum_{i>1} S_i, 0)$. Ακόμα όμως δεν γνωρίζουμε αν είναι αυτό το επιθυμητό αποτέλεσμα, ή αν υπάρχουν άλλοι συνδυασμοί καθαρών καταστάσεων οι οποίοι επιστρέφουν χαμηλότερες τιμές,

Για να απαντηθεί αυτό το ερώτημα, θα περιοριστούμε στην πρώτη περίπτωση όπου

$S_1 \geq \sum_{i>1} S_i$. Στην άλλη περίπτωση έχουμε βρει την τιμή 0 για την συμφωνία η οποία είναι και η μικρότερη δυνατή, αφού η τελευταία δεν μπορεί να είναι αρνητική.



Σχήμα 3.1: Σχηματική αναπαράσταση των ιδιζουσών τιμών S_i οι οποίες προστίθενται στο μιγαδικό επίπεδο

έχοντας προσαρμόσει κατάλληλα τις βάσεις $e^{2i\phi_i}$. Αν $S_1 > \sum_{i>1} S_i$ όπως βλέπουμε στο αριστερό σχήμα, η καλύτερη επιλογή για τις φάσεις προκειμένου να ελαχιστοποιηθεί η $|S_1 + \sum_{i>1} S_i e^{2i\phi_i}|$ είναι για $\phi_i = \pi/2$. Αν από την άλλη $S_1 < \sum_{i>1} S_i$ τότε μπορούν πάντα να βρεθούν τιμές για τις φάσεις ϕ_i ώστε η $|S_1 + \sum_{i>1} S_i e^{2i\phi_i}|$ να μηδενίζεται.

Θεωρώντας ότι $\phi_2 = \phi_3 = \phi_4 = \pi/2$ θα δείξουμε ότι δεν υπάρχει αριστερά αντιστρέψιμος πίνακας W για τον οποίον να προκύπτει μικρότερη τιμή από αυτές που έχουμε βρει μέχρι στιγμή

$$\begin{aligned}
\sum_i |[W \tau_d W^T]_{ii}| &= \sum_i \left| \sum_j W_{ij}^2 S_j \right| \\
&= \sum_i \left| W_{i1}^2 S_1 + \sum_{j>1} W_{ij}^2 S_j \right| \\
&\geq \sum_i \left(|W_{i1}^2| S_1 - \left| \sum_{j>1} W_{ij}^2 S_j \right| \right) \\
&= S_1 - \sum_i \left| \sum_{j>1} W_{ij}^2 S_j \right| \\
&\geq S_1 - \sum_i \sum_{j>1} |W_{ij}|^2 S_j \\
&= S_1 - \sum_{j>1} S_j,
\end{aligned} \tag{3.18}$$

όπου για να μεταβούμε από την δεύτερη στην τρίτη γραμμή χρησιμοποιήσαμε την ανισότητα $|a+b| \geq |a| - |b|$, με $a = W_{i1}^2 S_1$ και $b = \sum_{j>1} W_{ij}^2 S_j$, ενώ στην δεύτερη γραμμή χρησιμοποιήσαμε την συνθήκη $\sum |W_{ij}|^2 = 1$. Για την πέμπτη γραμμή χρησιμοποιήσαμε την σχέση $-\left| \sum a_j \right| \geq -\sum |a_j|$, με $a_j = W_{ij}^2 S_j$. Συνεπώς βρήκαμε την αλγεβρική λύση

$$c(\rho) = \max(S_1 - \sum_{j>1} S_j, 0) \tag{3.19}$$

για την συμφωνία ενός τυχαίου στατιστικού μείγματος ενός διμερούς συστήματος, δύο επιπέδων.

3.1.4 Ο Εναγκαλισμός Σχηματισμού των Στατιστικών Μειγμάτων

Έχοντας βρει πλέον την λύση για την συμφωνία, μπορούμε να διερευνήσουμε τον εναγκαλισμό σχηματισμού ο οποίος είναι η επέκταση του κυρτού φραγμού της εντροπίας εναγκαλισμού. Σε αυτό το σημείο θα χρησιμοποιήσουμε το γεγονός ότι για τις καθαρές καταστάσεις σε ένα διμερές σύστημα δύο επιπέδων, υπάρχει μόνο ένας ανεξάρτητος συντελεστής Schmidt. Συνεπώς κάποιος μπορεί να προσδιορίσει και τους δύο συντελεστές Schmidt μέσω της συμφωνίας

$$\lambda_{\pm} = \frac{1 \pm \sqrt{1-c^2}}{2}. \tag{3.20}$$

Από την στιγμή όπου η εντροπία εναγκαλισμού είναι συνάρτηση του λ , μπορεί επίσης να εκφραστεί μέσω της συνέχειας

$$E(\psi) = -\frac{1+\sqrt{1-c^2}}{2} \ln \frac{1+\sqrt{1-c^2}}{2} - \frac{1-\sqrt{1-c^2}}{2} \ln \frac{1-\sqrt{1-c^2}}{2} \equiv \varepsilon(c), \tag{3.21}$$

όπου εισάγουμε την συνάρτηση $\varepsilon(c)$. Κάποιος μπορεί εύκολα να δείξει ότι η $\varepsilon(c)$ είναι

αύξουσα $\partial \epsilon(c)/\partial c \geq 0$ και κυρτή $\partial^2 \epsilon(c)/\partial c^2 \geq 0$ για $c \geq 0$. Η κυρτότητα μπορεί να εκφραστεί ισοδύναμα ως $\sum_i p_i \epsilon(q_i) \geq \epsilon(\sum_i p_i q_i)$. Με την βοήθεια αυτών των ιδιοτήτων καταλήγουμε στο πιο κάτω συμπέρασμα

$$\begin{aligned}
 E(\rho) &= \inf \sum_i p_i E(\psi_i) \\
 &= \inf \sum_i p_i \epsilon(c(\psi_i)) \\
 &\geq \inf \epsilon\left(\sum_i p_i c(\psi_i)\right) \\
 &= \epsilon\left(\inf \sum_i p_i c(\psi_i)\right) \\
 &= \epsilon(c(\rho)).
 \end{aligned} \tag{3.22}$$

Για να περάσουμε από την δεύτερη στην τρίτη γραμμή, χρησιμοποιήσαμε την κυρτότητα της ϵ , ενώ για την τέταρτη γραμμή χρησιμοποιήσαμε την μονοτονία της. Βλέπουμε λοιπόν ότι ο εναγκαλισμός σχηματισμού φράσσεται προς τα κάτω από την $\epsilon(c(\rho))$. Πολύ σύντομα θα δούμε ότι δεν είναι απλά ένα όριο, αλλά το ακριβές αποτέλεσμα. Είναι πολύ σημαντικό το γεγονός ότι δεν υπάρχει ένας μοναδικός τρόπος να αναλυθεί ένα στατιστικό μείγμα ρ σε καθαρές καταστάσεις έτσι ώστε να προκύψει σαν αποτέλεσμα η πραγματική τιμή της συμφωνίας. Πιο συγκεκριμένα η ρ μπορεί να αναλυθεί ως εξής: $\rho = \sum_i \tilde{p}_i |\tilde{\psi}_i\rangle\langle\tilde{\psi}_i|$, όπου όλες οι καθαρές καταστάσεις έχουν την ίδια τιμή για την συμφωνία, δηλαδή $c(\tilde{\psi}_i) = c(\rho)$. Με βάση αυτά που είπαμε πριν, μπορούμε να δείξουμε ότι η $\epsilon(c(\rho))$ δεν αποτελεί μόνο έναν κάτω φραγμό του σχηματισμού του εναγκαλισμού, αλλά και την ακριβή τιμή που μπορεί να πάρει. Λόγω του ότι είναι ένας κυρτός φραγμός, η $E(\rho)$ φράσσεται από πάνω από την μέση της τιμή η οποία μπορεί να βρεθεί για οποιοδήποτε σύνολο καθαρών καταστάσεων $\{\tilde{p}_i, |\tilde{\psi}_i\rangle\}$ το οποίο αναλύει την ρ , δηλαδή $E(\rho) \leq \sum_i \tilde{p}_i \epsilon(c(\tilde{\psi}_i))$. Αντικαθιστώντας το $c(\tilde{\psi}_i)$ με $c(\rho)$ καταλήγουμε στην $E(\rho) \leq \sum_i \tilde{p}_i \epsilon(c(\rho))$. Καθώς το άθροισμα των πιθανοτήτων φτάνει μέχρι την τιμή 1, συμπεραίνουμε ότι ο εναγκαλισμός σχηματισμού φράσσεται από πάνω από την $\epsilon(c(\rho))$. Στην (3.22) βλέπουμε ότι φράσσεται και από κάτω από την ίδια ποσότητα, άρα καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι

$$E(\rho) = \epsilon(c(\rho)). \tag{3.23}$$

Από την στιγμή όπου είναι εφικτός ο υπολογισμός της συμφωνίας ενός στατιστικού μείγματος -αλγεβρικά από την 3.19- τότε κάποιος μπορεί να βρει και τον εναγκαλισμό σχηματισμού.

4. Εναγκαλισμός και συμφωνία σε καταστάσεις BCS

Σε αυτό το κεφάλαιο θα περιγράψουμε μία μέθοδο ποσοτικοποίησης του εναγκαλισμού μέσω της συμφωνίας σε μία κατάσταση BCS που περιγράφει τα υπεραγώγιμα στοιχεία ενός συστήματος, η οποία δημοσιεύτηκε από τον Martin Delgado το 2002. Αυτό οδήγησε στον ορισμό του μακροκανονικού εναγκαλισμού σύζευξης (MEP) για τον οποίον κατασκευάστηκε μία αναλυτική σχέση σε συνάρτηση δύο αδιάστατων αριθμών, της αποκοπής και του χάσματος. Αυτοί οι αριθμοί εξαρτώνται από μετρήσιμες φυσικές ποσότητες.

Στην θεωρία συμπυκνωμένης ύλης, ερχόμαστε πολλές φορές αντιμέτωποι με κβαντικά συστήματα πολλών σωματιδίων, των οποίων οι ισχυρές αλληλεπιδράσεις ευθύνονται για την εμφάνιση νέων ιδιοτήτων ή καταστάσεων της ύλης, όπως για παράδειγμα τα κβαντικά ρευστά ή οι κβαντικές μεταβάσεις φάσης. Στα συστήματα χαμηλών διαστάσεων, το φαινόμενο των κβαντικών διακυμάνσεων είναι εντονότερο σε σχέση με αυτό των συστημάτων υψηλότερων διαστάσεων.

Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί η κατάσταση Neel, η οποία μπορεί να περιγράψει την θεμελιώδη κατάσταση του αντισιδηρομαγνητικού μοντέλου Heisenberg σε δύο ή περισσότερες διαστάσεις, αλλά είναι ακατάλληλη σε μία διάσταση. Αυτό οφείλεται στο ότι η λύση του συστήματος, σύμφωνα με την αρχή του Bethe, είναι μία περίπλοκη υπέρθεση των καταστάσεων που περιγράφουν το κάθε σωματίδιο. Από τα παραπάνω προκύπτει το ερώτημα, αν οι νέες ιδέες σχετικά με την ποσοτικοποίηση του εναγκαλισμού που έχουν προκύψει από την μελέτη της κβαντικής πληροφορίας, είναι επαρκείς ώστε να περιγράψουμε την πολύπλοκη συμπεριφορά των ισχυρά συζευγμένων κβαντικών συστημάτων.

Η ποσοτικοποίηση του εναγκαλισμού είναι εφικτή μέσω του *εναγκαλισμού σχηματισμού* $E(\rho)$, ένα μέγεθος το οποίο εισήγαγαν πρώτοι οι Bennet et al. προκειμένου να περιγράψουν τους πόρους που απαιτούνται, για την δημιουργία μίας εναγκαλισμένης καθαρής κατάστασης $|\psi\rangle$ ή ενός στατιστικού μείγματος ρ δύο σωματιδίων.

Η εξεύρεση μίας κλειστής μαθηματικής σχέσης του $E(\rho)$ σε συνάρτηση με το ρ είναι δύσκολη διαδικασία. Για την ειδική περίπτωση όμως των στατιστικών μειγμάτων που περιγράφουν συστήματα qubit δύο σωματιδίων, ο Wootters βρήκε μία τέτοια σχέση. Αυτή η σχέση βασίζεται στον, κατά τον Wootters, *μετασχηματισμό αναστροφής spin*, ο οποίος ορίζεται ως

$$|\tilde{\psi}\rangle := \sigma_y |\psi^*\rangle \quad (4.1)$$

όπου $\sigma_y := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ είναι ο πίνακας Pauli στην υπολογιστική βάση $\{|0\rangle := |\uparrow\rangle, |1\rangle := |\downarrow\rangle\}$.

Για μία γενική κατάσταση ρ αποτελούμενη από δύο qubits, Η κατάσταση ανάστροφου spin είναι $\tilde{\rho} := (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho^* (\sigma_y \otimes \sigma_y)$. Όταν η κατάσταση είναι καθαρή $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, η εντροπία σχηματισμού μπορεί να γραφεί ως $E(\rho) = \varepsilon(C(\psi))$, όπου η συμφωνία ορίζεται από την σχέση

$$C(\psi) := |\langle\psi|\tilde{\psi}\rangle| \quad (4.2)$$

και $\varepsilon(C) := h(1/2[1+\sqrt{1-C^2}])$, $h(x) := -x \log_2 x - (1-x) \log_2 (1-x)$ μία αύξουσα συνάρτηση του C η οποία έχει σύνολο τιμών από 0 μέχρι 1, για τιμές της συμφωνίας από 0 μέχρι 1.

Ο Wootters είχε προτείνει να χρησιμοποιηθεί κατευθείαν η σχέση (4.2) για την μέτρηση του εναγκαλισμού. Στην εργασία που εξετάζουμε, ο Martin-Delgado βασίστηκε στην πρόταση του Wootters και μελέτησε την συμφωνία σε μία κατάσταση BCS. Γενιά υπάρχουν ελάχιστες περιπτώσεις προβλημάτων πολλών σωματιδίων για τις οποίες μπορούμε να βρούμε μία λύση στην μορφή μίας ακριβούς κυματοσυνάρτησης. Χαρακτηριστικό παράδειγμα μίας τέτοιας περίπτωσης είναι η θεωρία BCS για τους συνήθεις υπεραγωγούς.

Πιο συγκεκριμένα, η γενική κβαντική κατάσταση που περιγράφει έναν υπεραγωγό που φέρει υπερ-ρεύμα σε θερμοκρασία $T=0$, είναι

$$|BCS\rangle_\theta = \prod_k (u_k + e^{i\theta} v_k c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow}^\dagger) |0\rangle, \quad (4.3)$$

όπου $|0\rangle$ η κατάσταση Fock μηδέν σωματιδίων. Σε αυτή την κατάσταση τα ηλεκτρόνια δημιουργούνται σε ζεύγη Cooper για τις κατειλημμένες καταστάσεις με κβαντικούς αριθμούς $(\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \uparrow, -\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \downarrow)$. Αυτά τα ζεύγη έχουν κοινή ορμή $2\hbar\mathbf{Q}$. Αυτή η ορμή αντιπροσωπεύει το πεπερασμένο υπερ-ρεύμα και είναι συνήθως πολύ μικρή. Εδώ θα επικεντρωθούμε στο συμπίκνωμα των ζευγών Cooper, των οποίων το υπερ-ρεύμα είναι μηδέν ($\mathbf{Q}=0$). Οι παράμετροι u_k και v_k εκφράζουν τα πλάτη πιθανότητας για την δημιουργία ημι-οπών και ημι-ηλεκτρονίων αντίστοιχα, ενώ ικανοποιούν τις ακόλουθες ιδιότητες

$$\begin{aligned} u_k^2 + v_k^2 &= 1, \\ u_k, v_k &\in \mathbb{R}, \quad k = |\mathbf{k}|. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Η πρώτη συνθήκη προέρχεται από την κανονικοποίηση της κατάστασης $|BCS\rangle_\theta$ και εξαρτάται μόνο από το μέτρο του \mathbf{k} . Ο παράγοντας φάσης $e^{i\theta}$ είναι τυχαίος, αλλά παραμένει ίδιος για όλα τα ζεύγη Cooper. Στην μακροκανονική κατάσταση BCS (4.3), ο αριθμός N των ζευγών Cooper είναι ορισμένος με ακρίβεια. Αν αναλυθεί σε σειρά, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι η κατάσταση είναι ένας μέσος όρος πάνω σε ένα σύνολο ορισμένων καταστάσεων $|N, Q\rangle$ με ορμή ζεύγους

$$2\hbar\mathbf{Q}, \quad \text{δηλαδή } |BCS\rangle_\theta = \sum_N e^{iN\theta} A_N |N, Q\rangle, \quad \sum_N A_N^2 = 1.$$

Το γεγονός ότι έχουμε την ακριβή μορφή της κυματοσυνάρτησης της θεμελιώδους αποτελεί πλεονέκτημα, αφού μπορούμε να υπολογίσουμε οποιαδήποτε ποσότητα μας χρειάζεται για την μέτρηση του εναγκαλισμού. Συγκεκριμένα μπορούμε να υπολογίσουμε την ανηγμένη μήτρα πυκνότητας $\rho(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j)$ από το ίχνος των ζευγών Cooper με ορμή $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j$. Για αυτήν την μήτρα πυκνότητας υπάρχουν αναλυτικές σχέσεις που την συνδέουν με τον εναγκαλισμό σχηματισμού ο οποίος με την σειρά του ορίζεται με ακρίβεια από την συμφωνία.

Αν και όλα φαίνονται απλά εκ πρώτης όψεως, παρατηρούμε ότι στην περίπτωση της μακροκανονικής κατάστασης BCS, ο πίνακας $\rho(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j)$ αντιστοιχεί στην κατάσταση που δημιουργείται από το γινόμενο δύο ζευγών Cooper με ορμή $(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j)$, δηλαδή,

$[u_{k_i}|0\rangle + v_{k_i}|1\rangle] \otimes [u_{k_j}|0\rangle + v_{k_j}|1\rangle]$, όπου εδώ με $|0\rangle, |1\rangle$ συμβολίζονται οι καταστάσεις με κανένα και ένα ζεύγος Cooper αντίστοιχα. Τότε η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας μας οδηγεί στο αρχικό πρόβλημα που καλούμαστε να λύσουμε, με την μόνη διαφορά ότι τώρα έχουμε δύο ζεύγη. Αρχικά φαίνεται δύσκολο το να χρησιμοποιήσουμε την συμφωνία ώστε να διερευνήσουμε τον εναγκαλισμό στην μακροκανονική κατάσταση BCS, αφού έχουμε να κάνουμε με μία κατάσταση πολλών σωματιδίων (πολλών qubit). Είναι γνωστό ότι η συμφωνία αποτυγχάνει να εντοπίσει τις ιδιότητες εναγκαλισμού στις καταστάσεις πολλών σωματιδίων. Σε αυτό το σημείο θα δείξουμε ότι είναι εφικτή η μέτρηση του εναγκαλισμού για την κατάσταση BCS βασιζόμενοι στην συμφωνία.

Αρχικά θα ορίσουμε μία κατάσταση $|\psi\rangle$ πολλών σωματιδίων που βασίζεται στην θεμελιώδη κατάσταση BCS με $\theta=0$

$$|\psi\rangle = |BCS\rangle_0 = \prod_k (u_k + v_k c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger) |0\rangle. \quad (4.5)$$

Η πιο πάνω κατάσταση αποτελεί την λύση της ελάχιστης ενέργειας μίας ανηγμένης Χαμιλτονιανής που είναι γνωστή ως Χαμιλτονιανή σύζευξης,

$$H_{\text{red}} = \sum_k 2\epsilon_k b_k^\dagger b_k - \sum_{k \neq k'} V_{k,k'} b_k^\dagger b_{k'} \quad (4.6)$$

όπου $b_k^\dagger = c_{k,\uparrow}^\dagger c_{-k,\downarrow}^\dagger$, $b_k = c_{-k,\downarrow} c_{k,\uparrow}$ είναι οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής αντίστοιχα για τα ζεύγη Cooper. Λύνοντας αυτό το πρόβλημα παίρνουμε σαν αποτέλεσμα τις πιο κάτω εκφράσεις για τα πλάτη πιθανότητας

$$\begin{aligned} u_k^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_k}{E_k} \right) \\ v_k^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k}{E_k} \right) \\ E_k &= \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta_k^2} \end{aligned} \quad (4.7)$$

όπου E_k είναι η ενέργεια των οιονεί σωματιδίων (διεγέρσεων) και Δ_k είναι η συνάρτηση χάσματος η οποία καθορίζεται από την αυτο-συνεπή λύση της εξίσωσης $\Delta_k = -\sum_{k'} \frac{\Delta_{k'}}{2E_{k'}} V_{k,k'}$.

Αυτή η λύση περιγράφει έναν υπεραγωγό BSC ή μία κατάσταση SC.

Αρχικά επεκτείνουμε την έννοια της συμφωνίας για τις καταστάσεις πολλών σωματιδίων, βασιζόμενοι στην φυσική της ερμηνεία που δόθηκε από τον Wooters. Δηλαδή, για ένα σωματίδιο με spin 1/2, η πράξη αναστροφής του spin (4.1) αντιστοιχεί στην πράξη αντιστροφής του χρόνου. Για καταστάσεις δύο qubit, η συμφωνία μπορεί να συντελέσει στην μέτρηση του εναγκαλισμού, χωρίς να λάβουμε υπόψιν μας την σύνδεση με την $\epsilon(C)$. Η λογική έχει ως ακολούθως: Αφού η $|\tilde{\psi}\rangle$ προκύπτει από την $|\psi\rangle$ μέσω της αντιστροφής του χρόνου, περιμένουμε ότι η τελευταία είναι πολύ περισσότερο εναγκαλισμένη, οπότε η $|\tilde{\psi}\rangle$ θα είναι παρόμοια με την $|\psi\rangle$ άρα $C(\psi) \sim 1$. Αντίθετα αν η $|\psi\rangle$ παραγοντοποιείται από δύο καταστάσεις, τότε η $|\tilde{\psi}\rangle$ θα είναι τελείως διαφορετική από την $|\psi\rangle$ και $C(\psi) \sim 0$. Όταν ο βαθμός εναγκαλισμού μίας δεδομένης κατάστασης είναι υψηλός, τότε η χρονικά αντεστραμμένη κατάσταση είναι πολύ κοντά στην αρχική και η επικάλυψη τους είναι μεγάλη.

Έστω ότι ορίζουμε την συμφωνία $C(BCS)$ της κατάστασης BCS (4.5) μέσω της επικάλυψης της με την χρονικά αντεστραμμένη της, δηλαδή

$$C(BCS) = |\langle BCS | \overline{BCS} \rangle_0| \quad (4.8)$$

όπου

$$|\overline{BCS}\rangle_0 = U_T |BCS\rangle. \quad (4.9)$$

Η δράση του τελεστή αντιστροφής του χρόνου στις μεταβλητές της θέσης, της ορμής και του spin αποδίδεται σύμφωνα με τις πιο κάτω σχέσεις

$$\begin{aligned} U_T \mathbf{r}_i U_T^\dagger &= \mathbf{r}_i \\ U_T \mathbf{k}_i U_T^\dagger &= -\mathbf{k}_i \\ U_T \mathbf{s}_i U_T^\dagger &= -\mathbf{s}_i. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Σε αυτό το σημείο συνειδητοποιούμε ότι ελλείπει μίας σαφούς σύνδεσης μεταξύ του εναγκαλισμού σχηματισμού και της συμφωνίας, πέρα από τις καταστάσεις των δύο qubit, θα πρέπει να ορίσουμε ένα μέγεθος μέτρησης του εναγκαλισμού σε συνάρτηση με μία κατάσταση αναφοράς της οποίας ο εναγκαλισμός είναι μηδέν. Βασικός υποψήφιος για αυτό, είναι η κατάσταση της θάλασσας Fermi η οποία ορίζεται από την σχέση

$$|FS\rangle = \prod_{k \leq k_F} c_{k,\uparrow}^\dagger c_{k,\downarrow}^\dagger |0\rangle. \quad (4.11)$$

Χρησιμοποιώντας τις (4.10), βλέπουμε ότι αυτή η σχέση θα έχει μέγιστη συμφωνία $C(FS)=1$ ανεξάρτητα από το γεγονός ότι είναι μη εναγκαλισμένη. Κατά συνέπεια επιλέγουμε ως ορισμό για τον εναγκαλισμό αυτό που ονομάζουμε MEP (macrocanonical entanglement of pairing – μακροκανονικό εναγκαλισμό σύζευξης) $E(BCS)$, ο οποίος ορίζεται ως

$$E(BCS) = \langle FS | \overline{FS} \rangle - \langle BCS | \overline{BCS} \rangle. \quad (4.12)$$

Σύμφωνα αυτόν τον ορισμό η κατάσταση της θάλασσας Fermi δεν έχει καθόλου εναγκαλισμό. Πιο κάτω θα υπολογίσουμε τον MEP και θα δείξουμε ότι μπορούμε από αυτό να ποσοτικοποιήσουμε τον εναγκαλισμό στην μακροκανονική κατάσταση BCS. Βασιζόμενοι στο ότι $U_T|0\rangle = |0\rangle$ στις σχέσεις (4.10) και στις κανονικές αντιμεταθετικές σχέσεις βρίσκουμε ότι

$$|\overline{BCS}\rangle_0 = \prod_k (u_k - v_k c_{k,\uparrow}^\dagger c_{-k,\downarrow}^\dagger) |0\rangle = |BCS\rangle_\pi. \quad (4.13)$$

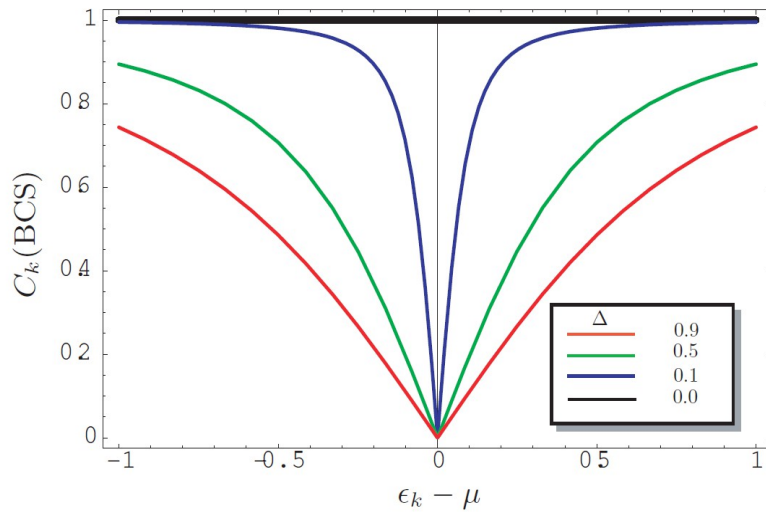
Από αυτό συμπεραίνουμε ότι μετά την δράση της χρονικής αντιστροφής, η κατάσταση με $\theta=0$ μετασχηματίζεται σε μία άλλη με $\theta=\pi$. Επισημαίνεται ότι όλες οι καταστάσεις $|BCS\rangle_\theta$ έχουν την ίδια ενέργεια σε σχέση με την ανηγμένη Χαμιλτονιανή (4.6).

Τώρα μπορούμε να υπολογίσουμε την συμφωνία της κατάστασης BCS από την επικάλυψη των σχέσεων (4.13) και (4.5), όπου

$$C(BCS) = \prod_k |u_k^2 - v_k^2|. \quad (4.14)$$

Από την πιο πάνω σχέση αντιλαμβανόμαστε ότι μπορούμε να εισάγουμε μία μερική συμφωνία $C_k(BCS)$ για κάθε ζεύγος Cooper ορμής k και χρησιμοποιώντας τις λύσεις BCS (4.7) της εξίσωσης χάσματος βρίσκουμε ότι

$$C_k(BCS) = |u_k^2 - v_k^2| = \left| \frac{\epsilon_k}{\sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2}} \right|. \quad (4.15)$$



Σχήμα 4.1: Οι μερικές συμφωνίες με βάση τις ενεργειακές διαφορές σε συνάρτηση με το χημικό δυναμικό μ , για διάφορες τιμές του χάσματος Δ

Στο σχήμα 1, αποδίδονται γραφικά οι μερικές συμφωνίες $C_k(BCS)$ σαν συνάρτηση της ενέργειας ϵ_k για διάφορες τιμές της ομογενούς συνάρτησης χάσματος $\Delta_k = \Delta$. Φαίνεται ξεκάθαρα ότι οι μερικές συμφωνίες είναι διάφορες του 1 κοντά στην επιφάνεια Fermi και αυτή η περιοχή επεκτείνεται σε ένα διάστημα της τάξης 2Δ . Αυτή είναι η περιοχή όπου σχηματίζονται τα ζεύγη Cooper. Οι παρεκκλίσεις των $C_k(BCS)$ από το 1 μας επιτρέπουν να εντοπίσουμε τους συσχετισμούς μεταξύ των ζευγών των σωματιδίων. Στην πραγματικότητα, όταν το χάσμα γίνεται μηδέν, οι λύσεις των u_k, v_k στην (4.7) έχουν σαν αποτέλεσμα $C_k(BCS) = 1, \forall k$, το οποίο επαληθεύει το γεγονός ότι αντιπροσωπεύει κάποιο κανονικό μέταλλο με μη συσχετιζόμενη (παραγοντοποιήσιμη) θεμελιώδη κατάσταση.

Επεκτείνοντας κι άλλο την μελέτη μας μπορούμε να υπολογίσουμε την συνολική συμφωνία της κατάστασης BCS. Μπορεί να υπολογιστεί ακριβώς στο συνεχές όριο $\sum_k \rightarrow \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int d^3k$ με αποτέλεσμα την ακόλουθη σχέση

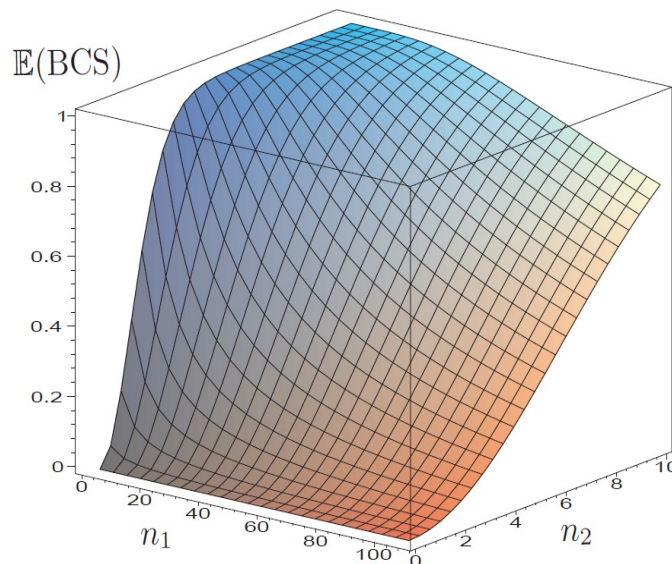
$$C(BCS) = \left[1 + \left(\frac{n_2}{n_1} \right)^2 \right]^{-\frac{n_1}{2}} e^{-n_2 \arctan \frac{n_1}{n_2}}, \quad (4.16)$$

για

$$\begin{aligned} n_1 &= N(\epsilon_F) \hbar \omega_D \\ n_2 &= N(\epsilon_F) \Delta \end{aligned}$$

όπου $N(\epsilon_F)$ είναι η πυκνότητα καταστάσεων στο επίπεδο Fermi και ω_D η συχνότητα Debye. Για παράδειγμα για μία παραβολική σχέση διασποράς όπως η $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ θα έχουμε

$$N(\epsilon_F) = \frac{L^3}{2\pi^2} \left[k^2 \frac{dk}{d\epsilon_k} \right]_{\epsilon_k = \epsilon_F} = L^3 \frac{m k_F}{2\pi^2 \hbar^2}. \quad (4.17)$$



Σχήμα 4.2: Ο μακροκανονικός εναγκαλισμός σύζευξης σαν συνάρτηση των αριθμών αποκοπής και χάσματος. Στην μπλε περιοχή οι τιμές MEP είναι υψηλές, ενώ στην κόκκινη χαμηλές

Συνεπώς βλέπουμε ότι η συμφωνία BCS (4.16) εξαρτάται από δύο αδιάστατες ποσότητες, τον αριθμό αποκοπής n_1 και τον αριθμό χάσματος n_2 . Από την (4.16) βλέπουμε ότι η συμφωνία είναι πάντα ≤ 1 , ενώ η μέγιστη τιμή προκύπτει για $n_2=0$, κάτι που αντιστοιχεί στην απουσία της υπεραγωγιμότητας. Στο σχήμα 4.2 αποδίδεται σχηματικά ο μακροκανονικός εναγκαλισμός σύζευξης MEP (4.16) όπου φαίνεται η εξάρτηση του από τους αριθμούς n_1 και n_2 . Βλέπουμε ότι για μία συγκεκριμένη τιμή του n_1 (και κατά συνέπεια τις ω_D και της $N(\epsilon_F)$) ο εναγκαλισμός αυξάνεται ως προς το n_2 και εν συνεχεία ως προς το υπεραγώγιμο χάσμα Δ για $T=0$. Γενικά είναι πολύ σημαντικό το γεγονός ότι η σχέση (4.16) εξαρτάται από τις ποσότητες n_1 και n_2 αφού και αυτές με την σειρά τους είναι σε συνάρτηση με την ω_D και την $N(\epsilon_F)$ οι οποίες μπορούν να προσδιοριστούν πειραματικά.

Σύμφωνα με την εργασία που εξετάσαμε συνίσταται η χρήση του MEP κατά την μελέτη του εναγκαλισμού ή των κβαντικών συσχετισμών σε υπεραγώγιμα συστήματα στα οποία εμφανίζονται ζεύγη Cooper.

5. Ακριβείς συσχετισμοί μεταξύ της στατιστικής φορτίου και των εντροπιών εναγκαλισμού

Σε αυτό το κεφάλαιο θα δείξουμε, ότι για συστήματα μη αλληλεπιδρώντων φερμιονίων, μπορούμε να κατασκευάσουμε δύο σημαντικά μέτρα του εναγκαλισμού πολλών σωματιδίων, τα οποία μπορούν να εκφραστούν επακριβώς σύμφωνα με τις διακυμάνσεις του φορτίου. Πιο συγκεκριμένα θα εξάγουμε τις σειρές για την εντροπία εναγκαλισμού von Neumann και Renyi οι οποίες θα αποτελούνται από προσθετούς, κατασκευασμένοι σύμφωνα με τις κατανομές του φορτίου.

Ο συσχετισμός της εντροπίας εναγκαλισμού με την κατανομή φορτίου διευκολύνει πλέον τον πειραματικό προσδιορισμό της πρώτης σε μη αλληλεπιδρώντα συστήματα στα οποία μπορούν να μετρηθούν οι διακυμάνσεις του φορτίου.

Εκ πρώτης όψεως η ενασχόληση με συστήματα μη αλληλεπιδρώντων φερμιονίων φαίνεται να θέτει πολλούς περιορισμούς, κάτι το οποίο δεν ισχύει. Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί η ενδογενής σημασία των ελεύθερων ηλεκτρονίων σε διάφορες διαστάσεις. Επιπλέον, ο μετασχηματισμός Jordan-Wigner στην μία διάσταση, μπορεί να απεικονίσει το μοντέλο spin-1/2 XY σε ένα μοντέλο μη αλληλεπιδρώντων φερμιονίων, ενώ με παρόμοιο τρόπο μπορεί να απεικονιστεί ένα σύστημα ισχυρά απωθούμενων μποζονίων στον χώρο. Για το εν λόγω σύστημα μποζονίων (hard-core bosons) στην μία διάσταση, υπάρχει η δυνατότητα ανίχνευσης του εναγκαλισμού, αφού ο αριθμός των σωματιδίων σε μία συγκεκριμένη περιοχή μπορεί να καθοριστεί στα πειράματα που διεξάγονται σήμερα. Πριν προχωρήσουμε αναλυτικά στην εξαγωγή των σχέσεων, θα παρουσιάσουμε πρώτα τα βασικά αποτελέσματα. Η εντροπία εναγκαλισμού von Neumann S εκφράζεται σύμφωνα με την στατιστική φορτίου από την σχέση

$$S = \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^{K+1} a_n(K) C_n, \quad (5.1)$$

όπου $C_n = (-i \partial_\lambda)^n \ln(\chi(\lambda))|_{\lambda=0}$ οι προσθετέοι και $\chi(\lambda) = \langle \exp(i \lambda \hat{N}_A) \rangle$ η γεννήτρια συνάρτηση των διακυμάνσεων του αριθμού των σωματιδίων. Οι συντελεστές $a_n(K)$ που εξαρτώνται από την αποκοπή δίνονται από την σχέση

$$a_n(K) = \begin{cases} 2 \sum_{k=n-1}^K \frac{S_1(k, n-1)}{k! k} & \text{για } n \text{ άρτιο} \\ 0 & \text{για } n \text{ περιττό,} \end{cases} \quad (5.2)$$

όπου $S_1(n, m)$ οι χωρίς πρόσημο αριθμοί Stirling.

Μία παρόμοια σχέση υπάρχει και για τις εντροπίες εναγκαλισμού Renyi,

$$S_n = \lim_{R \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^{nR} \beta_k(n, R) C_k. \quad (5.3)$$

Σε αυτή την περίπτωση οι συντελεστές εξαρτώνται από το R αποκοπής σύμφωνα με την σχέση

$$\beta_k(n, R) = \begin{cases} \frac{1}{1-n} \sum_{r=1}^R \sum_{m=0}^r \sum_{s=k}^{nr} (-1)^{r+s+nr+nm} \times \frac{1}{r} \binom{R}{r} \binom{r}{m} \binom{nm}{nr-s} \frac{S_1(s, k)}{(s-1)!} & \text{για } k \text{ άρτιο} \\ 0 & \text{για } k \text{ περιττό.} \end{cases} \quad (5.4)$$

Αυτό που παρουσιάζει ενδιαφέρον είναι ότι μόνο οι άρτιοι όροι συνεισφέρουν στις σειρές (5.1) και (5.3). Αυτό οφείλεται στο ότι οι εντροπίες εναγκαλισμού είναι συμμετρικές μεταξύ του υποσυστήματος και του συμπληρώματος του των καθαρών καταστάσεων. Παράδειγμα αποτελεί η επαφή κβαντικού σημείου (Quantum Point Contact). Η χρονοεξαρτημένη γεννήτρια συνάρτηση ορίζεται από την σχέση

$$\chi(\lambda) = \sum_m P_m(t) e^{i\lambda m}, \quad (5.5)$$

όπου P_m είναι η πιθανότητα της μετάδοσης m φορτίων από το ένα υποσύστημα, στο συμπληρωματικό του. Η διατήρηση του φορτίου επιβάλλει ότι ο αριθμός των ηλεκτρονίων m που συλλέγεται στον έναν οδηγό της επαφής είναι ίσος με τα $-m$ φορτία που συλλέγονται στον άλλο. Τότε μόνο οι όροι άρτιας τάξης είναι συμμετρικοί στους δύο οδηγούς οπότε οι εντροπίες εναγκαλισμού της επαφής εξαρτώνται μόνο από αυτούς.

Από την στιγμή όπου οι σχέσεις (5.1) και (5.3) ισχύουν καθολικά για κάθε μη-αλληλεπιδρόν σύστημα, οι εντροπίες εναγκαλισμού εξαρτώνται μόνο από τους όρους άρτιας τάξης, ανεξάρτητα με το αν αυτοί είναι συμμετρικοί μεταξύ των επιμέρους ανταλλαγών των δύο υποσυστημάτων. Οι δύο σειρές δίνουν σαν αποτέλεσμα μία ακολουθία προσεγγίσεων στις εντροπίες εναγκαλισμού, των οποίων η ακρίβεια αυξάνεται σε συνάρτηση με τον αριθμό των όρων.

Σε αυτό το σημείο θα εξετάσουμε ένα απλό παράδειγμα για το πως μπορούμε να χειριστούμε αυτές τις σειρές. Έστω ότι έχουμε δύο spin στην κατάσταση

$$|D\rangle_{AB} = \sqrt{1-D} |\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B - \sqrt{D} |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B, \quad (5.6)$$

με $0 \leq D \leq 1$. Για $D=1/2$ τα spin είναι στην πλήρως εναγκαλισμένη κατάσταση. Είναι πολύ εύκολο να υπολογίσουμε την εντροπία εναγκαλισμού του spin A σε συνάρτηση με το spin B (ή και το ανάποδο) κατευθείαν μέσω της σχέσης $S(\hat{\rho}_A) = -\text{Tr}(\hat{\rho}_A \ln \hat{\rho}_A)$,

$$S = -[D \ln D + (1-D) \ln(1-D)], \quad (5.7)$$

όπου είναι μηδέν για $D=0, 1$ και μέγιστη για $D=1/2$. Η εντροπία εναγκαλισμού μπορεί να προκύψει και από τις διακυμάνσεις των spin χρησιμοποιώντας την σχέση (5.1). Για $D=0, 1$ τα δύο spin είναι σε μία καλά καθορισμένη κατάσταση στην οποία δεν λαμβάνουν χώρα διακυμάνσεις. Αντίθετα όταν $D=1/2$ οι δύο καταστάσεις του spin A είναι εξίσου πιθανές και το z-στοιχείο κάθε κάθε spin κυμαίνεται. Μπορούμε να πούμε ότι τα δύο spin μοιράζονται μία διέγερση: για την κατάσταση $|\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B$ το spin A είναι διεγερμένο, ενώ για την κατάσταση $|\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B$ η διέγερση μεταφέρεται στο spin B.

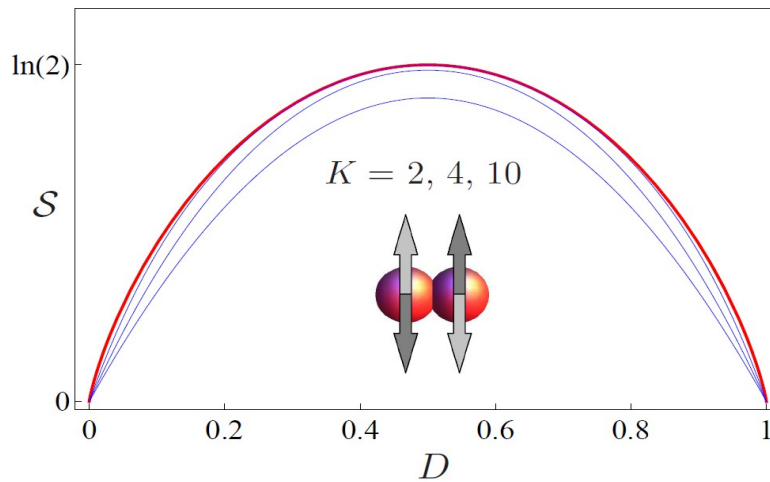
Η κατανομή $P(m)$ των αριθμών m των διεγέρσεων που έχουν μεταφερθεί μεταξύ των spin A και spin B είναι

$$P(m) = \begin{cases} 1-D & \text{για } m=0 \\ D & \text{για } m=1 \\ 0 & \text{σε κάθε άλλη περίπτωση.} \end{cases} \quad (5.8)$$

Η αντίστοιχη γεννήτρια συνάρτηση είναι

$$\chi(\lambda) = \sum_m P(m) e^{i\lambda m} = 1 + (e^{i\lambda} - 1)D. \quad (5.9)$$

Στο πιο κάτω σχήμα βλέπουμε την εντροπία εναγκαλισμού όπως έχει υπολογιστεί από την σειρά (5.1) με αύξοντα αριθμό αποκοπής K μαζί με το ακριβές αποτέλεσμα, εξίσωση (5.7).



Σχήμα 5.1: Η εντροπία εναγκαλισμού ενός ζεύγους spin. Τα δύο spin είναι στην κατάσταση $|D\rangle$ η οποία είναι πλήρως εναγκαλισμένη για $D=1/2$, ενώ είναι μία κατάσταση παραγόντων για $D=0, 1$. Η κόκκινη καμπύλη δίνει το ακριβές αποτέλεσμα από την εξίσωση (5.7), ενώ οι μπλε καμπύλες αποδίδουν γραφικά την σειρά (5.1) για αύξοντα αριθμό αποκοπής K . Έχει αποδειχθεί ότι για $K=10$ η σειρά συγκλίνει στο ακριβές αποτέλεσμα.

Σε αυτό το σημείο πρέπει να επισημανθεί ότι η σύγκλιση δεν είναι ομοιόμορφη για κάθε τιμή του D .

5.1 Εξαγωγή των σχέσεων

Σε αυτό το σημείο θα δείξουμε αναλυτικά την εξαγωγή των σειρών για την εντροπία εναγκαλισμού von Neumann και την εντροπία εναγκαλισμού Renyi.

Σαν αρχή θα πάρουμε τις εκφράσεις για την εντροπία εναγκαλισμού

$$S = -\text{Tr} [M \ln M + (1-M) \ln (1-M)] \quad (5.10)$$

και την γεννήτρια συνάρτηση των όρων

$$\ln \chi(\lambda) = \ln \det \{ [1 + (e^{i\lambda} - 1)M] e^{-i\lambda Q} \} \quad (5.11)$$

$$= \text{Tr} \ln \{ [1 + (e^{i\lambda} - 1)M] e^{-i\lambda Q} \} \quad (5.12)$$

όπου οι όροι του πίνακα συσχετισμού M και του παράγοντα φάσης $e^{-i\lambda Q}$ θα απαλειφθούν από το πρόβλημα. Στα πλεγματικά μοντέλα μη αλληλεπιδρώντων φερμιονίων τα στοιχεία του M είναι οι συναρτήσεις Green $M_{i,j} = \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \rangle$ των φερμιονικών βαθμών ελευθερίας. Ο M έχει πραγματικές ιδιοτιμές οι οποίες κυμαίνονται από 0 μέχρι 1 λόγω της στατιστικής των φερμιονίων.

Προκειμένου να συσχετίσουμε την εντροπία von Neumann με τους όρους των διακυμάνσεων του φορτίου, θα πρέπει πρώτα να αναπτύξουμε τους λογαρίθμους της σχέσης (5.10)

γύρω από το $M=0$, 1 με αποτέλεσμα

$$S = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{A_k}{k}, \quad (5.13)$$

με συντελεστές

$$A_k = \text{Tr}[M(1-M)^k + M^k(1-M)]. \quad (5.14)$$

Στο επόμενο βήμα συσχετίζουμε το $\text{Tr}(M^k)$ με την στατιστική του φορτίου που περιγράφεται από την (5.12). Σε αυτό το σημείο οι παράγοντες

$$F_k = \partial_{\lambda}^k \ln \chi_f(\lambda)|_{\lambda=0}, \quad (5.15)$$

θα φανούν ιδιαίτερα χρήσιμοι, όπου

$$\ln \chi_f(\lambda) = \ln \chi(-i \ln(\lambda+1)) \quad (5.16)$$

είναι η γεννήτρια συνάρτηση των όρων. Οι όροι που αντιστοιχούν στην γεννήτρια συνάρτηση (2.12) δίνονται από την σχέση

$$F_k = (-1)^{k-1} (k-1)! [\text{Tr}(M^k) - Q]. \quad (5.17)$$

Λύνοντας ως προς $\text{Tr}(M^k)$ και αντικαθιστώντας στην (2.14) παίρνουμε ότι

$$A_k = (-1)^{k-1} \left[\frac{F_k}{(k-1)!} + \frac{F_{k+1}}{k!} \right] + \sum_{r=0}^k \binom{k}{r} \frac{F_{r+1}}{r!}, \quad (5.18)$$

και από την (2.13)

$$S = \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \frac{(-1)^{k-1}}{k} \left[\frac{F_k}{(k-1)!} + \frac{F_{k+1}}{k!} \right] + \sum_{r=0}^k \binom{k}{r} \frac{F_{r+1}}{r! k} \right\}. \quad (5.19)$$

Ο παράγοντας φάσης Q δεν συνεισφέρει στο άθροισμα.

Η σχέση (5.19) περιγράφει την εντροπία von Neumann καθαρά μέσω παραγοντικών όρων οι οποίοι είναι μετρήσιμοι. Παρόλαυτα είναι πιο βολικό και κομψό να εκφράσουμε την S με συνήθεις όρους. Οι παραγοντικοί όροι μπορούν να εκφραστούν σαν άθροισμα συνήθων όρων ως ακολούθως

$$F_{k \geq 1} = \sum_{n=1}^k (-1)^{k-n} S_1(k, n) C_n, \quad (5.20)$$

όπου $S_1(k, n)$ είναι οι χωρίς πρόσημο αριθμοί Stirling. Μπορούμε κατά συνέπεια να γράψουμε την (5.18) ως

$$A_k = \sum_{n=1}^{k+1} (-1)^{n-1} \left[\frac{S_1(k, n)}{(k-1)!} - \frac{S_1(k+1, n)}{k!} \right] C_n - \sum_{r=0}^k \sum_{n=1}^{r+1} (-1)^{r-n} \binom{k}{r} \frac{S_1(r+1, n)}{r!} C_n. \quad (5.21)$$

Σε αυτό το σημείο επισημαίνεται ότι $S_1(k, k+1)=0$. Χρησιμοποιώντας την αναδρομική σχέση $S_1(k+1, n)=S_1(k, n-1)+k S_1(k, n)$ στον πρώτο όρο και αλλάζοντας την σειρά των αθροισμάτων στον δεύτερο, οι A_k απλοποιούνται ως

$$A_k = \sum_{n=1}^{k+1} \left\{ (-1)^n \left[\frac{S_1(k, n-1)}{k!} - \sum_{r=n-1}^k (-1)^r \binom{k}{r} \frac{S_1(r+1, n)}{r!} \right] C_n \right\}. \quad (5.22)$$

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση (2.11) προκύπτει ότι

$$S = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=2}^{k+1} \left\{ (-1)^n \left[\frac{S_1(k, n-1)}{k!k} - \sum_{r=n-1}^k (-1)^r \binom{k}{r} \frac{S_1(r+1, n)}{r!k} \right] C_n \right\}, \quad (5.23)$$

την οποία μπορούμε να επαναδιατυπώσουμε σε συνάρτηση με το C_n εισάγοντας ένα K αποκοπής στο εξωτερικό άθροισμα και αλλάζοντας την σειρά των αθροισμάτων. Τελικά παίρνουμε ότι

$$S = \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{n=2}^{K+1} a_n(K) C_n, \quad (5.24)$$

όπου οι συντελεστές $a_n(K)$ που εξαρτώνται από την αποκοπή είναι

$$a_n(K) = (-1)^n \sum_{k=n-1}^K \left\{ \frac{1}{k} \left[\frac{S_1(k, n-1)}{k!} - \sum_{r=n-1}^k (-1)^r \binom{k}{r} \frac{S_1(r+1, n)}{r!} \right] \right\}. \quad (5.25)$$

Μπορούμε να δείξουμε αριθμητικά ότι για τυχαίους ακέραιους $n, k \geq -1$

$$\sum_{r=n-1}^k (-1)^r \binom{k}{r} \frac{S_1(r+1, n)}{r!} = (-1)^{n-1} \frac{S_1(k, n-1)}{k!}, \quad (5.26)$$

οπότε τελικά παίρνουμε την εξίσωση (2.2).

Σε αυτό το σημείο θα ασχοληθούμε με τις εντροπίες Renyi, οι οποίες είναι της μορφής

$$S_n = \frac{1}{1-n} \text{Tr} \{ \ln [M^n + (1-M)^n] \}. \quad (5.27)$$

Αρχικά αναλύουμε τον λογάριθμο της (5.27) ως

$$\ln [M^n + (1-M)^n] = - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{[(1-M^n) - (1-M)^n]^j}{j}. \quad (5.28)$$

Ακολουθώντας, με χρήση του διωνυμικού θεωρήματος, προκύπτει ότι

$$\text{Tr} \{ \ln [M^n + (1-M)^n] \} = - \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{m=0}^j \sum_{r=0}^{j-m} \sum_{s=0}^{nm} (-1)^{m+r+s} \frac{1}{j} \binom{j}{m} \binom{j-m}{r} \binom{nm}{s} \text{Tr} (M^{nr+s}). \quad (5.29)$$

Πριν χρησιμοποιήσουμε την εξίσωση (5.17) προκειμένου να γράψουμε την πιο πάνω σχέση σαν συνάρτηση των παραγοντικών όρων, θα πρέπει να δείξουμε ότι το F_0 δεν συνεισφέρει, δηλαδή

ότι η σχέση μηδενίζεται όταν $nr + s = 0$. Από την στιγμή όπου το $n > 0$ και το άθροισμα στο m γίνεται μηδέν όταν $r = s = 0$, τότε όντως κάτι τέτοιο ισχύει. Σε αυτό το σημείο μπορούμε να αντικαταστήσουμε στην εξίσωση (5.17) και επιπλέον χρησιμοποιώντας την σχέση μεταξύ των παραγοντικών και των συνήθων όρων, παίρνουμε ότι

$$\begin{aligned} Tr \{ \ln [M^n + (1-M)^n] \} = \\ - \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{m=0}^j \sum_{r=0}^{j-m} \sum_{s=0}^{nm} \sum_{w=0}^{nr+s} (-1)^{m+r+s+w} \frac{1}{j} \binom{j}{m} \binom{j-m}{r} \binom{nm}{s} \frac{S_1(nr+s, w)}{(nr+s-1)!} C_w. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Σε αυτό το σημείο μπορούμε να εισάγουμε ένα R αποκοπής στο εξωτερικό άθροισμα και να πούμε ότι $Tr \{ \ln [M^n + (1-M)^n] \} = \sum_{k=1}^{2nR} \beta_k(n, R) C_k$, όπου έπειτα από μερικές πράξεις

$$\beta_k(n, R) = \frac{1}{1-n} \sum_{r=1}^R \sum_{m=0}^r \sum_{s=k}^{nr} (-1)^{r+s+nr+nm+k} \frac{1}{r} \binom{R}{r} \binom{r}{m} \binom{nm}{nr-s} \frac{S_1(s, k)}{(s-1)!}. \quad (5.31)$$

Οι συντελεστές $\beta_k(n, R)$ μηδενίζονται για $k > nR$, οπότε καταλήγουμε στην σχέση (5.4).

5.2 Οι εντροπίες Renyi και το φάσμα του εναγκαλισμού

Σε αυτό το σημείο θα παρουσιάσουμε μία μέθοδο για τον υπολογισμό του πλήρους φάσματος του εναγκαλισμού μίας ανηγμένης μήτρας πυκνότητας από τις αντίστοιχες εντροπίες Renyi ακέριαις τάξης. Συγκεκριμένα για D βαθμούς ελευθερίας στην ανηγμένη μήτρα πυκνότητας, απαιτούνται μόνο οι εντροπίες Renyi τάξης $2, \dots, D$. Παρόλο που στην προκειμένη περίπτωση δεν ενδιαφερόμαστε για μη αλληλεπιδρώντα φερμιόνια, η μέθοδος αυτή είναι τελείως γενική και μπορεί να εφαρμοστεί σε οποιαδήποτε μήτρα πυκνότητας.

Έστω ότι έχουμε μία ανηγμένη μήτρα πυκνότητας ρ , $D \times D$. Οι εντροπίες Renyi, για $a > 0$ ορίζονται από την σχέση

$$S_a = \frac{1}{1-a} \ln [Tr(\rho^a)]. \quad (5.32)$$

Η εντροπία von Neumann μπορεί να υπολογιστεί παίρνοντας το όριο $a \rightarrow \infty$,

$$S = -Tr(\rho \ln \rho) = \lim_{a \rightarrow 1} S_a. \quad (5.33)$$

Το R_a είναι το ίχνος της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας για δύναμη τάξης a .

$$R_a = Tr(\rho^a) = e^{(1-a)S_a}. \quad (5.34)$$

Για μία κανονικοποιημένη μήτρα πυκνότητας είναι $R_1 = 1$. Ο πίνακας $D \times D$ ορίζεται ως

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & \dots & \\ R_2 & 1 & 2 & 0 & \dots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ R_{D-1} & R_{D-2} & \dots & 1 & D-1 \\ R_D & R_{D-1} & \dots & R_2 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.35)$$

είναι δηλαδή ένας σχεδόν κάτω τριγωνικός πίνακας. Για παράδειγμα, για $D=5$, έχουμε

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ R_2 & 1 & 2 & 0 & 0 \\ R_3 & R_2 & 1 & 3 & 0 \\ R_4 & R_3 & R_2 & 1 & 4 \\ R_5 & R_4 & R_3 & R_2 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.36)$$

Συμβολίζουμε με E_n τον πίνακα που παίρνουμε από τον πρώτο υποπίνακα $n \times n$ του E . Τότε μπορούμε να ορίσουμε το πολυώνυμο

$$P(x) = \sum_{n=0}^D \frac{(-1)^n}{n!} (\det E_n) x^{D-n}, \quad (5.37)$$

όπου $\det E_0 = 1$.

Το $P(x)$ είναι το χαρακτηριστικό πολυώνυμο της μήτρας πυκνότητας ρ , δηλαδή είναι $P(x) = \det(xI - \rho)$. Αν θέλουμε να βρούμε τις ιδιοτιμές της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας, τότε αρκεί να προσδιορίσουμε τις ρίζες του $P(x)$. Για παράδειγμα, στην περίπτωση όπου η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας περιγράφει μία καθαρή κατάσταση, τότε οι εντροπίες Renyi θα ήταν ίσες με μηδέν και κατά συνέπεια $R_2 = R_3 = \dots = R_D = 1$. Τότε

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 3 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 4 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.38)$$

Μπορούμε να δείξουμε ότι εκτός από το $\det E_0 = 1$ μόνο το $\det E_1 = 1$ είναι μη μηδενικό. Το αντίστοιχο χαρακτηριστικό πολυώνυμο θα είναι

$$P(x) = x^{D-1}(x-1), \quad (5.39)$$

και οι ιδιοτιμές θα είναι 1 (πολλαπλότητας 1) και 0 (πολλαπλότητας $D-1$). Αντίθετα, στην περίπτωση του στατιστικού μείγματος όπου το ρ έχει στοιχεία $1/D$ στην κύρια διαγώνιο και μηδέν οπουδήποτε αλλού, θα έχουμε $R_n = D^{1-n}$. Το χαρακτηριστικό πολυώνυμο σε αυτή την περίπτωση θα είναι

$$P(x) = \left(x - \frac{1}{D}\right)^D, \quad (5.39)$$

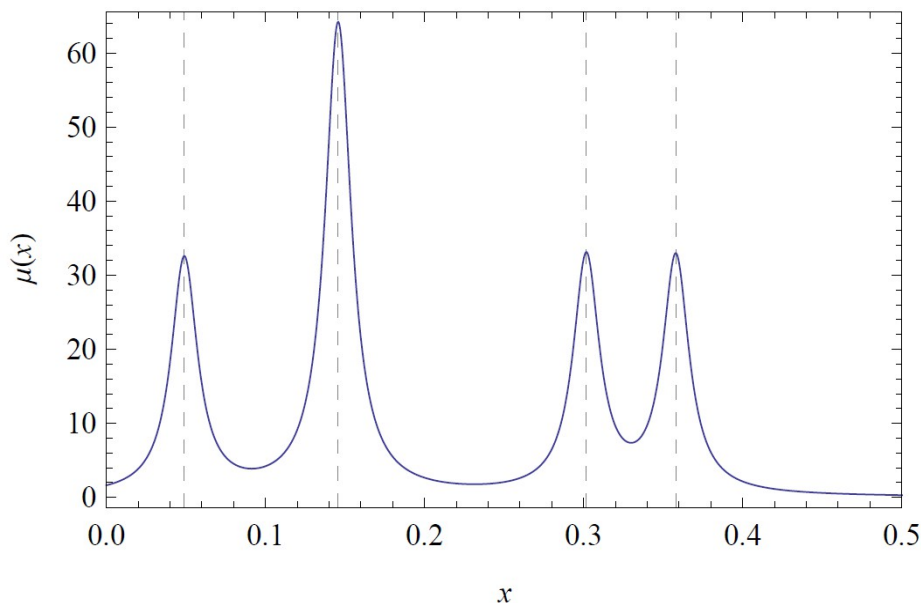
ενώ οι ιδιοτιμές θα είναι $1/D$ (πολλαπλότητας D). Αυτό βέβαια μπορεί να προκύψει χωρίς να ξέρουμε όλη την ανηγμένη μήτρα πυκνότητας, αλλά μόνο τις εντροπίες Renyi και από την σχέση (5.37). Η συνάρτηση της πυκνότητας του φάσματος είναι

$$\mu(z) = \frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \text{Im} \partial_z P(z - i\varepsilon), \quad (5.40)$$

όπου το ε είναι ένας αυθαίρετος θετικός αριθμός κοντά στο μηδέν, προκειμένου να έχουμε αυξημένη ακρίβεια. Έστω για παράδειγμα ότι οι ιδιοτιμές της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας ρ είναι

$$0.0489694, 0.145703, 0.145703, 0.301666, 0.357959 \quad (5.41)$$

όπου έχουμε συμπεριλάβει ένα ζεύγος εκφυλισμένων ιδιοτιμών προκειμένου να δούμε την επίδραση του εκφυλισμού. Τότε διεξάγοντας τον πιο πάνω υπολογισμό για το $P(x)$ και χρησιμοποιώντας το πολυώνυμο της (5.40) με $\varepsilon=0.01$, παίρνουμε το φάσμα πυκνότητας του πιο κάτω σχήματος.



Σχήμα 5.2: Η συνάρτηση της πυκνότητας του φάσματος που αντιστοιχεί στις ιδιοτιμές της (5.41), χρησιμοποιώντας την σχέση (5.40) με $\varepsilon=0.01$.

6. Εναγκαλισμός μεταξύ καταμερισμών σωματιδίων σε καταστάσεις πολλών σωματιδίων

Σε αυτό το κεφάλαιο θα εξετάσουμε τον εναγκαλισμό μεταξύ δύο υποσυνόλων σωματιδίων τα οποία συνθέτουν το συνολικό σύστημα. Θα αναπτύξουμε την γενική δομή του εναγκαλισμού σωματιδίων σε καταστάσεις πολλών φερμιονίων, η οποία είναι ανάλογη αυτής του εναγκαλισμού μεταξύ περιοχών του χώρου που μελετήθηκαν σε προηγούμενα κεφάλαια. Για τις βασικές ιδιότητες του εναγκαλισμού μεταξύ σωματιδίων θα χρησιμοποιήσουμε αρχικά κάποια απλά κβαντικά μοντέλα.

Ο εναγκαλισμός μεταξύ καταμερισμών σωματιδίων είναι εν γέννη διαφορετικός από τον εναγκαλισμό μεταξύ περιοχών του χώρου, ενώ μπορεί να διευρύνει την ερμηνεία διάφορων φυσικών πτυχών ενός συστήματος. Δεδομένου ενός καταμερισμού, ο εναγκαλισμός μπορεί να ποσοτικοποιηθεί με χρησιμοποιώντας διάφορα μέτρα. Η βασική ποσότητα είναι η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας της κατανομής A , $\rho_A = \text{tr}_B \rho$ η οποία προκύπτει παίρνοντας το ίχνος B βαθμών ελευθερίας. Θεωρούμε ότι η κατάσταση που περιγράφει το σύστημα είναι καθαρή με μήτρα πυκνότητας $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$. Από εκεί και πέρα μπορούν να εξαχθούν πολλά μεγέθη για την ποσοτικοποίηση του εναγκαλισμού. Σε αυτό το κεφάλαιο θα περιοριστούμε στην εντροπία εναγκαλισμού που ορίζεται ως $S_A = -\text{tr}[\rho_A \ln \rho_A]$.

6.1 Ένα βασικό παράδειγμα

Σε αυτό το παράδειγμα θα εξετάσουμε μία απλή περίπτωση προκειμένου να γίνει πιο αντιληπτή η έννοια του καταμερισμού σωματιδίων και να τονιστούν οι διαφορές της με την χωρική κατανομή.

Έστω ότι έχουμε τρία φερμιόνια, τα α, β, γ σε τρεις θέσεις (ή τροχιακά). Θα χρησιμοποιήσουμε την κυματοσυνάρτηση

$$|\psi\rangle = (a_1 c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger + a_2 c_\beta^\dagger c_\gamma^\dagger) |000\rangle = \alpha_1 |110\rangle + \alpha_2 |011\rangle.$$

Για τον συνήθη χωρική καταμερισμό, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι η κατανομή A αποτελείται μόνο από την θέση α . Τότε η ανηγμένη βάση της A αποτελείται από τις α μικροκαταστάσεις $|0\rangle$ και $|1\rangle = c_\alpha^\dagger |0\rangle$. Η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας σε αυτή την βάση θα είναι $\rho_A = \begin{pmatrix} |a_2|^2 & 0 \\ 0 & |a_1|^2 \end{pmatrix}$.

Η A θα μπορούσε επίσης να εμπεριέχει τις θέσεις α και β . Τότε η ανηγμένη βάση για την A εμπεριέχει 4 καταστάσεις, $|00\rangle, |01\rangle = c_\beta^\dagger |0\rangle, |10\rangle = c_\alpha^\dagger |0\rangle$ και $|11\rangle = c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger |0\rangle$ και σε αυτή την βάση θα είναι

$$\rho_A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |a|^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |a|^2 \end{pmatrix}.$$

Τώρα θα δούμε τι γίνεται στον καταμερισμό των σωματιδίων, για την οποία η κυματοσυνάρτηση θα πρέπει να εκφραστεί σύμφωνα με την πρώτη κβάντωση και να είναι αυστηρά αντισυμμετρική

$$|\psi\rangle = \alpha_1 [\varphi_\alpha(1)\varphi_\beta(2) - \varphi_\alpha(2)\varphi_\beta(1)]/\sqrt{2} + \alpha_2 [\varphi_\beta(1)\varphi_\gamma(2) - \varphi_\beta(2)\varphi_\gamma(1)]/\sqrt{2}.$$

Σε αυτή την περίπτωση μπορούμε να διακρίνουμε τα φερμιόνια οπότε μπορούμε να εξετάσουμε τον εναγκαλισμό μεταξύ του σωματιδίου 1 και του σωματιδίου 2 (η κατανομή A εμπεριέχει το σωματίδιο 1). Από την στιγμή που το σωματίδιο 1 μπορεί να βρίσκεται σε οποιαδήποτε από τις τρεις θέσεις, η ανηγμένη βάση για την A μπορεί να χαρακτηριστεί από τα $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle$. Η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας θα είναι

$$\rho_A = \begin{pmatrix} |a|^2/2 & 0 & -a_1 a_2^* \\ 0 & 1/2 & 0 \\ -a_1^* a_2 & 0 & |a_2|^2/2 \end{pmatrix}.$$

Από αυτό το παράδειγμα μπορούμε να δούμε ότι η κατανομή σύμφωνα με τα σωματίδια διαφέρει σημαντικά σε σχέση με την χωρική. Άλλο ένα βασικό συμπέρασμα είναι ότι σε αυτή την περίπτωση, ο εναγκαλισμός επηρεάζεται από την αντισυμμετρικότητα.

6.2 Γενικές θεωρήσεις

Πριν αναλύσουμε συγκεκριμένα συστήματα, θα παρουσιάσουμε μερικά δεδομένα και υποθέσεις τα οποία βρίσκουν ευρύτερη εφαρμογή σε κβαντικές καταστάσεις πολλών σωματιδίων

6.2.1 Σύνορα

Έστω ότι έχουμε ένα πλεγματοκό σύστημα μποζονίων ή φερμιονίων χωρίς spin με N σωματίδια σε L θέσεις, όπου $N \leq L$. Σε κάθε περίπτωση, ένα φυσικό άνω όριο για την S_n καθορίζεται από το μέγεθος της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας $\rho_A = \rho_n$. Αυτό το μέγεθος είναι $\binom{L}{n} = C(L, n)$ για τα φερμιόνια και $C(L-1+n, n)$ για τα μποζόνια. Η πραγματική τάξη του ρ_n μπορεί να είναι πολύ μικρότερη για φυσικούς λόγους οπότε οι εντροπίες εναγκαλισμού είναι σημαντικά μικρότερες από αυτές των άνω ορίων όπως θα δούμε σε διάφορα παραδείγματα.

Σε ένα μποζονικό σύστημα, η S_n γίνεται μηδέν καθώς η κατάσταση ενός συμπυκνώματος Bose προκύπτει από το γινόμενο των επιμέρους καταστάσεων των μποζονίων οι οποίες είναι πανομοιότυπες. Για τα φερμιόνια η αντισυμμετρικότητα επιβάλλει την υπέρθεση των καταστάσεων γινομένου Η ρ_n μίας κατάσταση ελεύθερων ηλεκτρονίων που περιγράφεται από την ορίζουσα Slater έχει ίδιες ιδιοτιμές, οπότε η S_n είναι μη μηδενική στο κατώτερο όριο. Συνοψίζοντας

$$\text{Μποζόνια: } 0 \leq S_n \leq \ln \binom{L-1+n}{n}, \quad (6.1)$$

$$\text{Φερμιόνια: } \ln \binom{N}{n} \leq S_n \leq \ln \binom{L}{n} \quad (6.2)$$

6.2.2 Η κανονική μορφή των φερμιονίων

Για μεγάλο αριθμό φερμιονίων $N \gg 1$ έχει προταθεί η πιο κάτω μορφή του εναγκαλισμού για $n \ll N$ φερμιόνια με τα υπόλοιπα

$$S_n(N) = \ln C(N, n) + a_n + O(1/N^\gamma) \quad (6.3)$$

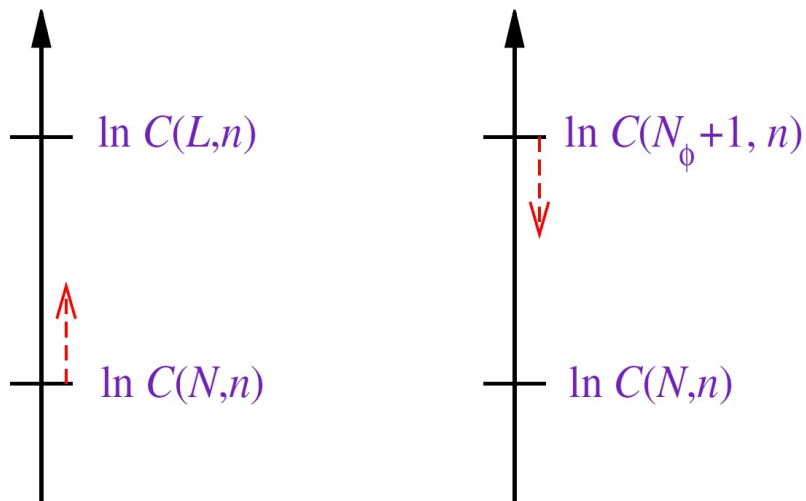
$$= n \ln N + a'_n + O(1/N^\gamma) \quad (6.4)$$

όπου $\gamma > 0$. Επισημαίνεται ότι για μεγέθη πλέγματος μεγαλύτερα του N , η γενική συμπεριφορά (6.3) υποδεικνύει ότι η εντροπία εναγκαλισμού δεν κορεννύεται στο άνω όριο.

Λεπτές επιδράσεις λόγω συσχετισμών εμπεριέχονται στην συμπεριφορά $O(1)$ του a_n ή και μερικές φορές του $O(1/N^\gamma)$. Προκειμένου να πάρουμε μία ιδέα για το πως αυτές οι επιδράσεις εμφανίζονται στο a_n , θα εξετάσουμε την συμπεριφορά του για διάφορες περιπτώσεις καταστάσεων. Για τα ελεύθερα φερμιόνια καταστάσεων κατανεμημένου φορτίου (FF), για φερμιονικά μοντέλα χωρίς spin (CDW) και για τις καταστάσεις Laughlin θα έχουμε

$$a_n(F F) = 0, \quad a_n(CDW) = \ln 2, \quad a_n(Laughlin) = n \ln m.$$

Οι καταστάσεις που συσχετίζονται με λιγότερο “τετριμμένο” τρόπο έχουν μεγαλύτερη εξάρτηση n στο a_n . Από αυτό συμπεραίνουμε ότι η συνάρτηση a_n αποτελεί μέτρο του συσχετισμού σε φερμιονικές καταστάσεις.



Σχήμα 6.1: Άνω και κάτω όρια στον εναγκαλισμό μεταξύ κατανομών φορτίου σε φερμιονικά συστήματα. Αριστερά: συνήθης περίπτωση όπως αυτή των μετακινούμενων ηλεκτρονίων σε ένα κανονικό πλέγμα. Δεξιά: Φερμιόνια σε μία επίπεδη ζώνη ή σε μία στάθμη Landau, με μακροσκοπικό εκφυλισμό.

6.2.3 Η ειδική περίπτωση του μακροσκοπικού εκφυλισμού

Η περίπτωση στην οποία το φάσμα ενός σωματιδίου εμφανίζει μία θεμελιώδη κατάσταση με εκφυλισμό μεγαλύτερο του N θα πρέπει να αντιμετωπίζεται με προσοχή. Σαν παράδειγμα μπορούμε να πάρουμε τις καταστάσεις του κλασματικού φαινομένου Hall (fractional quantum hall) τις οποίες θα εξετάσουμε πιο κάτω. Για τις εν λόγω καταστάσεις, η αντίστοιχη στάθμη Landau είναι πάρα πολύ εκφυλισμένη και μερικώς πληρωμένη. Άλλο ένα παράδειγμα είναι οι μακροσκοπικά εκφυλισμένες “επίπεδες ζώνες” οι οποίες είναι επίσης μερικώς πληρωμένες. Συμβολίζοντας τον εκφυλισμό ως $N_\phi + 1$, τα ανώτερα όρια για τα φερμιόνια και τα μποζόνια θα είναι

$$S_n \leq \ln \binom{N_\phi + 1}{n}, \quad S_n \leq \ln \binom{(N_\phi + 1) + n - 1}{n}.$$

Αυτό είναι παρόμοιο με την περίπτωση των N σωματιδίων σε L θέσεις που είδαμε πιο πάνω (Τα κατώτερα όρια είναι τα ίδια). Η βασική διαφορά είναι ότι για τα μη αλληλεπιδρώντα σωματίδια σε μία επίπεδη ζώνη, η S_n θα είναι ίση με το ανώτερο όριο, ενώ στην συνήθη περίπτωση είναι ίση με το κατώτερο. Στον μακροσκοπικό εκφυλισμό, οι αλληλεπιδράσεις μειώνουν τον εναγκαλισμό μεταξύ των σωματιδίων από το ανώτερο όριο, εν αντιθέσει με την συνήθη περίπτωση όπου οι αλληλεπιδράσεις αυξάνουν τον εναγκαλισμό από το κατώτερο όριο. Αυτό φαίνεται στο σχήμα 6.1.

6.2.4 Σχέσεις με τις συναρτήσεις συσχετισμού

Σε αυτή την ενότητα θα εξετάσουμε την σχέση μεταξύ του εναγκαλισμού κατανομών σωματιδίων και των συναρτήσεων συσχετισμού.

Στην απλούστερη περίπτωση, $n=1$, η εντροπία εναγκαλισμού του ενός σωματιδίου S_1 μπορεί να προκύψει από τις αντίστοιχες συναρτήσεις συσχετισμού ή από τις πληρότητες των καταστάσεων ενός σωματιδίου. Για παράδειγμα, για μονοδιάστατα συστήματα, η S_1 μπορεί να εκφραστεί μέσω των αριθμών κατάληψης της ορμής, οι οποίοι προκύπτουν από μετασχηματισμούς Fourier στην μήτρα πυκνότητας: $c(k) = L^{-1} \int_0^L dx \rho_1(x) \cos(2\pi k x/L)$, όπου L το μέγεθος του συστήματος. Τότε

$$S_1 = - \sum_k c(k) \ln c(k).$$

Γενικότερα, για $n > 1$ τα στοιχεία της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας είναι ανάλογα των συναρτήσεων συσχετισμού. Η ακριβής σχέση για την μονοδιάστατη συνεχή περίπτωση είναι

$$\rho_n(\vec{x}_n, \vec{y}_n) = \frac{(N-n)!}{N!} \langle \Psi | \varphi^\dagger(x_1) \dots \varphi^\dagger(x_n) \varphi^\dagger(y_n) \dots \varphi^\dagger(y_1) | \Psi \rangle,$$

όπου μέσω των “διανυσμάτων” \vec{x}_n, \vec{y}_n αποδίδονται οι συντεταγμένες n σωματιδίων και

$$\rho_n(\vec{x}_n, \vec{y}_n) = \int dz_{n+1} \dots dz_N \Psi^*(x_1, \dots, x_n, z_{n+1}, \dots, z_N) \Psi(y_1, \dots, y_n, z_{n+1}, \dots, z_N).$$

6.3 Φερμιονικά συστήματα: αντισυμμετρικότητα και συσχετισμοί

Στις πιο κάτω ενότητες θα δείξουμε μερικά αριθμητικά αποτελέσματα μίας φερμιονικής αλυσίδας χωρίς spin με αλληλεπιδράσεις σε επίπεδο πρώτων γειτόνων (μοντέλο t-V).

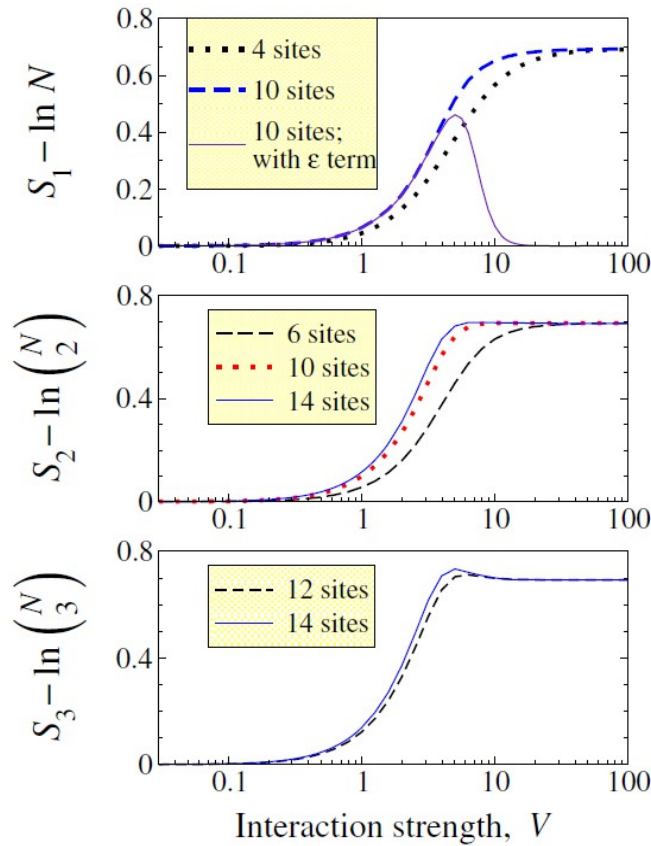
6.3.1 Φερμιόνια χωρίς spin σε μία διάσταση

Θεωρούμε ότι έχουμε N φερμιόνια χωρίς spin σε μία αλυσίδα L θέσεων με περιοδικές συνοριακές συνθήκες:

$$H = - \sum_i (c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i) + V \sum_i n_i n_{i+1}.$$

Μέσω του μετασχηματισμού Jordan-Wigner, αυτό το μοντέλο μπορεί να απεικονιστεί σύμφωνα με το ανισοτροπικό μοντέλο Heisenberg (XXZ) μίας αλυσίδας spin με παράγοντα ανισοτροπίας $\Delta = V/2$.

Για $V=0$ (ελεύθερα φερμιόνια), η θεμελιώδης κατάσταση είναι απλή και περιγράφεται από την θέση και την ορμή. Είναι δηλαδή μία ορίζουσα Slater N φερμιονίων τα οποία καταλαμβάνουν τις N καταστάσεις ελαχίστων ενεργειών. Η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας n σωματιδίων έχει $C(N, n)$ ίδιες ιδιοτιμές, οπότε η $S_n = \ln[C(N, n)]$, είναι ανεξάρτητη από το μέγεθος L του πλέγματος.



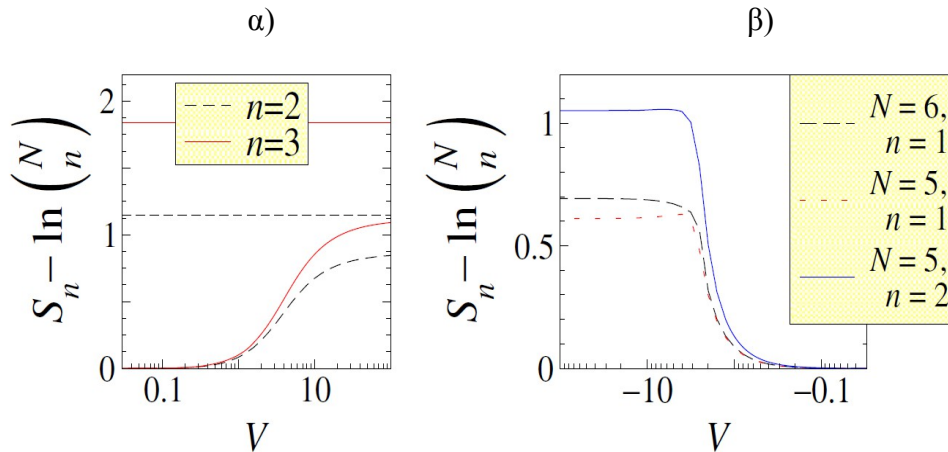
Σχήμα 6.2: Για $n=1$, $n=2$ και $n=3$ η εντροπία εναγκαλισμού στο ήμι-πληρωμένο μοντέλο $t-V$ ($N=L/2$). Η συνεισφορά $\ln[C(N, n)]$ των ελεύθερων φερμιονίων έχει αφαιρεθεί. Το διάγραμμα για $n=1$ απεικονίζει και την επίδραση του όρου σπασίματος της συμμετρίας $\varepsilon c_1^\dagger c_1$ με $\varepsilon=0.1$.

Για απωστικές αλληλεπιδράσεις στην ημι-πλήρωση ($N = 1/2 L$), αυτό το μοντέλο έχει κβαντική μετάβαση φάσης για $V=2$. Από μία φάση τύπου υγρού Luttinger για μικρά V , σε μία φάση κύματος πυκνότητας φορτίου (CDW) για μεγάλα V . Αυτό αντικατοπτρίζει την μετάβαση μεταξύ μίας φάσης Ising XY χωρίς χάσμα και μίας φάσης με χάσμα, στο μοντέλο XXZ για $\Delta=1$.

Για $N=1/2L$ η θεμελιώδης κατάσταση και κατά συνέπεια ο σωματιδιακός εναγκαλισμός μπορούν να γίνουν αντιληπτά στο όριο άπειρου V . Η θεμελιώδης κατάσταση είναι μία ισοδύναμη υπέρθεση δύο “κρυσταλλικών” καταστάσεων και κάθε μία από αυτές δίνει μία ξεχωριστή συνεισφορά στην ανηγμένη μήτρα πυκνότητας. Η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας είναι της τάξης $2C(N, n)$ και ίδιες ιδιοτιμές: $S_n = \ln[2C(N, n)]$. Σύμφωνα με τον συμβολισμό της εξίσωσης 6.3, ο όρος a_n παρεμβάλλεται μεταξύ του $a_n=0$ για $V=0$ και $a_n \rightarrow \ln 2$ για $V \rightarrow \infty$ στην ημι-πλήρωση. Οι λεπτομέρειες της παρεμβολής εξαρτώνται από τα n και N .

Στο σχήμα 6.2 βλέπουμε την $S_n(V)$ στην ημι-πλήρωση η οποία έχει υπολογιστεί από κυματοσυναρτήσεις που έχουν παρθεί από αριθμητική διαγωνοποίηση. Η συνάρτηση $S_n(V)$ εξελίσσεται από $S_{FF} = \ln[C(N, n)]$ σε $\ln[2C(N, n)] \simeq S_{FF} + 0.6931$.

Για μικρό αριθμό σωματιδίων n , δεν υπάρχουν ενδείξεις από τις εντροπίες εναγκαλισμού για μετάβαση φάσης για $V=2$, ακόμα και στο όριο $N \rightarrow \infty$. Αυτό δεν αποτελεί έκπληξη, καθώς ο χώρος συνεισφέρει ελάχιστα στον σωματιδιακό εναγκαλισμό. Κατά συνέπεια η S_n είναι δύσκολο να αποκλείει με βάση το μήκος του συσχετισμού ή με βάση διακυμάνσεις σε μεγάλη κλίμακα. Αυτό που δεν είναι ξεκάθαρο, είναι το τι συμβαίνει για πεπερασμένο n/N .



Σχήμα 6.3: α) Η S_n για $N=7$, $L=12 \neq 2N$. Οι οριζόντιες γραμμές αντιστοιχούν στα μέγιστα όρια $\ln[C(L, n)]$. β) Αρνητικό V , ημι-πλήρωση. Η συνεισφορά των ελεύθερων φερμιονίων $\ln[C(N, n)]$ έχει αφαιρεθεί από κάθε περίπτωση.

Για $N \neq L/2$, η συμπεριφορά είναι παρόμοια με αυτήν στην ημι-πλήρωση, όπου το a_n αυξάνεται από το 0 μέχρι μία τιμή $O(1)$ όσο το V πάει από το μηδέν στο άπειρο. Παρόλαυτα η περίπτωση για το όριο $V \rightarrow \infty$ δεν είναι απλή. Επίσης το $a_n(V)$ φαίνεται να παρουσιάζει μονοτονική συμπεριφορά, ίσως επειδή το $a_n(V \rightarrow \infty)$ δεν περιορίζεται όπως στην ημι-πληρωμένη περίπτωση.

Όταν το V είναι αρνητικό εμφανίζεται μία ελκτική αλληλεπίδραση η οποία προκαλεί την συσπείρωση των φερμιονίων. Στο όριο $V \rightarrow -\infty$ η θεμελιώδης κατάσταση είναι μία υπέρθεση L όρων, όπου ο κάθε ένας αντιπροσωπεύει ένα σύμπλεγμα των N συνολικά φερμιονίων. Αυτή η κατάσταση μπορεί να καταστραφεί όπως και στην περίπτωση του θετικού V . Στην ημι-πλήρωση με άρτιο N , η κυματοσυνάρτηση για $V \rightarrow -\infty$ έχει σαν αποτέλεσμα $S_1 = \ln N + \ln 2$.

6.4 Οι καταστάσεις του κλασματικού κβαντικού φαινομένου Hall

Οι καταστάσεις του κλασματικού κβαντικού φαινομένου Hall έχουν μεγάλη σημασία στην φυσική συμπυκνωμένης ύλης, λόγω των αξιοσημείωτων ιδιοτήτων μεταφοράς που παρουσιάζουν και της εξωτικής φύσης των διεγέρσεων των οιονεί σωματιδίων.

Ο χαρακτηρισμός των ασυνήθιστων χαρακτηριστικών αυτών των καταστάσεων είναι πολύ δύσκολος χρησιμοποιώντας κλασικές ιδέες της φυσικής συμπυκνωμένης ύλης, όπως οι συναρτήσεις συσχετισμού n σημείων ή οι τοπικές παράμετροι τάξης. Κατά συνέπεια η ιδέα της χρήσης καινοτόμων μέτρων των κβαντικών συσχετισμών, όπως οι εντροπίες εναγκαλισμού, οι οποίες έχουν εμπνευστεί από την θεωρία κβαντικής πληροφορίας, για την μελέτη αυτών των

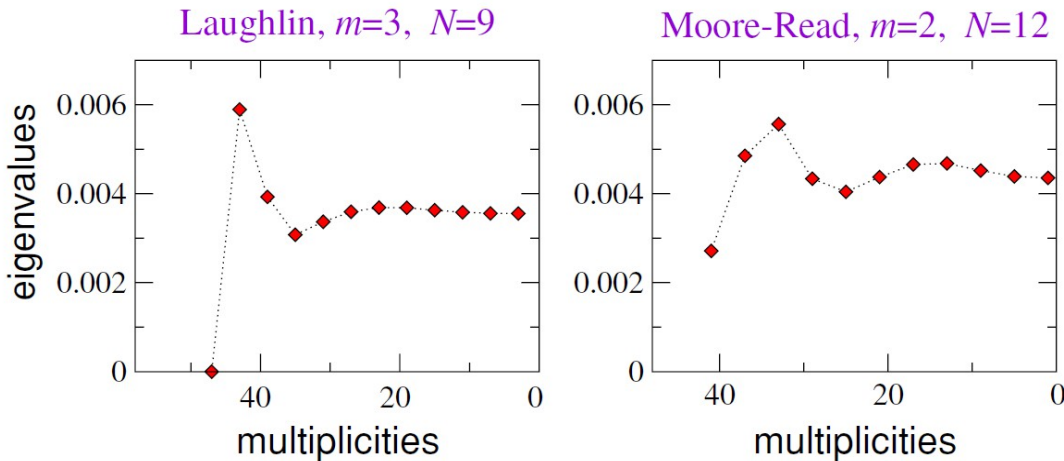
των καταστάσεων είναι πολύ ελκυστική. Μία πτυχή των καταστάσεων FQH, η τοπολογική τάξη, έχει διερευνηθεί επιτυχώς χρησιμοποιώντας τον εναγκαλισμό χωρικών κατανομών. Εδώ θα περιγράψουμε τον εναγκαλισμό σε αυτές τις καταστάσεις με βάση των εναγκαλισμό μεταξύ σωματιδιακών κατανομών.

Θα εξετάσουμε τι συμβαίνει με τις καταστάσεις Laughlin (L) και Moore-Read (MR) οι οποίες σε επίπεδη γεωμετρία αποδίδονται ως εξής:

$$\Psi_L(\{z_i\}) = \prod_{i < j} (z_i - z_j)^m e^{-\sum_i |z_i|^2/4}$$

$$\Psi_{MR}(\{z_i\}) = Pf\left(\frac{1}{z_i - z_j}\right) \prod_{i < j} (z_i - z_j)^m e^{-\sum_i |z_i|^2/4},$$

Όπου Pf είναι το αντισυμμετρικό σύμβολο Pfaffian και με $z_i = x_i + i y_i$ συμβολίζονται οι συντεταγμένες του σωματιδίου i . Οι φερμιονικές καταστάσεις Laughlin (περιτό m) περιγράφουν τις καταστάσεις FQH οι οποίες έχουν προκύψει από μετρήσεις σε ηλεκτρονικά αέρια δύο διαστάσεων σε ημιαγωγικές ετεροδομές. Οι καταστάσεις Moore-Read με $m=2$, αναμένεται να περιγράφουν τις καταστάσεις που προκαλούν την εμφάνιση ενός πλατό στις ζώνες Landau, που έχουν πληρωθεί με βάση κλάσματα με άρτιο παρανομαστή.



Σχήμα 6.4: Ιδιοτιμές για την ανηγμένη μήτρα πυκνότητας 2 σωματιδίων, σε συνάρτηση με τις πολλαπλότητες τους για τις καταστάσεις Laughlin και Moore-Read.

Θα περιγράψουμε τις καταστάσεις FQH σε σφαιρική γεωμετρία. Σε αυτή την αναπαράσταση τα φερμιόνια έχουν τοποθετηθεί πάνω σε σφαίρα που εμπεριέχει ένα μαγνητικό μονόπολο. Τα μαγνητικά τροχιακά των σχετικών σταθμών Landau εκφράζονται μέσω των τροχιακών της στροφορμής, όπου η συνολική στροφορμή είναι ίση με την μισή τιμή των κβάντων ροής

$L = 1/2 N_\phi$. Τα $N_\phi + 1$ τροχιακά αποδίδονται είτε ξεκινώντας από $l=0$ μέχρι N_ϕ , ή ξεκινώντας από $L_z = -L$ μέχρι $+L$. Για N σωματίδια με πλήρωση $\nu = 1/m$, μπορούμε να βρούμε τις καταστάσεις FQH που μας ενδιαφέρουν για $N_\phi = mN - S$, όπου το S είναι μία πεπερασμένη μετατόπιση. Οι καταστάσεις Laughlin εμφανίζονται για $S = m$, ενώ για τις καταστάσεις Moore-Read για $S = m + 1$. Η πλήρωση απαιτεί ως συνήθως $\nu = N/N_\phi$ μόνο στο θερμοδυναμικό όριο. Όλα τα τροχιακά εντοπίζονται σε έναν “παράλληλο κύκλο” της σφαίρας, εκτός από το τροχιακό με $l=0$ που εντοπίζεται σε έναν πόλο.

6.4.1 Ανηγγμένες τάξεις και τα ανώτερα όρια του εναγκαλισμού σε συστήματα φερμιονίων

Για N φερμιόνια, με n_A σωματίδια στο μπλοκ A και με συνολικό αριθμό τροχιακών $N_\phi + 1 = 2L + 1$, το ανώτερο όριο S_A^F από τον χώρο Hilbert που γίνεται η μέτρηση είναι

$$S_A \leq S_A^F = \ln \binom{N_\phi + 1}{n_A}. \quad (6.5)$$

Στις καταστάσεις FQH οι συσχετισμοί είναι τέτοιοι ώστε τα σωματίδια να αποφεύγουν το ένα το άλλο με την εντροπία να μειώνεται περαιτέρω. Οι καταστάσεις του μοντέλου FQH μπορούν να θεωρηθούν ότι είναι κυματοσυναρτήσεις που αντιστοιχούν σε μηδενική ενέργεια, μίας Χαμιλτονιανής που εξαναγκάζει ζεύγη ή τριπλέτες σωματιδίων να έρθουν στην ίδια θέση.

Μία κατάσταση Laughlin N σωματιδίων πραγματοποιείται πάνω σε ένα σύνολο $N_\phi + 1$ τροχιακών Landau που αντιστοιχούν σε $N_\phi = m(N - 1)$ κβάντα ροής. Η κατάσταση Laughlin για n_A σωματίδια, θα χρειαζόταν $N_\phi^A = m(n_A - 1)$ κβάντα ροής, κατά συνέπεια έχουμε μία περίσσεια ροής $\Delta N_\phi = N_\phi - N_\phi^A = m(N - n_A)$. Αυτό αντιστοιχεί στην εμφάνιση $n_{qh} = \Delta N_\phi$ οιονεί οπών πάνω από την θεμελιώδη κατάσταση. Κάθε μία από τις οιονεί οπές έχει $n_A + 1$ ενεργά τροχιακά το οποία διέπονται από μποζονικούς κανόνες αρίθμησης (σε κάθε ενεργό τροχιακό μπορούν να κάτσουν δύο ή και περισσότερες οπές). Από τα παραπάνω προκύπτει ότι ο αριθμός των καταστάσεων των οιονεί οπών είναι ίσος με

$$\binom{(n_A + 1) + n_{qh} - 1}{n_{qh}} = \binom{n_A + n_{qh}}{n_A} = \binom{N_\phi + 1 - (m - 1)(n_A - 1)}{n_A}, \quad (6.6)$$

κάτι που οδηγεί στο ακόλουθο ανώτερο όριο τις εντροπίας S_A :

$$S_A^{\text{bound}} = \ln \binom{N_\phi + 1 - (m - 1)(n_A - 1)}{n_A}. \quad (6.7)$$

Ο μετρητικός παράγοντας στην πιο πάνω σχέση δίνει τον αριθμό των τρόπων με τους οποίους n_A σωματίδια μπορούν να τοποθετηθούν σε $N_\phi + 1$ τροχιακά, με τέτοιο τρόπο ώστε αν π.χ ένα σωματίδιο έχει τοποθετηθεί σε δεδομένο τροχιακό l , τότε αυτό αποκλείει σωματίδια τα οποία προέρχονται από τροχιακά l' με $|l - l'| < m$.

Για την φερμιονική κατάσταση Moore-Read και για $\nu = 1/m$, με $m = 2, 4, \dots$ μπορούμε να πούμε με παρόμοιο τρόπο ότι $N_\phi = m(N - 1) - 1$. Όπως και στις καταστάσεις Laughlin, έχουμε μια περίσσεια ροής $\Delta N_\phi = N_\phi - N_\phi^A = m(N - n_A)$, μόνο που τώρα, ο αριθμός των οιονεί οπών είναι διπλάσιος από αυτόν τον αριθμό. Κατά συνέπεια $n_{qh} = 2 \Delta N_\phi$. Οπότε προκύπτει το ακόλουθο αποτέλεσμα για τον συνολικό εκφυλισμό των οιονεί οπών

$$\sum_{F=n_A \bmod 2}^{n_A} \binom{n_{qh}/2}{F} \binom{(n_A - F)/2 + n_{qh}}{n_{qh}}. \quad (6.8)$$

Όπως και πριν ο λογάριθμος της πιο πάνω έκφρασης μας δίνει το ανώτατο όριο S_A^{bound} .

Από την κατάσταση Laughlin και για $n_A \ll N$, παίρνουμε από την εξίσωση (6.7) και για μεγάλα N , ότι

$$S_A^F - S_A^{bound} = \frac{1}{N} \frac{m-1}{m} n_A (n_A - 1) + O(1/N^2).$$

Η αντίστοιχη σχέση για τις καταστάσεις Moore-Read με $m=2$ είναι

$$S_A^F - S_A^{bound} = \frac{1}{N^2} \frac{3}{4} n_A (n_A - 1) (n_A - 2) + \dots$$

Η βασική απόκλιση από την S_A^F είναι ένας όρος τριών σωματιδίων της τάξης $1/N^2$. Από το αποτέλεσμα, καταλαβαίνουμε ότι οι συσχετισμοί στο μοντέλο Moore-Read με $m=2$ βασίζονται στις επιμέρους συμπεριφορές τριών εκ των συνολικών σωματιδίων.

Για $m \neq 2$ οι διάφοροι συσχετισμοί βασίζονται στην συμπεριφορά 2 σωματιδίων, όπως στις καταστάσεις Laughlin:

$$S_A^F - S_A^{bound} = \frac{1}{N} \frac{m-2}{m} n_A (n_A - 1) + \dots$$

Σε αυτό το σημείο θα δούμε τι γίνεται με τις μποζονικές καταστάσεις Laughlin με παράγοντα πλήρωσης $\nu = 1/m$, όπου $m=2, 4, \dots$. Το ανώτερο όριο για την εντροπία που προκύπτει τοποθετώντας n_A μποζόνια σε $N_\phi + 1$ τροχιακά είναι

$$S_A^B = \ln \binom{N_\phi + n_A}{n_A}.$$

Η έκφραση για την S_A^{bound} δεν αλλάζει σε σχέση με αυτήν της φερμιονικής κατάστασης Laughlin, δίνοντας σαν αποτέλεσμα την πιο κάτω σχέση

$$S_A^B - S_A^{bound} = \frac{1}{N} n_A (n_A - 1) + \dots \quad (6.9)$$

Για μία μποζονική κατάσταση Moore-Read, με παράγοντα πλήρωσης $\nu = 1/m$ και για $m=1, 3, \dots$, αντίστοιχα με πιο πριν η βασική διόρθωση θα είναι

$$S_A^B - S_A^{bound} = \frac{1}{N} \frac{m-1}{m} n_A (n_A - 1) + \dots \quad (6.10)$$

Για $n_A=2$ μπορούμε να έχουμε μία εικόνα για την τάξη της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας, εξετάζοντας πλέον δομές πολλαπλών σωματιδίων που εμφανίζονται στο φάσμα ιδιοτιμών της ρ_{n_A} . Οι ανηγμένες μήτρες πυκνότητας ρ_{n_A}, n_A σωματιδίων καταστάσεων FQH πάνω σε σφαίρα, μετατίθενται με τους τελεστές της στροφορμής $L_{n_A}^2$ και $L_{n_A}^z$ των εν λόγω σωματιδίων. Αυτό θα έχει σαν αποτέλεσμα, μία ιδιοτιμή της συνολικής στροφορμής L_{n_A} να έχει εκφυλισμό $(2L_{n_A} + 1)$.

Για $n_A=2$ φερμιόνια, με το κάθε ένα να έχει στροφορμή $L = \frac{1}{2} N_\phi$, οι καταστάσεις 2 σωματιδίων επιστρέφουν τιμές της συνολικής στροφορμής $L_2 = 2L - 1, 2L - 3, \dots, 1$, για ακέραιο L . Ο συνολικός αριθμός των καταστάσεων θα είναι σε αυτή την περίπτωση $(2L + 1)(2L)/2$. Το ανώτερο όριο της εντροπίας εναγκαλισμού για την εν λόγω περίπτωση, θα δίνεται από την σχέση

$$S_{n_A=2} \leq \ln[(2L+1)(2L)/2] = \ln \binom{N_\phi + n_A}{n_A}. \quad (6.11)$$

Εξετάζοντας την ακριβή δομή των φερμιονικών καταστάσεων Laughlin με $m=3, 5, \dots$, παρατηρούμε ότι οι ιδιοτιμές που αντιστοιχούν σε καταστάσεις δύο σωματιδίων με $L_2=2L-1, 2L-3, \dots, 2L-(m-2)$ μηδενίζονται. Αυτό οφείλεται στο ότι οι συσχετισμοί στις καταστάσεις Laughlin είναι τέτοιοι ώστε τα σωματίδια δεν μπορούν να πλησιάσουν πολύ το ένα το άλλο. Για παράδειγμα, αν ένα φερμιόνιο έχει καταλάβει το τροχιακό με $l=0$, που εντοπίζεται στον “βόρειο πόλο”, η κυματοσυνάρτηση Laughlin έχει μηδενικό πλάτος ώστε να βρούμε ένα δεύτερο φερμιόνιο στα τροχιακά με $l=1, l=2, \dots, l=m-1$. Η υψηλότερη δυνατή τιμή της στροφορμής των δύο φερμιονίων θα είναι $L_2=L+(L-m)$. Ο αριθμός των μη μηδενικών ιδιοτιμών που έχουν εναπομένει είναι $(2L+(2-m))(2L+(1-m))/2$ και οδηγεί στο βελτιστοποιημένο όριο της εντροπίας $S_{n_A=2}$:

$$S_{n_A=2} \leq \ln[(2L+(2-m))(2L+(1-m))/2]. \quad (6.12)$$

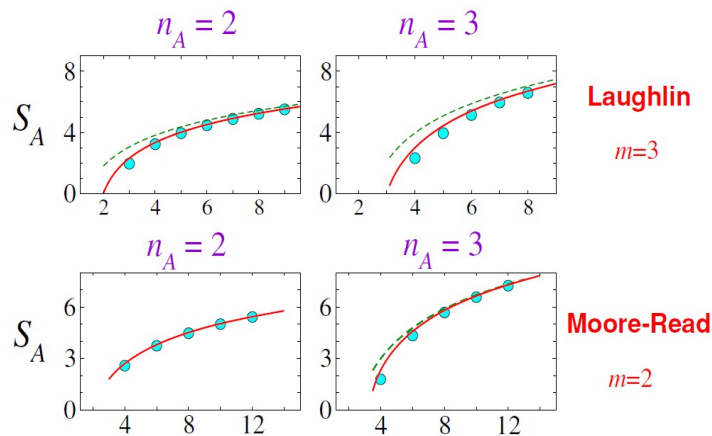
Για $n_A > 2$, οι δομές πολλαπλών σωματιδίων είναι πιο σύνθετες οπότε μία γενίκευση ως προς την συμπεριφορά τους είναι δύσκολη.

Στο σχήμα 6.4 αναπαρίστανται γραφικά οι ιδιοτιμές της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας για $n_A=2$ και για $N=9$ σωματίδια πάνω σε μία σφαίρα. Τα σωματίδια περιγράφονται από μία κατάσταση Laughlin ($L=12$) με $m=3$. Ο οριζόντιος άξονας εκπροσωπεί τον εκφυλισμό $2L_2+1$ σε φθίνουσα σειρά. Η ιδιοτιμή της $L_2=2L-1=23$, με εκφυλισμό 47 μηδενίζεται. Οι μη μηδενικές ιδιοτιμές εμφανίζουν μία διασπορά γύρω από μία ασυμπτωτική τιμή. Εξαιτίας αυτής της διασποράς, η εντροπία $S=5.509$ είναι μικρότερη από αυτή του ανώτατου ορίου, $S_A^{bound}=5.533$.

Μία σημαντική διαφορά μεταξύ της κατάστασης Laughlin με $m=3$ και της κατάστασης Moore-Read με $m=2$, είναι η απουσία ιδιοτιμών που μηδενίζονται για την ανηγμένη μήτρα πυκνότητας δύο σωματιδίων. Αυτό φαίνεται στο δεξί διάγραμμα του σχήματος 6.4.

Στην κατάσταση Moore-Read με $m=2$ υπάρχουν τιμές που μηδενίζονται στην ανηγμένη μήτρα πυκνότητας για $n_A \geq 3$ σωματίδια. Ο αριθμός των μη μηδενικών ιδιοτιμών που προβλέπεται από την εξίσωση 6.8 έρχεται σε συμφωνία με τα αριθμητικά αποτελέσματα. Για παράδειγμα για $n_A=3$ και $N=10$ σωματίδια υπάρχουν 770 μη μηδενικές ιδιοτιμές, κάτι που προβλέπει και η εξίσωση 6.8.

Ενώ οι μη μηδενικές ιδιοτιμές δεν είναι ίσες, η κατανομή τους εν γέννη είναι στενή, σε αντίθεση με την αντίστοιχη μελέτη για την χωρική κατανομή.



Σχήμα 6.5: Εντροπίες σωματιδιακού εναγκαλισμού. Οι τελείες αποδίδουν τα αριθμητικά αποτελέσματα, η διακεκομμένη καμπύλη το ανώτερο όριο, ενώ η συνεχής την σχέση 6.8

Στο σχήμα 6.5 γίνεται σύγκριση μεταξύ των αριθμητικών αποτελεσμάτων που έχουν προκύψει από υπολογισμούς και των σχέσεων που περιγράφονται πιο πάνω.

Παρατηρείται ότι η για την περίπτωση της κατάστασης Moore-Read με $m=2$, η S_A^{bound} συμπίπτει με την S_A^F για $n_A=2$, καθώς καμία από τις ιδιοτιμές των πολλαπλών σωματιδίων δεν μηδενίζεται στην συγκεκριμένη περίπτωση.

6.4.2 Οι ανηγμένες μήτρες πυκνότητας και οι συναρτήσεις συσχετισμού

Σύμφωνα με τον τρόπο που προκύπτουν οι ανηγμένες μήτρες πυκνότητας ρ_{n_A} κάποιος θα περίμενε αυτοί οι πίνακες να σχετίζονται με τις συναρτήσεις συσχετισμού των n_A σωματιδίων. Οι κατανομές των ιδιοτιμών για $n_A=2$ είναι πολύ στενά συνδεδεμένες με την συνάρτηση συσχετισμού δύο σωματιδίων $g_2(r)$. Στην πραγματικότητα, η $g_2(r)$ μπορεί να θεωρηθεί μία συνεχής μορφή των γραφημάτων του σχήματος 6.4.

6.5 Το μοντέλο Calogero-Sutherland

Το μοντέλο Calogero-Sutherland παρουσιάζει εξαιρετικό ενδιαφέρον στην φυσική συμπεκνωμένης ύλης, αφού μπορεί να λυθεί αναλυτικά ενώ προβλέπει και κλασματικές διεγέρσεις. Οι ιδιοκαταστάσεις αυτού του μοντέλου είναι παρόμοιες με τις FQH, οι οποίες περιγράφονται μέσω των πολωνύμων Jack. Χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες αυτών των πολωνύμων έχει μελετηθεί η εντροπία εναγκαλισμού σωματιδίων. Το μοντέλο περιγράφεται από την πιο κάτω Χαμιλτονιανή, όπου $(0 \leq x \leq L)$.

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{i < j} \frac{\beta(\beta-1) \left(\frac{\pi}{L}\right)^2}{\sin^2\left(\frac{\pi}{L}(x_i - x_j)\right)}.$$

Χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες των πολωνύμων Jack στο όριο $N-n \rightarrow \infty$, προκύπτει το ακόλουθο ανώτερο όριο της εντροπίας εναγκαλισμού S_n για την κατάσταση Calogero-Sutherland N σωματιδίων

$$S_n \leq S_n^{bound} = \ln \binom{\beta(N-n)+n}{n}.$$

Σχετικά ανάλογα με τα αποτελέσματα για τις καταστάσεις FQH που συζητήθηκαν σε προηγούμενη ενότητα αυτή η έκφραση μπορεί να ερμηνευτεί χρησιμοποιώντας δεδομένα στατιστικής αποκλεισμού. Παίρνοντας το ίχνος πάνω σε ένα σωματίδιο, είναι σαν να πετάμε ένα άλλο από την θάλασσα Fermi, η οποία με την σειρά της δημιουργεί β οιονεί οπές. Κατά συνέπεια, αν επιλέξουμε να πάρουμε $N-n$ σωματίδια, τότε δημιουργούνται $\beta(N-n)$ οιονεί οπές. Γενικά υπάρχουν $C(\beta(N-n)+n, n)$ τρόποι να τοποθετηθούν n σωματίδια και $\beta(N-n)$ οιονεί οπές. Μέσα στην θάλασσα Fermi.

Μία ακριβής έκφραση για την διόρθωση σε αυτό το όριο είναι η:

$$S_N \approx \ln \left(\frac{(\beta(N-n)+n)!}{n!(\beta(N-n))!} \right) - n(\ln \beta - 1 + \beta^{-1}) + O(N^{-1}).$$

Στην πιο πάνω σχέση, ο πρώτος όρος προέρχεται από τον αριθμό των μη μηδενικών ιδιοτιμών, ενώ ο δεύτερος από την ασυμπτωτική κατανομή των ιδιοτιμών. Μία ακριβής έκφραση του όρου $O(N^0)$ είναι εφικτή λόγω της λεπτομερέστερης κατανόησης της κατανομής των ιδιοτιμών που είναι διαθέσιμη για αυτό το μοντέλο, εν αντιθέσει με την περίπτωση FQH.

7. Υπολογισμός των ανηγμένων μητρών πυκνότητας από τις συναρτήσεις συσχετισμού

Οι ανηγμένες μήτρες πυκνότητας επιλύσιμων φερμιονικών ή μποζονικών μοντέλων έχουν μελετηθεί εκτεταμένα τα τελευταία χρόνια. Αυτές οι ποσότητες αναφέρονται συνήθως σε ένα υποσύνολο θέσεων, αλλά όπως είδαμε και πιο πριν, μπορούμε να πάρουμε τις μήτρες πυκνότητας και για ένα υποσύνολο σωματιδίων. Γενικά έχουν την εκθετική μορφή e^{-H} , όπου H είναι ένας επιλύσιμος φερμιονικός ή μποζονικός τελεστής, περιορισμένος στο εκάστοτε υποσύστημα. Ο τρόπος υπολογισμού της βασίζεται αρχικά στην εξαγωγή της μήτρας πυκνότητας (συνήθως για την θεμελιώδη κατάσταση) στην οποία ενσωματώνουμε τους βαθμούς ελευθερίας που υπάρχουν εκτός του υποσυνόλου. Στην περίπτωση των φερμιονίων, αυτό μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας της μεταβλητές Grassmann. Έχει βρεθεί ότι στα μοντέλα που βασίζονται στις μεταπηδήσεις, το τελικό αποτέλεσμα συμπεριλαμβάνει τις συναρτήσεις συσχετισμού ενός μόνο φερμιονίου.

Θεωρούμε αρχικά ένα σύστημα ελεύθερων φερμιονίων τα οποία μπορούν και μεταπηδούν μεταξύ διάφορων θέσεων του πλέγματος. Η αντίστοιχη Χαμιλτονιανή έχει την γενική μορφή

$$\hat{H} = - \sum_{n,m} t_{nm} c_n^\dagger c_m, \quad (7.1)$$

Οι ιδιοκαταστάσεις του πιο πάνω τελεστή περιγράφονται από ορίζουσες Slater. Έστω $|\Psi\rangle$ μία τέτοια κατάσταση και

$$\hat{C}_{nm} = \langle c_n^\dagger c_m \rangle \quad (7.2)$$

η κατάσταση ενός σωματιδίου σε αυτή την κατάσταση. Τα \hat{C}_{nm} ορίζουν έναν Ερμιτιανό πίνακα \hat{C} . Επειδή η $|\Psi\rangle$ είναι μία ορίζουσα, όλες οι υπόλοιπες συναρτήσεις συσχετισμού μπορούν να εκφραστούν από τον \hat{C} , δηλαδή

$$\langle c_n^\dagger c_m^\dagger c_k c_l \rangle = \langle c_n^\dagger c_l \rangle \langle c_m^\dagger c_k \rangle. \quad (7.3)$$

Έστω ότι έχουμε ένα σύστημα M θέσεων. Εξ' ορισμού η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας ρ αναπαράγει όλες τις μέσες τιμές του υποσυστήματος. Κατά συνέπεια η συνάρτηση για ένα σωματίδιο θα είναι

$$C_{ij} = \text{Tr}(\rho c_i^\dagger c_j) \quad (7.4)$$

και οι υπόλοιπες συναρτήσεις θα προκύπτουν σύμφωνα με την (7.3). Με βάση το θεώρημα Wick αυτή η ιδιότητα θα ισχύει αν το ρ , προκύπτει από το εκθετικό ενός τελεστή ελεύθερων φερμιονίων. Όποτε μπορούμε να πούμε ότι

$$\rho = K e^{-H}, \quad (7.5)$$

όπου K , μία σταθερά κανονικοποίησης και

$$H = \sum_{i,j} H_{ij} c_i^\dagger c_j. \quad (7.6)$$

Έστω $\varphi_k(i)$ οι ιδιοσυναρτήσεις της H , με ιδιοτιμές ε_k . Τότε ο μετασχηματισμός σε έναν καινούργιο φερμιονικό τελεστή a_k ,

$$c_i = \sum_k \varphi_k(i) a_k \quad (7.7)$$

διαγωνοποιεί την H και η ρ γίνεται

$$\rho = K \exp\left(-\sum_{k=1}^M \varepsilon_k a_k^\dagger a_k\right). \quad (7.8)$$

Χρησιμοποιώντας αυτό στην (7.4) και σε συνδυασμό με την ισότητα $Tr(\rho) = 1$ παίρνουμε ότι

$$C_{ij} = \sum_k \varphi_k^*(i) \varphi_k(j) \frac{1}{e^{\varepsilon_k} + 1}. \quad (7.9)$$

Επίσης η H γράφεται στην αναπαράσταση

$$H_{ij} = \sum_k \varphi_k(i) \varphi_k^*(j) \varepsilon_k. \quad (7.10)$$

Αρα οι ιδιοτιμές ζ_k της C και ε_k της H σχετίζονται ως ακολούθως

$$\zeta_k = (e^{\varepsilon_k} + 1)^{-1} \quad (7.11)$$

και υπό την μορφή ανάστροφου πίνακα,

$$H' = \ln[(1 - C)/C]. \quad (7.12)$$

Λόγω της μορφής της, η ρ καθορίζεται εξολοκλήρου από τον $M \times M$ πίνακα C . Τονίζεται ότι οποιαδήποτε συνάρτηση συσχετισμού μπορεί να εκφραστεί με αυτόν τον τρόπο μέσω ενός κατάλληλου τελεστή ελεύθερων φερμιονίων. Η μόνη συνθήκη είναι ότι οι ιδιοτιμές ζ_k της C , θα πρέπει να είναι από 0 μέχρι 1 όπου σχεδόν πάντα ισχύει κάτι τέτοιο, αφού μπορούν να γραφούν στην μορφή $\langle a_k^\dagger a_k \rangle$ με καινούργιους φερμιονικούς τελεστές. Παρόλαυτα για μία κατάσταση που δεν αποδίδεται μέσω της ορίζουσας του Slater, η μήτρα πυκνότητας ελεύθερων ηλεκτρονίων που βρίσκουμε πιο πάνω θα έδινε εν γένη λάθος αποτελέσματα για άλλες μέσες τιμές.

Αυτές οι θεωρήσεις μπορούν να επεκταθούν σε συστήματα στα οποία δημιουργούνται ή καταστρέφονται ζεύγη και όπου μπορούν να διαγωνοποιηθούν με ένα μετασχηματισμό Bogoliubov. Οι ιδιοκαταστάσεις θα είναι τότε ορίζουσες Slater με καινούργιους τελεστές Fermi. Σε αυτή την κατάσταση υπάρχουν οι “μη ομαλές” συναρτήσεις συσχετισμού

$$F_{nm}^\wedge = \langle c_n^\dagger c_m^\dagger \rangle \quad (7.13)$$

Οι οποίες μπορούν να προκύψουν στις εξισώσεις παραγοντοποίησης. Συνεπώς η (7.3) γίνεται

$$\langle c_n^\dagger c_m^\dagger c_k c_l \rangle = \langle c_n^\dagger c_l \rangle \langle c_m^\dagger c_k \rangle - \langle c_n^\dagger c_k \rangle \langle c_m^\dagger c_l \rangle + \langle c_n^\dagger c_m^\dagger \rangle \langle c_k c_l \rangle. \quad (7.14)$$

Για να αναπαραχθεί αυτό, θα πρέπει η ρ , να είναι εκθετική με έναν τελεστή H ο οποίος θα εμπεριέχει επίσης ζεύγη διεργασιών δημιουργίας και καταστροφής,

$$H = \sum_{i,j} \left[c_i^\dagger A_{ij} c_j + \frac{1}{2} (c_i^\dagger B_{ij} c_j^\dagger + h.c.) \right]. \quad (7.15)$$

Από την στιγμή όπου εμφανίζονται δύο πίνακες στην H , ο ένας θέλει μία επιπλέον “είσοδο”, η οποία θα προκύψει από τις συναρτήσεις συσχετισμού F_{ij} . Διαγωνοποιώντας την H και υπολογίζοντας τις C και F , αποδεικνύεται ότι

$$[(C-1/2-F)(C-1/2+F)]_{ij} = \frac{1}{4} \sum_k \varphi_k(i) \varphi_k^*(j) \text{th}^2(\varepsilon_k/2), \quad (7.16)$$

Όπου οι $\varphi_k(i)$ είναι ορθοκανονικές συναρτήσεις του $(A-B)(A+B)$ και ε_k είναι πάλι οι τιμές μονού σωματιδίου της H . Κατά συνέπεια, κάποιος μπορεί να βρει τις ε_k από τις ιδιοτιμές του πίνακα τις (7.16). Αυτός ο πίνακας μπορεί να γραφεί στην μορφή $K K^\dagger/4$ όπου $K/2=(C-1/2-F)$, από την στιγμή όπου η F είναι αντι-Ερμιτιανή. Από την διαγωνοποίηση του $K K^\dagger$ παίρνουμε τους πίνακες A και B

$$A_{ij} = \frac{1}{2} \sum_k [\varphi_k(i) \psi_k^*(j) + \psi_k(i) \varphi_k^*(j)] \varepsilon_k \quad (7.17)$$

$$A_{ij} = \frac{-1}{2} \sum_k [\varphi_k(i) \psi_k^*(j) - \psi_k(i) \varphi_k^*(j)] \varepsilon_k \quad (7.18)$$

όπου οι συναρτήσεις ψ_k προκύπτουν από την εξίσωση $\text{th}(\varepsilon_k/2) \psi_k = -K^\dagger \varphi_k$. Για $F=0$ θα έχουμε $K=K^\dagger$, $\psi_k=\varphi_k$ και κατά συνέπεια $B=0$, ενώ το αποτέλεσμα για την A αντιστοιχεί στην (7.10). Αν κάποιος μετατρέψει ένα μοντέλο μεταπηδήσεων σε ένα με όρους ζευγών που προκύπτουν από τον μετασηματισμό σωματιδίου-οπής, τότε η (7.16) συνεπάγεται της (7.9).

Αρχικά θα χρησιμοποιήσουμε τον πίνακα \hat{G} , προκειμένου να γράψουμε τις καταστάσεις άρτιας ομοτιμίας στην μορφή

$$|\Psi\rangle = C \exp\left\{\frac{1}{2} \sum_{n,m} \hat{G}_{nm} c_n^\dagger c_m^\dagger\right\} |0\rangle, \quad (7.19)$$

όπου $|0\rangle$ είναι η κατάσταση κενού του c_n . Στην θεμελιώδη κατάσταση ο \hat{G} συνδέει τα δύο σύνολα των συναρτήσεων $\hat{\varphi}_p$ και $\hat{\psi}_p$ που προκύπτουν από την διαγωνοποίηση της Χαμιλτονιανής. Το ίδιο ισχύει και για τον $\hat{K}/2=(\hat{C}-1/2-\hat{F})$ όπου σαν αποτέλεσμα παίρνουμε ότι $2(1+K K^\dagger)/(1-K K^\dagger)$.

Με παρόμοιο τρόπο μπορούμε να αντιμετωπίσουμε συστήματα συζευγμένων ταλαντωτών. Σε αυτή την περίπτωση είναι πιο βολικό να ορίσουμε τις συναρτήσεις συσχετισμού θέσης και ορμής

$$\hat{X}_{nm} = \langle x_n x_m \rangle \quad \hat{P}_{nm} = \langle p_n p_m \rangle. \quad (7.20)$$

Τότε για την θεμελιώδη κατάσταση η οποία είναι Γκαουσιανή παίρνουμε την σχέση

$$\langle x_n x_m x_k x_l \rangle = \langle x_n x_m \rangle \langle x_k x_l \rangle + \langle x_n x_k \rangle \langle x_m x_l \rangle + \langle x_n x_l \rangle \langle x_m x_k \rangle, \quad (7.21)$$

η οποία δεν είναι πολύπλοκη ακόμα και στην περίπτωση όπου όλοι οι δείκτες είναι ίσοι. Ισχύουν επίσης και όταν οι μέσες τιμές έχουν υπολογιστεί με έναν εκθετικό τελεστή τετραγωνικό στα x και p . Κατά συνέπεια, η ρ έχει την μορφή της (6.5) και ο τελεστής της Χαμιλτονιανής γίνεται

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} [T_{ij} p_i p_j + V_{ij} x_i x_j]. \quad (7.22)$$

Η διαγώνιος μορφή είναι πάλι η (7.8), αλλά με μποζονικούς τελεστές και οι ε_k συνδέονται με τις ιδιοτιμές v_k^2 του πίνακα XP , μέσω της σχέσης

$$cth(\varepsilon_k/2) = v_k/2. \quad (7.23)$$

Αν το σύστημα αποτελείται μόνο από ένα απλό ταλαντωτή i , τότε υπάρχει μόνο ένα v , το οποίο δίνεται από την $\langle x_i^2 \rangle \langle p_i^2 \rangle$. Για ένα ομογενές σύστημα αυτό μπορεί να εκφραστεί επίσης και από τις συχνότητες των κανονικών τρόπων μέσω της $\langle 1/\omega \rangle \langle \omega \rangle$. Οι γενικές εξισώσεις είναι πάλι παρόμοιες με αυτές που βγήκαν πιο πριν.

Στην προσέγγιση που εξετάσαμε σε αυτό το κεφάλαιο τα αποτελέσματα είναι σωστά και για πεπερασμένες θερμοκρασίες, αν και -επισημαίνεται πάλι- είναι αναγκαίο να υπάρχει η αναλυτική μορφή των συναρτήσεων συσχετισμού. Αυτό ισχύει γενικά είτε στην περίπτωση των μεταπηδήσεων μεταξύ πρώτων γειτόνων σε μία αλυσίδα, ή όταν έχουμε ένα ημι-πληρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Τότε αυτό που μένει είναι η διαγωνοποίηση του C . Σε κάποιες περιπτώσεις τίθενται περιορισμοί, όταν οι ε_k είναι μεγάλες, οπότε οι αντίστοιχες ιδιοτιμές του C τείνουν εκθετικά στο 0 ή το 1.

8. Η δυναμική του εναγκαλισμού

Παράλληλα με την μελέτη του εναγκαλισμού σε συστήματα πολλών σωματιδίων, αυτό που εμφανίζει εξαιρετικό ενδιαφέρον, είναι και η κατανόηση της δυναμικής συμπεριφοράς του. Η δυναμική του εναγκαλισμού έχει εξεταστεί μέσα από διάφορα πρίσματα. Η μελέτη της διάδοσης του εναγκαλισμού γίνεται με παρόμοιο τρόπο με αυτή της διάδοσης των διεγέρσεων σε συστήματα συμπτυκνωμένης ύλης, ξεκινώντας από μία αρχική κατάσταση στην οποία υπάρχει εναγκαλισμός σε ένα τμήμα του συστήματος. Σαν παράδειγμα μπορούμε να πάρουμε μία αλυσίδα spin, της οποίας όλα τα σωματίδια είναι προσανατολισμένα προς τα πάνω, με εξαίρεση δύο γειτονικά τα οποία είναι εναγκαλισμένα. Λόγω των αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής, ο εναγκαλισμός ο οποίος εντοπίζεται αρχικά σε δύο γειτονικές θέσεις της αλυσίδας θα διαδοθεί. Εάν είναι παρούσα και μία μικρή διαταραχή, τότε μπορεί να υπάρξει και διάδοση μέσω διάχυσης. Επίσης αυτό που ενδέχεται να παρατηρηθεί είναι χασοτική συμπεριφορά. Μία διαφορετική προσέγγιση είναι να ξεκινήσει κάποιος με μία Χαμιλτονιανή H_0 και να την αφήσει να μεταβληθεί με τον χρόνο. Η πιο τυπική περίπτωση είναι αυτή της απότομης απόσβεσης, όπου μετά την προετοιμασία της, η Χαμιλτονιανή μεταβάλλεται στην H_1 .

Από την στιγμή όπου έχουμε να κάνουμε με αλληλεπιδρώντα συστήματα, ο εναγκαλισμός μπορεί να δημιουργηθεί ή να μεταβάλλει τα χαρακτηριστικά του κατά την διάρκεια της δυναμικής εξέλιξης.

Άλλη μία σημαντική πτυχή της δυναμικής του εναγκαλισμού την οποία θα εξετάσουμε πιο κάτω, είναι η δυνατότητα δημιουργίας εναγκαλισμένων καταστάσεων με δεδομένες δυνατότητες, εκμεταλλευόμενοι τις αλληλεπιδράσεις που υπάρχουν στα συστήματα πολλών σωματιδίων. Αυτή είναι η φυσική γενίκευση της περίπτωσης, όπου μία κατάσταση Bell μπορεί να προκύψει επιτρέποντας την αλληλεπίδραση μέσω σύζευξης ανταλλαγής μεταξύ δύο qubit για συγκεκριμένο χρόνο σε μία συμμετρία XX . Με τον ίδιο τρόπο θα μπορούσαν να κατασκευαστούν εναγκαλισμένες καταστάσεις GHZ ή W τριών qubit ή καταστάσεις πολλαπλών σωματιδίων, ορίζοντας κατάλληλα την σύζευξη ανταλλαγής σε δίκτυα spin.

8.1 Η διάδοση του εναγκαλισμού

8.1.1 Εναγκαλισμός κατά ζεύγη

Η απλούστερη περίπτωση που θα εξετάσουμε αρχικά είναι την διάδοση του εναγκαλισμού στο μονοδιάστατο μοντέλο XX ,

$$H(\gamma, \Delta, \hbar^2/J) = \frac{J}{2} \sum_{\langle i, j \rangle} [(1+\gamma) S_i^x S_j^x + (1-\gamma) S_i^y S_j^y] + J \Delta \sum_{\langle i, j \rangle} S_i^z S_j^z - \hbar^2 \sum_i S_i^z. \quad (8.1)$$

όπου $\gamma=0, \Delta=0$. Έστω ότι η αρχική κατάσταση είναι η

$$|\Psi_{\pm}(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_i^x \pm \sigma_j^x) |0, \dots, 0\rangle. \quad (8.2)$$

Εδώ όλα τα spin είναι σε μία πλήρως πολωμένη κατάσταση εκτός από δύο στις θέσεις i, j όπου είναι σε μία εκ των δύο καταστάσεων Bell $|\psi_{\pm}\rangle = 2^{-1/2} (|01\rangle \pm |10\rangle)$. Σε αυτό το πρόβλημα υπάρχει μία απλή αναλυτική λύση. Από την στιγμή που η συνολική μαγνήτιση διατηρείται, η εξέλιξη περιορίζεται μόνο στις περιοχές όπου το spin είναι προσανατολισμένο προς τα πάνω.

Σε αυτή την περιοχή η δυναμική περιγράφεται πλήρως από τις καταστάσεις $|l\rangle = |0, \dots, 0, 1, \dots, 0\rangle$ ($l = 1, \dots, N$) η οποία αντιπροσωπεύει μία κατάσταση της αλυσίδας όπου το l spin προετοιμάζεται στην $|1\rangle$ ενώ τα υπόλοιπα $N-1$ στην $|0\rangle$. Σε μεταγενέστερο χρόνο, η κατάσταση της αλυσίδας θα είναι

$$|\Psi_{\pm}(t)\rangle = \sum_l w_{\pm,l}^{(i,j)}(t) |l\rangle \quad (8.3)$$

όπου

$$w_{\pm,l}^{(i,j)}(t) = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_k \left[1 \pm e^{\frac{2\pi i k}{N}(j-i)} \right] e^{\frac{2\pi i k}{N}(i-l)} e^{4iJt \cos \frac{2\pi k}{N}} \quad (8.4)$$

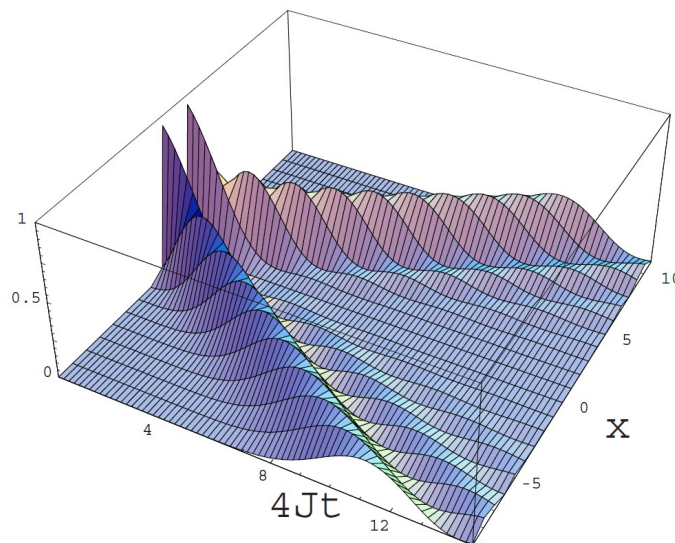
έχοντας υποθέσει περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Στο θερμοδυναμικό όριο, $N \rightarrow \infty$, οι συντελεστές μπορούν να εκφραστούν μέσω των συναρτήσεων Bessel $J_n(x)$

$$w_{\pm,l}^{(i,j)}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ J_{i-l}(4Jt) \pm (-i)^{j-i} J_{j-l}(4Jt) \}. \quad (8.5)$$

Η (8.3) σε συνδυασμό με ρους συντελεστές που ορίζονται από την (8.5) μας επιτρέπει να μελετήσουμε διάφορες κατηγορίες μέτρων του εναγκαλισμού για αυτή την ειδική περίπτωση. Για μία πρώτη ένδειξη της διάδοσης του εναγκαλισμού θα αναλύσουμε την συμφωνία μεταξύ δύο θέσεων, των n και m , (αρχικά η εναγκαλισμένη κατάσταση είναι μεταξύ των θέσεων i και j). Η συμφωνία θα είναι

$$C_{n,m}^{i,j}(\pm, t) = 2 |w_{\pm,n}^{(i,j)}(t) w_{\pm,m}^{(i,j)*}(t)|. \quad (8.6)$$

Η συνάρτηση $C_{n,m}^{i,j}(\pm, t)$ η οποία αποδίδεται γραφικά στο πιο κάτω σχήμα, απεικονίζει δύο θέσεις οι οποίες είναι συμμετρικές σε σχέση με την αρχική θέση της κατάστασης Bell $|\psi_{\pm}\rangle$.

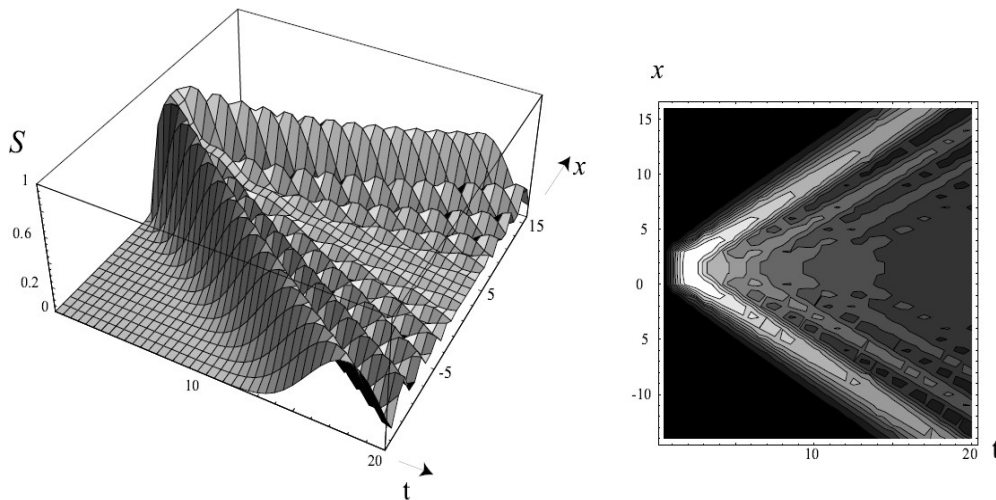


Σχήμα 8.1: Η συμφωνία μεταξύ των θέσεων $n=-x$, $m=x$, οι οποίες είναι συμμετρικές ως προς την αρχική μονήρη κατάσταση.

Η χρονική εξέλιξη που προβλέπεται από την Χαμιλτονιανή XX μπορεί να συσχετιστεί με την διάδοση ενός αντεστραμμένου spin κατά μήκος της αλυσίδας. Η ταχύτητα της διάδοσης καθορίζεται από το πόσο ισχυρή είναι η αλληλεπίδραση. Η ανταλλαγή πληροφορίας ή η διάδοση του εναγκαλισμού σε μία απόσταση με d διάκενα, χρειάζεται χρόνο $t \sim \hbar d / J$. Το εξωτερικό πεδίο h δεν λαμβάνεται υπόψιν στην (8.6), καθώς όλα τα στοιχεία της κατάστασης είναι στην ίδια περιοχή (τομέα) όπου το ένα spin έχει αντιστραφεί και κατά συνέπεια συνεισφέρει μόνο σε μία συνολική δυναμική φάση της εξέλιξης της κατάστασης.

Έχοντας κατά νου την χρήση των αλυσίδων spin σαν κβαντικά κανάλια, το πρότυπο της προετοιμασίας που εξετάσαμε πιο πριν δεν οδηγεί σε έμπιστη μεταφορά εναγκαλισμού. Ο πιο φυσικός τρόπος για την διεξαγωγή αυτής της διεργασίας είναι να προετοιμάσουμε μία εναγκαλισμένη κατάσταση και έπειτα να επιτρέψουμε σε ένα μόνο qubit να διαδοθεί κατά μήκος της αλυσίδας spin (ακολουθώντας δηλαδή το πρωτόκολλο που είχε προταθεί από τον Bose το 2003 ή την τροποποιημένη εκδοχή του (Christandl et al., 2004) για να πετύχουμε την βέλτιστη μεταφορά σε διαμορφωμένη αλυσίδα). Μία λεπτομερής ανάλυση πάνω σε αυτή την κατεύθυνση έγινε το 2006 από τους Hartman et al. Θεώρησαν αρχικά μία κατάσταση με τον μέγιστο δυνατό εναγκαλισμό και χρησιμοποίησαν την αλυσίδα για την μεταφορά μίας κατάστασης ενός εκ των δύο qubit. Με αυτό τον τρόπο βρήκαν μία σχέση μεταξύ με την οποία συνδεόταν ο εναγκαλισμός με το κατά πόσο μπορούσε να διαδοθεί η κατάσταση (ουσιαστικά αφορούσε στην αξιοπιστία της μεταφοράς της κατάστασης) και κατέληξαν ότι υπάρχει πιθανότητα για την τέλεια μεταφορά εναγκαλισμού.

Τα αποτελέσματα του κύματος εναγκαλισμού φαίνονται από την συμπεριφορά της εντροπίας von Neumann $S_{n,m}^{(2)}$ (η οποία όπως έχουμε πει επανειλημμένα καθορίζεται από την ανηγμένη μήτρα πυκνότητας $\rho_{n,m}^{(2)}$) των δύο θέσεων (n, m) με την υπόλοιπη αλυσίδα.

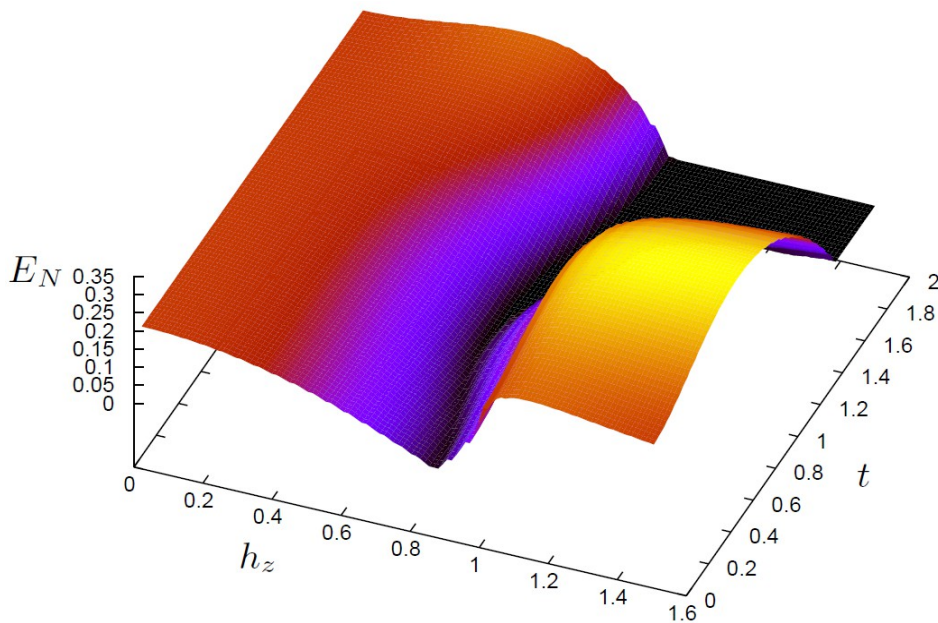


Σχήμα 8.2: Η εντροπία $S_{(-n, n+1)}^{(2)}(\tau)$ για ζεύγη θέσεων συμμετρικά τοποθετημένα σε σχέση με την αρχική μονήρη κατάσταση που έχει δημιουργηθεί στην θέση $(i, j) = (0, 1)$. Ο χρόνος είναι αποδίδεται σε σχέση με την ανταλλαγή σύζευξης $4J$ και ο χώρος με την πλεγματική σταθερά.

Αρχικά η εντροπία είναι ίση με μηδέν και παραμένει σε αυτή την τιμή μέχρι την άφιξη του κύματος εναγκαλισμού. Αν η αλυσίδα είναι αρχικά προετοιμασμένη στην $|\Psi_{\pm}(t=0)\rangle$, σχέση (8.2), ο εναγκαλισμός διαδίδεται διατηρώντας τα αρχικά χαρακτηριστικά του. Αυτό δεν ισχύει αν για παράδειγμα έχουμε την κατάσταση δύο εναγκαλισμένων καταστάσεων που είναι της μορφής $|\Phi_{\pm}\rangle = (1/\sqrt{2})(|00\rangle \pm |11\rangle)$. Αυτές οι καταστάσεις προκύπτουν από υπέρθεση στοιχείων που ανήκουν σε περιοχές με διαφορετική μαγνητισή.

Ο εναγκαλισμός διαδίδεται με την ίδια ταχύτητα όπως και πριν, όμως κάτω από συγκεκριμένες συνθήκες φαίνεται ότι οι διαδιδόμενοι κβαντικοί συσχετισμοί αλλοιώνουν τα χαρακτηριστικά του. Μετά από κάποιο χρόνο, μία κατάσταση παρόμοια με την μονήρη, αρχίζει να διαδίδεται ακόμα και αν η αρχική κατάσταση δεν ήταν μονήρη. Έχει εξεταστεί και ένα σύνολο διαφορετικών αρχικών καταστάσεων. Οι Hamieh και Katsnelson, 2005 αρχικοποίησαν την αρχική αλυσίδα με διαχωρίσιμες καταστάσεις μέσω ενός συνόλου προβολικών μέτρων (πιο συγκεκριμένα υπέθεσαν ότι όλα τα spin είναι προσανατολισμένα κατά την διεύθυνση z , με εξαίρεση ένα που έχει προετοιμαστεί σε μία ιδιοκατάσταση του S_x). Η εξέλιξη μπορεί να περιγραφεί σύμφωνα με την προσέγγιση που έχουμε περιγράψει πιο πάνω. Το νέο στοιχείο που προκύπτει τώρα, είναι η δημιουργία εναγκαλισμού κατά την διάρκεια της δυναμικής. Οι Hamieh και Katsnelson έδειξαν ότι οι ταλαντωτές του κύματος εναγκαλισμού έχουν την ίδια περιοδικότητα αλλά δεν βρίσκονται σε φάση με τον ταλαντωτή της (εκτός ισορροπίας) μέσης μαγνήτισης. Η κατανομή του εναγκαλισμού στην αλυσίδα έχει αναλυθεί προκαλώντας αρχικά μία μοναδική διέγερση στην κεντρική θέση μίας αλυσίδας XX (Fitzsimons και Twamley, 2005). Έχει βρεθεί ότι οι ορμές δεύτερης τάξης της συμφωνίας αυξάνουν πολύ πιο γρήγορα (κατά παράγοντα $t^{5/2}$) εάν υπάρχει μία διαταραχή στο μέσον της αλυσίδας.

Κάποια επιπλέον χαρακτηριστικά αναδεικνύονται στο μοντέλο XY όταν $\gamma \neq 0$. Σε αυτή την περίπτωση η μαγνήτιση δεν είναι πλέον μία σταθερά της κίνησης (δύο spin μπορούν να αντιστραφούν ταυτόχρονα). Οι υπολογισμοί που έγιναν αναλυτικά (Amico et al., 2004) έδωσαν ένα ακριβές αποτέλεσμα για το σύνολο των εκτός ισορροπίας συναρτήσεων συσχετισμού.



Σχήμα 8.3: Η λογαριθμική αρνητικότητα E_N μεταξύ πρώτων γειτόνων σε συνάρτηση με το εγκάρσιο μαγνητικό πεδίο h_z και τον χρόνο για ανισοτροπία $\gamma=0.5$. Για μικρούς χρόνους $t \leq 1.8$ η δυναμική μετάβαση φάσης είναι ένα σημείο “επανεισαγωγής” του εναγκαλισμού. Σε μεταγενέστερους χρόνους η κατάσταση παραμένει διαχωρίσιμη για τιμές του πεδίου μεγαλύτερων της κρίσιμης τιμής. Για $t=0$, ο εναγκαλισμός φαίνεται να μηδενίζεται, όπως είναι αναμενόμενο, καθώς το h_z αυξάνεται. Η εγκάρσια μαγνήτιση της εξελιγμένης κατάστασης δεν εμφανίζει παρόμοια κρίσιμη συμπεριφορά

Η πιο χαρακτηριστική διαφορά στον εναγκαλισμό μεταξύ δύο θέσεων που έχει μελετηθεί είναι

η παραγωγή του εναγκαλισμού από το κενό. Αυτό προκύπτει ομοιογενώς κατά μήκος της αλυσίδας και επιβάλλεται του κύματος του εναγκαλισμού που συζητήθηκε πιο πάνω. Η ταχύτητα διάδοσης του εναγκαλισμού είναι ανεξάρτητη από τον παράγοντα ανισοτροπίας γ . Αυτό που εξαρτάται έντονα από το γ , είναι ο συντελεστής απόσβεσης του κύματος εναγκαλισμού. Καθώς η ανισοτροπία πλησιάζει την τιμή $\gamma=1$ -το σημείο Ising- το κύμα παρουσιάζει έντονη απόσβεση και μηδενίζεται έπειτα από μερικά $\sim J^{-1}$. Επιπλέον στην ανισοτροπική περίπτωση είναι δυνατόν να παρατηρηθεί μία πιο πολύπλοκη δυναμική όταν το μαγνητικό πεδίο έχει χρονική εξάρτηση. Το σύστημα προετοιμάζεται αρχικά στην θεμελιώδη κατάσταση (Sen(De) et al., 2005) και η εξέλιξη του αναλύεται αφού μηδενιστεί ξαφνικά το μαγνητικό πεδίο. Οι Sen(De) et al. ανέλυσαν τον εναγκαλισμό μεταξύ δύο θέσεων μέσω της λογαριθμικής αρνητικότητας, όπως φαίνεται στο πιο πάνω σχήμα, και έδειξαν την ύπαρξη μίας δυναμικής μετάβασης φάσης η οποία δεν μπορούσε να παρατηρηθεί όταν υπήρχε μαγνήτιση. Όπως μπορεί να φανεί και από το σχήμα 8.3, για δεδομένη χρονική στιγμή t , ο εναγκαλισμός μηδενίζεται (και μετά αρχίζει να αυξάνεται πάλι) για συγκεκριμένες τιμές του αρχικά εφαρμοζόμενου μαγνητικού πεδίου. Για $t \leq 1.8$ το κρίσιμο πεδίο είναι σχεδόν ανεξάρτητο από τον χρόνο και παίρνει τιμή $h \sim 0.8$. Παράλληλα προκύπτει η δυναμική μετάβαση φάσης όπου για $h \geq h_c$ ο εναγκαλισμός μηδενίζεται. Για τιμές του αρχικού πεδίου στην περιοχή που είναι κοντά στις μεταβάσεις φάσεων, ο εναγκαλισμός δεν παρουσιάζει μονότονη συμπεριφορά σε συνάρτηση με την θερμοκρασία.

Ο εναγκαλισμός μεταξύ δύο θέσεων είναι μη εργοδικός. Η εξέλιξη του εναγκαλισμού μεταξύ δύο θέσεων σε μία αλυσίδα XY, έχει μελετηθεί για την περίπτωση απότομων μεταβολών ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Η εξελισσόμενη κατάσταση δεν πλησιάζει την τιμή της στην ισορροπία. Αυτό σημαίνει ότι ο εναγκαλισμός σε αυτά τα συστήματα δεν μπορεί περιγραφεί μέσω στατιστικής μηχανικής ισορροπίας.

Η δυναμική του εναγκαλισμού έχει μελετηθεί και για το μοντέλο LMG (Latorre et al., 2005a και Vidal et al., 2004b). Εξέτασαν την δυναμική εξέλιξη του εναγκαλισμού αναλύοντας την εμπλοκή $\tau_1(t)$ και την συμφωνία $C(t)$ για την περίπτωση όπου η αρχική κατάσταση είναι πλήρως πολωμένη στην διεύθυνση z ή την διεύθυνση x . Εξαιτίας των συμμετριών του μοντέλου και καθώς η αρχική κατάσταση ανήκει στην περιοχή με μέγιστο spin, $S=N/2$, οι δύο αυτές ποσότητες δεν εξαρτώνται από τα spin που έχουν επιλεγεί. Αυτό σημαίνει ότι μπορούν να εκφραστούν μόνο μέσω της μέσης τιμής του συνολικού spin $\langle S^a \rangle$ και των συναρτήσεων συσχετισμού $\langle S^a S^b \rangle$ ($a=x, y, z$). Ένα ενδιαφέρον χαρακτηριστικό αυτού του μοντέλου είναι ότι τα διάκενα μεταξύ των επιπέδων είναι πεπερασμένα ακόμα και στο θερμοδυναμικό όριο. Ο χρόνος Poicare εξαρτάται από τον αριθμό N των spin, πράγμα το οποία έχει σημαντικές συνέπειες στην δυναμική του εναγκαλισμού.

Στην περίπτωση όπου τα spin έχουν προετοιμαστεί στην κατάσταση $|0 \dots 0\rangle$ μπορούν να προκύψουν αναλυτικά αποτελέσματα για πολύ υψηλές τιμές μαγνητικού πεδίου, ή κοντά στο μηδέν. Στο όριο μηδέν για το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, η εμπλοκή και η συμφωνία είναι αντίστοιχα

$$\tau_1(t) = 1 - [\cos(4Jt/N)]^{2(N-1)} \quad (8.7)$$

$$C(t) = \frac{1}{4} [\cos(4Jt/N)]^{(N-2)} - 1 + \left\{ [\cos(4Jt/N)]^{(N-2)} - 1 \right\}^2 [4 \cos(4Jt/N)^{(N-2)} \sin(4Jt/N)^{(N-2)}] \quad (8.8)$$

Στην αντίθετη περίπτωση, για ισχυρά μαγνητικά πεδία δηλαδή μπορούμε να βασιστούμε στην ημικλασική προσέγγιση της εξίσωσης κίνησης του Heisenberg

$$\dot{S}_x = 2h S_y, \quad \dot{S}_y = -2h S_x + (2J/N)[S_z, S_x]_+, \quad \dot{S}_z = -(2J/N)[S_z, S_y]_+$$

όπου για $N \gg 1$ το στοιχείο z της μαγνήτισης έχει αμελητέες διακυμάνσεις ($S_z(t) \sim S = N/2$).

Κατά συνέπεια οι εξισώσεις που διέπουν την δυναμική του συστήματος γίνονται γραμμικές, οπότε μπορούν να λυθούν εύκολα. Η συμφωνία σαν συνάρτηση του χρόνου και για θετικές τιμές του μαγνητικού πεδίου, εξελίσσεται σύμφωνα με την σχέση

$$C(t) = 1 - \cos^2(\sqrt{h(h-J)}t) - \frac{J^2}{4h^2} \sin^2(\sqrt{h(h-J)}t). \quad (8.9)$$

Η δυναμική του εναγκαλισμού μεταξύ δύο θέσεων έχει μελετηθεί και στα πλαίσια μοντέλων μποζονίων-spin. Οι Ciancio και Zanardi, 2006 ανέλυσαν την αρνητικότητα για την Χαμιλτονιανή Jaynes-Cummings δίνοντας ιδιαίτερη έμφαση στον εναγκαλισμό μεταξύ δύο μποζονικών τρόπων που μεσολαβούν του qubit.

8.1.2 Η δυναμική της εντροπίας block

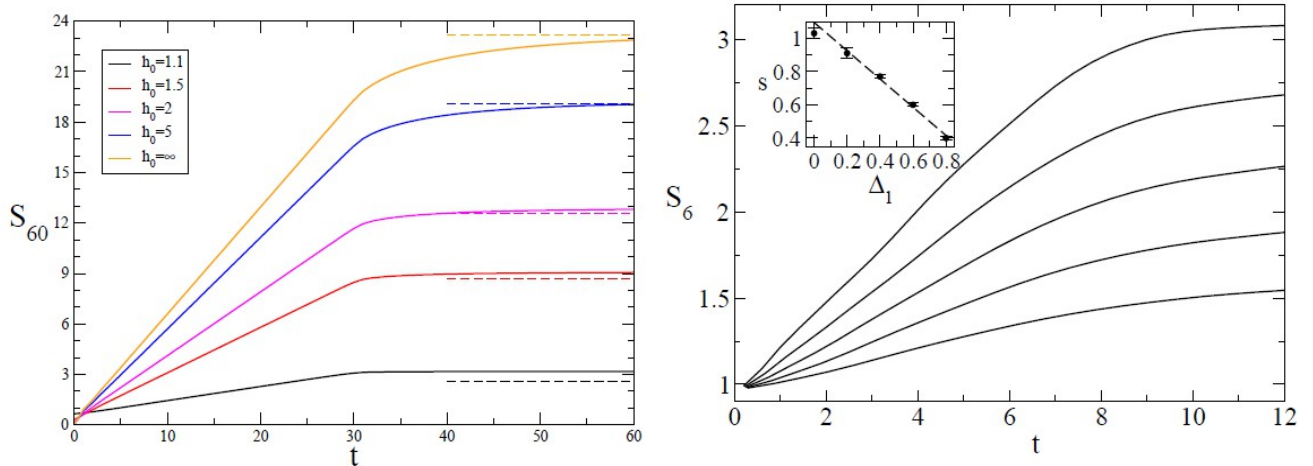
Η δυναμική συμπεριφορά της εντροπίας block εξετάστηκε για πρώτη φορά (Calabrese and Cardy, 2005) στα γενικά πλαίσια της θεωρίας σύμμορφου πεδίου και μέσω μίας ακριβούς λύσης του κβαντικού μοντέλου Ising. Αργότερα οι Dur et al χρησιμοποίησαν μοντέλα Ising με ευρύτερες αλληλεπιδράσεις ενώ οι De Chiara et al έκαναν αριθμητικούς υπολογισμούς με βάση μία αλυσίδα XXZ.

Οι Calabrese και Cardy έδειξαν ότι μία απόσβεση του συστήματος από ένα μη κρίσιμο, σε ένα κρίσιμο σημείο οδηγεί αρχικά στην γραμμική αύξηση της εντροπίας και μετά από λίγο στον κορεσμό της. Για περιοδικές συνοριακές συνθήκες και για δεδομένο block διαστάσεων l , ο χρόνος στον οποίο κορεννύεται η εντροπία είναι $t^* = l/(2v)$ όπου v είναι η ταχύτητα του κύματος spin.

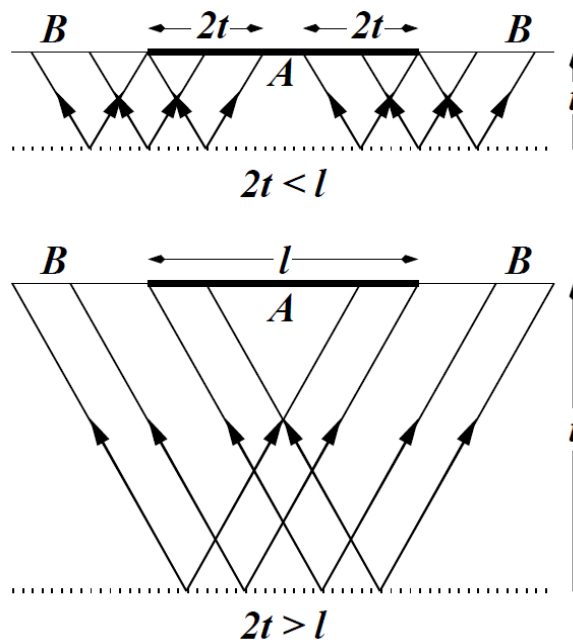
$$S_l(t) \sim \begin{cases} t & t \leq t^* \\ l & t \geq t^* \end{cases} \quad (8.10)$$

Συνεπώς υπάρχει μία αυθαίρετα μεγάλη εντροπία εναγκαλισμού στην ασυμπτωτική κατάσταση, εν' αντιθέσει με την περίπτωση της θεμελιώδους κατάστασης, όπου η εντροπία αποκλίνει μόνο σε κάποιο κρίσιμο σημείο. Ένα παράδειγμα για την χρονική εξάρτηση της εντροπίας block για το μοντέλο Ising και το μοντέλο XXZ φαίνεται στο σχήμα 8.4. Οι Calabrese και Cardy πρότειναν σαν ερμηνεία αυτής της συμπεριφοράς τις διεγέρσεις των οιονεί σωματιδίων που εκπέμπονται από την αρχική κατάσταση για $t=0$ και που διαδίδονται ελεύθερα με ταχύτητα v . Η αρχική κατάσταση της Χαμιλτονιανής που περιγράφει την χρονική εξέλιξη του συστήματος έχει υψηλότερη ενέργεια από την θεμελιώδη και κατά συνέπεια λειτουργεί σαν "πηγή" διεγέρσεων οιονεί σωματιδίων. Τα σωματίδια που εκπέμπονται από διαφορετικά σημεία δεν είναι σε σε συνοχή, αλλά τα ζευγάρια των σωματιδίων που μεταφέρονται προς μία συγκεκριμένη διεύθυνση είναι εναγκαλισμένα (σχήμα 8.5). Η ιδέα βασίζεται στο ότι ένα σημείο x_A της περιοχής A , θα είναι εναγκαλισμένο με ένα σημείο x_B της περιοχής B , αν ένα ζεύγος σωματιδίων που εκπέμπεται σε προγενέστερο χρόνο φτάσει ταυτόχρονα στα x_A και x_B . Η εντροπία block είναι ανάλογη με το μήκος του διαστήματος όπου λαμβάνει χώρα αυτό το φαινόμενο. Ο κορεσμός επιτυγχάνεται όταν τα πιο απομακρυσμένα οιονεί σωματίδια (ξεκινώντας από την μέση του block) είναι ήδη εναγκαλισμένα. Παρουσία μίας διαταραχής, η δυναμική συμπεριφορά είναι τελείως διαφορετική. Αυτό γίνεται εμφανές κατά την μελέτη των δυναμικών συναρτήσεων συσχέτισης έπειτα από την εμφάνιση μίας απόσβεσης.

Πιθανές ενδείξεις για τον εντοπισμό της εντροπίας block έχουν συζητηθεί κατά καιρούς, ενώ έχουν αναλυθεί περιπτώσεις μοντέλων Ising για παραγοντοποιήσιμες καταστάσεις.



Σχήμα 8.4: Η εξέλιξη της εντροπίας για διαφορετικές αποσβέσεις στο μοντέλο Ising (αριστερό διάγραμμα, Calabrese and Cardy, 2005) και στο μοντέλο Heisenberg (δεξί διάγραμμα, De Chiara et al., 2005). Τα block έχουν αποτελούνται από 60 και 6 θέσεις στο μοντέλο Ising και το μοντέλο Heisenberg αντίστοιχα. Στην περίπτωση του μοντέλου Ising η απόσβεση προκύπτει αλλάζοντας το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο από h_0 σε $h_1=1$. Στο μοντέλο Heisenberg αντίθετα χρησιμοποιούνται οι παράγοντες ανισοτροπίας $\Delta_0=1.5$, ενώ $\Delta_1=0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$. Ο χρόνος εκφράζεται σύμφωνα με την ταχύτητα του κύματος spin.



Σχήμα 8.5: Σχηματική αναπαράσταση της εντροπίας block. Τα εναγκαλισμένα σωματίδια που εκπέμπονται από την περιοχή A θα συνεισφέρουν στην εντροπία block όσο κάθε ένα εκ των δύο σωματιδίων καταλήγουν στην περιοχή B .

8.1.3 Η δυναμική του χάους και ο εναγκαλισμός

Η εξέλιξη του εναγκαλισμού είναι πολύ ευαίσθητη στις διάφορες ιδιότητες του φάσματος μετάβασης στο χάος. Τυπικό παράδειγμα αποτελεί ένας κβαντικός υπολογιστής με ατέλειες.

Μικρές ανακρίβειες στις σταθερές σύζευξης, προκαλούν είτε την εμφάνιση σφαλμάτων στις λειτουργίες των πυλών, ή μία μη επιθυμητή χρονική εξέλιξη αν η Χαμιλτονιανή δεν μηδενιστεί. Αν η ένταση των ατελειών αυξηθεί, τότε εμφανίζονται νέα φαινόμενα, όπου από κάποιο όριο και πάνω, η πυρήνας του υπολογιστή “λειώνει” λόγω χαοτικής συμπεριφοράς. Επιπλέον προκειμένου να αναλυθεί η αξιοπιστία και η σταθερότητα μίας κβαντικής μνήμης, έχει προταθεί ο χαρακτηρισμός της -συμπεριλαμβανομένου και του εναγκαλισμού- πλησιάζοντας την μετάβαση σε μία χαοτική συμπεριφορά. Αυτό μπορεί να γίνει εξετάζοντας είτε την συμπεριφορά της δυναμικής ενός διαταραγμένου μοντέλου Ising (Montangero et al., 2003; Montangero και Viola, 2006, Sen(De) et al., 2006), ή απλώς την χρονική εξέλιξη της απλής περίπτωσης (Lakshminarayanan και Subrahmayam, 2005). Άλλος ένας τρόπος είναι η μελέτη της δυναμικής των κβαντικών απεικονίσεων. Πιο συγκεκριμένα, το διαταραγμένο μοντέλο Ising είχε προταθεί προκειμένου να περιγραφεί το υλικό ενός κβαντικού υπολογιστή, στο οποίο οι όποιες ατέλειες δημιουργούν μη επιθυμητές συζεύξεις μεταξύ qubit και ενεργειακές διακυμάνσεις. Ανάλογα με την συμπεριφορά των διακυμάνσεων έχουμε και τρεις διαφορετικές συνθήκες. Σε μία πρώτη κρίσιμη τιμή δJ_C τα συστήματα περνάνε από την διαταρακτική στην χαοτική περιοχή, ενώ στο J_E το σύστημα περνάει σε μία εργοδική κατάσταση που χαρακτηρίζεται από μία τοπική Γκαουσιανή πυκνότητα καταστάσεων. Όλες αυτές οι δυναμικές περιοχές έχουν ανιχνευτεί στην ανάλυση της δυναμικής του εναγκαλισμού (Montangero et al., 2003 και Montangero και Viola, 2006).

8.2 Η δημιουργία του εναγκαλισμού

Από τις Χαμιλτονιανές στις οποίες έχουμε αναφερθεί μπορούν να προκύψουν απευθείας εναγκαλισμένες καταστάσεις.

Η απλούστερη περίπτωση είναι αυτή του μοντέλου XX, στο οποίο μόνο ένα spin έχει αντιστραφεί. Το γεγονός ότι ο χώρος Hilbert ορίζεται με βάση το σύνολο $|l\rangle$ αφήνει περιθώρια για την δημιουργία καταστάσεων W. Για μικρές αλυσίδες με $N=3, 4$ οι γενικευμένες καταστάσεις W που είναι της μορφής

$$|W\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}[|1000\rangle - i|0100\rangle - |0010\rangle - i|0001\rangle]$$

εμφανίζονται σε διακριτούς χρόνους και είναι πλήρως πολωμένες. Αυτό δεν μπορεί να επεκταθεί και στην περίπτωση ενός τυχαίου αριθμού qubit. Αυτό οφείλεται στο ότι οι διάφορες συχνότητες που εμφανίζονται στην εξέλιξη της κατάστασης δεν είναι ανάλογες. Ένα ιδιαίτερα ενδιαφέρον παράδειγμα για την δημιουργία εναγκαλισμένων καταστάσεων, είναι αυτό των “συσταδικών” καταστάσεων (cluster states). Η δυναμική εξέλιξη ενός μοντέλου Ising για μαγνητικό πεδίο ίσο με το μηδέν, $H = \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z$, είναι παρόμοια με μία σειρά καθορισμένων μεταβολών φάσης. Στην περίπτωση ενός κανονικού πλέγματος αυτή η Χαμιλτονιανή δημιουργεί “συσταδικές” καταστάσεις οι οποίες είναι ήδη γενικευμένες σύμφωνα με τις καταστάσεις ενός μοντέλου Ising που ορίζεται με βάση ένα απλό γράφημα. Ο τελεστής εξέλιξης σε χρόνο $Jt = \pi/4$ γράφεται ως

$$U(\pi/4) = \prod_{i,j} \frac{1}{2} (1 + \sigma_i^z \sigma_j^z). \quad (8.11)$$

Αν αρχικά έχουμε μία κατάσταση γινομένου με όλα τα spin προσανατολισμένα κατά μήκος της διεύθυνσης x, τότε σε χρόνο $Jt = \pi/4$ η κατάσταση παίρνει την μορφή αυτής ενός γινομένου καταστάσεων, ενώ εμφανίζεται ο μέγιστος διμερής εναγκαλισμός. Παράλληλα ο εναγκαλισμός είναι ισχυρός και τείνει να διατηρείται.

Ένα παράδειγμα συσταδικής κατάστασης που δημιουργείται από μία αλυσίδα Ising με σύζευξη μεταξύ πρώτων γειτόνων και με $N=4$, είναι η

$$|\Psi\rangle_{cl} = |0000\rangle + |1100\rangle + |0011\rangle - |1111\rangle \quad (8.12)$$

(για $N=2,3$ οι συσταδικές καταστάσεις συμπίπτουν αντίστοιχα με τις καταστάσεις Bell και GHZ). Το μοντέλο Ising δεν αποτελεί την μόνη περίπτωση για την δημιουργία καταστάσεων γροφήματος. Οι Borhani και Loss έδειξαν πως μπορούν να δημιουργηθούν χρησιμοποιώντας την αλληλεπίδραση Heisenberg ενώ οι Clark et al. τις κατασκεύασαν μέσω της Χαμιλτονιανής του μοντέλου XX.

Με κατάλληλη προσαρμογή της αρχικής κατάστασης ή του γραφήματος spin μπορούμε να οδηγηθούμε στην κατάλληλη εναγκαλισμένη κατάσταση. Στο μοντέλο XX για ένα αστεροειδές δίκτυο είναι σχετικά εύκολος ο έλεγχος της συμφωνίας μεταξύ δύο spin, μεταβάλλοντας μόνο την αρχική κατάσταση του κεντρικού spin. Το κεντρικό spin μεσολαβεί στην κατανομή των αλληλεπιδράσεων για τα εξωτερικά. Ο εναγκαλισμός κατά ζεύγη μπορεί να μεγιστοποιηθεί επιλέγοντας όλα τα εξωτερικά spin να είναι κάτω και το κεντρικό πάνω.

8.3 Η εξαγωγή του εναγκαλισμού

Ο εναγκαλισμός που εμπεριέχεται σε καταστάσεις πολλών σωματιδίων μπορεί καταρχήν να εξαχθεί και σε δεύτερη φάση να χρησιμοποιηθεί στην επεξεργασία της κβαντικής πληροφορίας. Αυτό σημαίνει ότι ο εναγκαλισμός μπορεί να μεταφερθεί σε ένα ζεύγος σωματιδίων και κατ' επέκταση να χρησιμοποιηθεί σε κβαντικούς υπολογισμούς ή για να διαπιστωθεί αν παραβιάζονται οι ανισότητες Bell ή όχι. Η ανταλλαγή αυτή του εναγκαλισμού μπορεί να γίνει σκεδάζοντας ένα ζεύγος σωματιδίων μέσω μίας αλυσίδας spin ή ενός οπτικού πλέγματος. Ουσιαστικά αποστέλλεται ένα ζεύγος σωματιδίων προς την εναγκαλισμένη αλυσίδα spin, με τέτοιο τρόπο ώστε το κάθε σωματίδιο να αλληλεπιδρά με διαφορετικό spin. Ο εναγκαλισμός εξάγεται από την αλυσίδα spin και δεν μπορεί να υπάρξει αν η αλυσίδα δεν έχει εναγκαλισμό. Πρακτικά οι αλληλεπιδράσεις με την σκέδαση μεταξύ των σωματιδίων και των spin της αλυσίδας θα πρέπει να είναι τέτοιες ώστε να είναι εφικτή η αλλαγή της κατάστασης τους. Αυτές οι αλληλεπιδράσεις υπάρχουν σύμφωνα με τα μοντέλα Heisenberg και XY. Ο πιο φυσικός τρόπος ώστε να εξαχθεί ο εναγκαλισμός από τα εναγκαλισμένα spin (ηλεκτρόνια) ενός στερεού θα ήταν μέσω της σκέδασης ζευγών νετρονίων από το στερεό. Άλλος ένας τρόπος θα ήταν μέσω της πραγματοποίησης Χαμιλτονιανών εναγκαλισμένων αλυσίδων spin χρησιμοποιώντας ψυχρά άτομα παγιδευμένα σε πηγάδια δυναμικού.

8.4 Η δυναμική εξέλιξη του εναγκαλισμού σε Γκαουσιανές καταστάσεις

Αναφορικά με την εξέλιξη των Γκαουσιανών έχουν επισημανθεί δύο βασικές πτυχές: Η δημιουργία εναγκαλισμού από μία κατάσταση που δεν ήταν εναγκαλισμένη αρχικά και η διάδοση μίας εναγκαλισμένης κατάστασης κατά μήκος ενός μη εναγκαλισμένου υποβάθρου. Και στις δύο περιπτώσεις το φαινόμενο θα εξαρτάται από την χρονική εξέλιξη της Χαμιλτονιανής. Η κατάσταση δύο τρόπων που είναι εναγκαλισμένη από την αρχή, χαρακτηρίζεται από μία παράμετρο συμπίεσης r , που εμφανίζεται στον πίνακα συνδιακύμανσης μέσω του στοιχείου $V_{\xi_a, \xi_a} = \cosh r$. Αυτό ισχύει για όλες τις μεταβλητές του χώρου των φάσεων για την μηδενική και την πρώτη κατάσταση του ταλαντωτή. Επιπλέον $V_{q_0, q_1} = V_{p_0, p_1} = \sinh r$ και απουσία άλλων μη διαγώνιων στοιχείων, όλα τα υπόλοιπα διαγώνια στοιχεία είναι ίσα με 1. Για την σύζευξη μεταξύ των πλησιέστερων γειτόνων του ταλαντωτή έχουν εξεταστεί δύο τρόποι. Υποθέσουμε ότι έχουμε να κάνουμε με ιδανικά ελατήρια για τα οποία ισχύει ο νόμος του Hooke, ενώ ταυτόχρονα εφαρμόζεται η προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος (RWA). Η RWA διατηρεί τον αριθμό των μποζονικών διεγέρσεων του

συστήματος, σε αντίθεση με την σύζευξη ιδανικού ελατηρίου. Ο αρχικός εναγκαλισμός κωδικοποιείται από τον μηδενικό ταλαντωτή, ο οποίος δεν είναι δεσμευμένος από την υπόλοιπη αλυσίδα και από έναν ταλαντωτή της αλυσίδας. Σε αυτή την περίπτωση η Χαμιλτονιανή του αρμονικού πλέγματος είναι

$$H = \frac{1}{2} \left(q_0^2 + p_0^2 + \sum_{k=1}^N (q_k^2 p_k^2 + K_1 (q_{k+1} - q_k)^2) \right) \quad (8.13)$$

Αφού διώξουμε τους όρους $\hat{a} \hat{a}$ και $\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger$ η Χαμιλτονιανή RWA γράφεται

$$H_{RWA} = \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 + (1 + K_1) \sum_{k=1}^N (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k - K_1 (\hat{a}_{k+1}^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k+1})) \quad (8.14)$$

Για αυτές τις δύο Χαμιλτονιανές, η χρονική εξέλιξη της θέσης και της ορμής μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά.

Η αρχική εναγκαλισμένη κατάσταση των δύο ταλαντωτών απελευθερώνεται την χρονική στιγμή $t=0$ στο υπόβαθρο των μη εναγκαλισμένων ταλαντωτών που έχουν προετοιμαστεί στην θεμελιώδη κατάσταση. Ο n -οστός και ο μηδενικός ταλαντωτής θα εναγκαλιστούν έπειτα από πεπερασμένο χρόνο $t_c(n)$, ο οποίος καθορίζεται από την ταχύτητα του ήχου της Χαμιλτονιανής του εκάστοτε μοντέλου. Μετά την άφιξη του κύματος του εναγκαλισμού ο εναγκαλισμός του n -οστού ταλαντωτή εμφανίζει αποσβεστική συμπεριφορά ανάλογη με την χαρακτηριστική χρονική κλίμακα του μοντέλου. Για το γενικό μοντέλο της (8.13) η ταχύτητα του ήχου έχει βρεθεί ότι είναι $u = K_1 / \sqrt{1 + 2K_1}$. Για την περίπτωση της RWA, αυτή η ταχύτητα γίνεται $u_{RWA} = K_1$. Το μέγεθος E_{N_f} του πρώτου τοπικού μεγίστου της λογαριθμικής αρνητικότητας, έχει χρησιμοποιηθεί προκειμένου να οριστεί η αποτελεσματικότητα της μετάδοσης T_{eff} του εναγκαλισμού στην αλυσίδα. Είναι

$$T_{eff} = E_{N_f} / E_{N_i}, \quad (8.15)$$

όπου E_{N_i} η λογαριθμική αρνητικότητα μεταξύ των ταλαντωτών μηδέν και ένα.

Και στα δύο μοντέλα, η E_{N_f} κορεννύεται μεταβάλλοντας την παράμετρο συμπίεσης, οπότε αυτό έχει τις αντίστοιχες συνέπειες στον εναγκαλισμό. Όπως ήταν αναμενόμενο ο βαθμός του κορεσμού μειώνεται σύμφωνα με την απόσταση n . Η βασική διαφορά είναι ότι για την γενικευμένη σύζευξη, π βαθμός του κορεσμού εξαρτάται και από την δύναμη της σύζευξης K_1 .

Δεδομένης της αρχικής λογαριθμικής αρνητικότητας $E_{N_i} = -2r / \ln 2$, η αποτελεσματικότητα της μετάδοσης συμπεριφέρεται με διαφορετικό τρόπο. Για το γενικό μοντέλο θα είναι μηδέν, όταν η παράμετρος συμπίεσης γίνει μηδέν, ενώ μεγιστοποιείται σε ένα πεπερασμένο r_{max} . Τελικά μηδενίζεται όταν $r \rightarrow \infty$. Αντίθετα στην RWA, η T_{eff} είναι γνησίως φθίνουσα συνάρτηση της παραμέτρου συμπίεσης r . Επίσης σε αυτή την περίπτωση, οι συχνότητες των ταλαντωτών και οι δυνάμεις της σύζευξης μπορούν να παραμετροποιηθούν κατάλληλα ώστε να υπάρξει η βέλτιστη μετάδοση από το ένα άκρο της ανοιχτής αλυσίδας M θέσεων στο άλλο. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί ως ακολούθως

$$U_{j,j+1} = U_{j,j+1} = K_1 \sqrt{n(M-n)}, \quad \text{με } U_{j,j} = 1 \quad (8.16)$$

$$\omega_n = 1 - K_1 \sqrt{n\bar{n}} - K_1 \sqrt{(n-1)(\bar{n}-1)} \quad (8.17)$$

όπου $\bar{n} = M - n$. Αυτό δεν είναι εφικτό για το γενικό μοντέλο και για $M > 2$.

Η μόνη δυνατότητα που υπάρχει, είναι να επιλέξουμε τις συζεύξεις και την συχνότητα στην RWA στο όριο $K_1 \rightarrow 0$. Σε αυτό το όριο, η RWA γίνεται ακριβής. Με αυτόν τον τρόπο η αποτελεσματικότητα της μετάδοσης μπορεί να γίνει πολύ καλή με τυχαίο τρόπο αλλά ταυτόχρονα η ταχύτητά της θα τείνει να γίνει μηδέν. Η μετάδοση της κβαντικής πληροφορίας είναι ανθεκτική ως προς τους θορύβους και στα δύο μοντέλα.

Άλλο ένα φαινόμενο που λαμβάνει χώρα στο γενικό μοντέλο είναι η δημιουργία εναγκαλισμού από μία μη εναγκαλισμένη κατάσταση, η οποία δεν είναι ιδιοκατάσταση της Χαμιλτονιανής. Αυτό μπορεί να γίνει από μία απότομη αλλαγή στην δύναμη της σύζευξης. Σε μία ανοιχτή αλυσίδα, οι ταλαντωτές στα τελευταία σημεία της γίνονται εναγκαλισμένοι σε χρόνο ίσο με τον μισό που χρειάζεται το σήμα για να ταξιδέψει κατά μήκος όλης της αλυσίδας. Από αυτό γίνεται αντιληπτό ότι ο αρχικός εναγκαλισμός κατά ζεύγη κατανέμεται από το κέντρο στην υπόλοιπη αλυσίδα. Αυξάνοντας την θερμοκρασία (σε μία πεπερασμένη τιμή) ο χρόνος αύξησης μπορεί να βελτιωθεί, ενώ το σήμα αποσβένει. Αυτό φαινόμενο είναι περισσότερο ευαίσθητο στον θόρυβο της δύναμης σύζευξης.

9. Υπολογισμός της εντροπίας von Neumann χωρικών καταμερισμών σε καταστάσεις γραμμένες στην βάση των θέσεων

Στόχος της παρούσας εργασίας, ήταν -ταυτόχρονα με την θεωρητική εμβάθυνση στις έννοιες του εναγκαλισμού- η ανάπτυξη ενός προγράμματος μέσω του οποίου θα ήταν εφικτή η μέτρηση της εντροπίας von Neumann σε χωρικές κατανομές (spatial partitioning) η οποία αποτελεί ένδειξη για το κατά πόσο εναγκαλισμένη είναι η εκάστοτε κατανομή. Το συγκεκριμένο πρόγραμμα είναι γραμμένο σε γλώσσα Python και δέχεται σαν είσοδο τους συντελεστές των συνιστωσών του ιδιοδιανύσματος με βάση το οποίο θα μετρηθεί η εντροπία, την γεωμετρία του χώρου και την περιοχή στην οποία θέλει ο χρήστης να γίνει η μέτρηση της εντροπίας. Οι συντελεστές του ιδιοδιανύσματος πρέπει να είναι καταχωρημένοι σε ένα αρχείο κειμένου, το όνομα του οποίου θα πρέπει να εισάγει ο χρήστης κατευθείαν στον κώδικα του προγράμματος. Η εισαγωγή του ονόματος του αρχείου γίνεται στην γραμμή του κώδικα

```
qx=csv.reader(open('filename', 'rb'))
```

όπου filename το όνομα του αρχείου.

Το πρόγραμμα ελέγχει αν το διάνυσμα είναι κανονικοποιημένο και στην περίπτωση που δεν είναι το κανονικοποιεί. Η γεωμετρία του χώρου αφορά ουσιαστικά τον αριθμό των θέσεων που βρίσκονται κατά μήκος των αξόνων x, y, z με βάση τις οποίες είναι διατυπωμένο το ιδιοδιάνυσμα. Έπειτα ο χρήστης εισάγει στο πρόγραμμα την περιοχή στην οποία θέλει να γίνει η μέτρηση, γράφοντας την πρώτη και την τελευταία θέση για την κάθε διεύθυνση (π.χ (3, 5)). Εδώ πρέπει να τονιστεί ότι η οι θέσεις θα πρέπει να εισάγονται ως εξής: αν θέλουμε για παράδειγμα να μετρήσουμε από την τρίτη θέση μέχρι και την όγδοη η εισαγωγή στο πρόγραμμα θα είναι: (2, 7), δηλαδή από την δεύτερη στην έβδομη. Αυτό οφείλεται στο ότι το πρώτο στοιχείο ενός πίνακα αντιστοιχεί στον δείκτη 0, ενώ το N -οστό στον $N-1$. Αφού εισαχθούν τα πιο πάνω στοιχεία το πρόγραμμα υπολογίζει την μήτρα πυκνότητας

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (9.1)$$

και από εκεί τις ανηγμένες μήτρες πυκνότητας ρ_A, ρ_B για την περιοχή που έχει ορίσει ο χρήστης και για την υπόλοιπη περιοχή αντίστοιχα. Για τον υπολογισμό των ανηγμένων μητρών πυκνότητας πρέπει να επιλεχθούν κατάλληλα τα στοιχεία της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας η οποία είναι ένας πίνακας δύο διαστάσεων. Ανάλογα με την γεωμετρία που έχει εισαχθεί από τον χρήστη τα στοιχεία τα οποία θα ληφθούν υπόψιν προσδιορίζονται μέσω της ακόλουθης σχέσης

$$i = (i_z - 1)n_x n_y + (i_y - 1)n_x + i_x, \quad (9.2)$$

όπου i το στοιχείο της διαγωνίου της ρ που θέλουμε να κρατήσουμε, i_z, i_x, i_y οι θέσεις κατά μήκος των αξόνων x, y, z που έχουμε επιλέξει και n_x, n_y, n_z ο συνολικός αριθμός των θέσεων σε κάθε διεύθυνση.

Η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας της περιοχής A υπολογίζεται από το μερικό ίχνος της περιοχής B και η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας της περιοχής B από το μερικό ίχνος της περιοχής A , σύμφωνα με τις σχέσεις

$$\rho_A = \text{tr}_B \rho, \quad \rho_B = \text{tr}_A \rho \quad (9.3)$$

Από εκεί και σύμφωνα με τον ορισμό της εντροπίας von Neumann

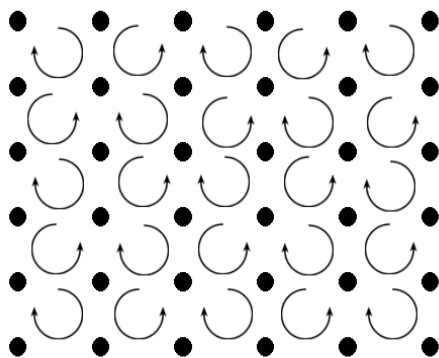
$$S(\rho) = -\text{tr} \rho \ln \rho, \quad (9.4)$$

υπολογίζει την εντροπία von Neumann για τις δύο περιοχές. Για τον υπολογισμό του λογαρίθμου των πινάκων έχει χρησιμοποιηθεί η αντίστοιχη ενσωματωμένη συνάρτηση της βιβλιοθήκης Scipy της python (<http://www.scipy.org/>). Ο χρόνος για την διεξαγωγή των υπολογισμών εξαρτάται από το μέγεθος του συστήματος. Όπως είναι αναμενόμενο όσο μεγαλύτερο είναι το σύστημα τόσο περισσότερο χρόνο χρειάζεται. Παρόλαυτα ακόμα και σε υπολογιστές με χαμηλές προδιαγραφές για τα σημερινά δεδομένα, ο χρόνος υπολογισμού σε μεγάλα συστήματα (π.χ. επίπεδο 22×22 θέσεων) είναι της τάξης των 40-90s. Μεγαλύτερα συστήματα δεν έχουν δοκιμαστεί ακόμα.

Κάθε φορά που τρέχει ο χρήστης το πρόγραμμα αυτό επιστρέφει ένα μόνο αποτέλεσμα για τις δύο περιοχές. Αν θέλει δηλαδή να κάνει καινούργια μέτρηση θα πρέπει να τρέξει το πρόγραμμα από την αρχή και να εισάγει πάλι την γεωμετρία και την περιοχή. Αυτό βέβαια είναι παραμετροποιήσιμο καθώς η Python είναι πολύ ευέλικτη γλώσσα. Αφού τρέξει το πρόγραμμα μία φορά, ο χρήστης βρίσκεται στην κονσόλα της Python από την οποία είναι προσβάσιμα όλα τα στοιχεία του υπολογισμού. Μπορεί για παράδειγμα να δει τους πίνακες των ανηγμένων μητρών και να υπολογίσει τις ιδιοτιμές τους, να ελέγξει την ιδιοκατάσταση και να προχωρήσει σε διάφορους υπολογισμούς με βάση αυτά. Το εν λόγω πρόγραμμα μπορεί να τρέξει σε όλα τα λειτουργικά συστήματα που υποστηρίζουν την python και τις βιβλιοθήκες Numpy (<http://www.numpy.org/>) και Scipy. Ο κώδικας παρατίθεται στο παράρτημα Α.

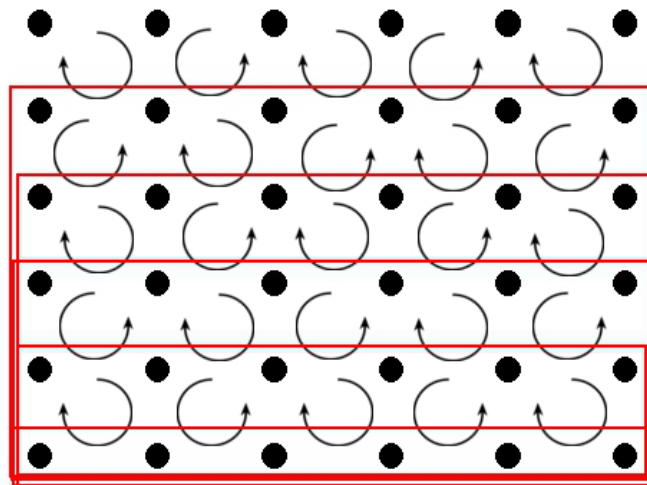
9.1 Η μέτρηση της εντροπίας von Neumann σε μία κατάσταση ροής (flux state)

Πριν προχωρήσουμε στην μελέτη ρεαλιστικότερων μοντέλων, το πρόγραμμα δοκιμάστηκε αρχικά πάνω σε τυχαίες καταστάσεις με πραγματικές συνιστώσες. Όπως ήταν αναμενόμενο η εντροπία σε αυτές έβγαινε ίση με μηδέν ή το πρόγραμμα δεν μπορούσε να τις υπολογίσει καθόλου, καθώς οι ανηγμένες μήτρες πυκνότητας είχαν ιδιοτιμές μικρότερες ή ίσες με το μηδέν. Αυτό που δοκιμάστηκε ήταν μία περίπτωση κατάστασης ροής σύμφωνα με την οποία χωρίζουμε το κυρίως πλέγμα σε μικρότερα τετράγωνα πλέγματα, των οποίων οι κορυφές έχουν μία διαφορά φάσης $\pi/2$ μεταξύ τους. Οι καταστάσεις αυτές δημιουργήθηκαν ως εξής: Αρχικά επιλέγουμε τις διαστάσεις του πλέγματος, έπειτα ανάλογα με τις τιμές των δεικτών i, j που σαρώνουν το πλέγμα στην κάθε κορυφή μπαίνει μία τιμή φάσης ίση με $0, \pi/2, \pi$ και $3\pi/2$. Πιο συγκεκριμένα, Αν το $i = 0, 2, 4, 6, \dots, 2n$ τότε αν $j = 0, 2, 4, 6, \dots, 2n$ βάζουμε στην κορυφή φάση ίση με 0 . Αν $j = 1, 3, 5, \dots, 2n+1$ τότε σε αυτή την κορυφή βάζουμε την φάση ίση με $\pi/2$. Όταν το $i = 1, 3, 5, \dots, 2n+1$, τότε για $j = 0, 2, 4, 6, \dots, 2n$, η τιμή της φάσης της κορυφής είναι $3\pi/2$, ενώ για $j = 1, 3, 5, \dots, 2n+1$ η τιμή της είναι ίση με π . Στις συγκεκριμένες καταστάσεις παρατηρείται μία απότομη αύξηση της εντροπίας von Neumann, ακόμα και σε μικρά συστήματα. Για την εξαγωγή των γραφημάτων που ακολουθούν εργαστήκαμε σε πλέγμα 6×6 .

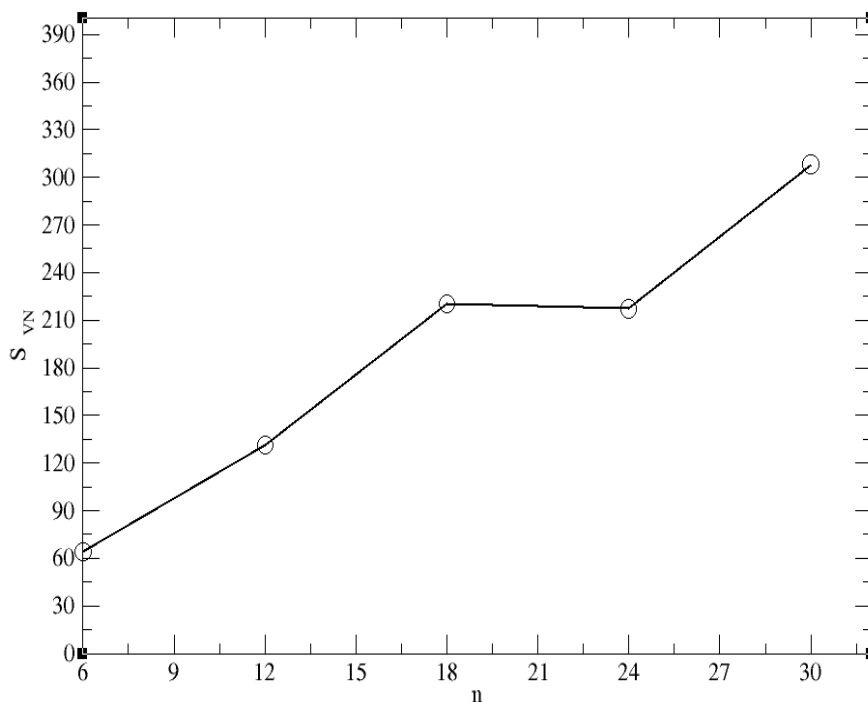


Σχήμα 9.1: Αναπαράσταση του πλέγματος σε μία κατάσταση ροής.

Πιο κάτω βλέπουμε τις διακυμάνσεις της εντροπίας von Neumann για διάφορες κατανομές στο πλέγμα. Η πρώτη μέτρηση έγινε κρατώντας σταθερό τον αριθμό των θέσεων κατά μήκος του άξονα x , και μεταβάλλοντας τον αριθμό τους κατά τον άξονα y .

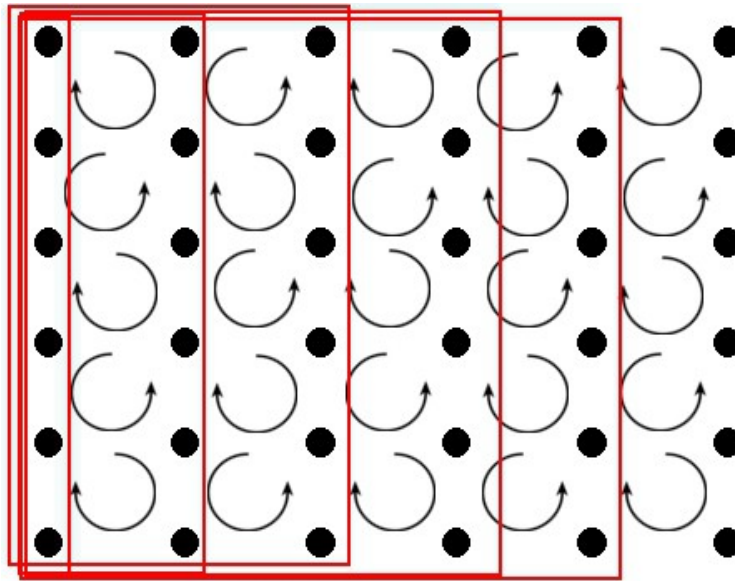


Σχήμα 9.2: Αναπαράσταση του τρόπου με τον οποίο επιλέχθηκαν οι περιοχές για την μέτρηση της εντροπίας. Ο αριθμός στην διεύθυνση x είναι σταθερός και ίσος με 6 ενώ σε κάθε μέτρηση μεταβάλλεται ο αριθμός στην διεύθυνση y .

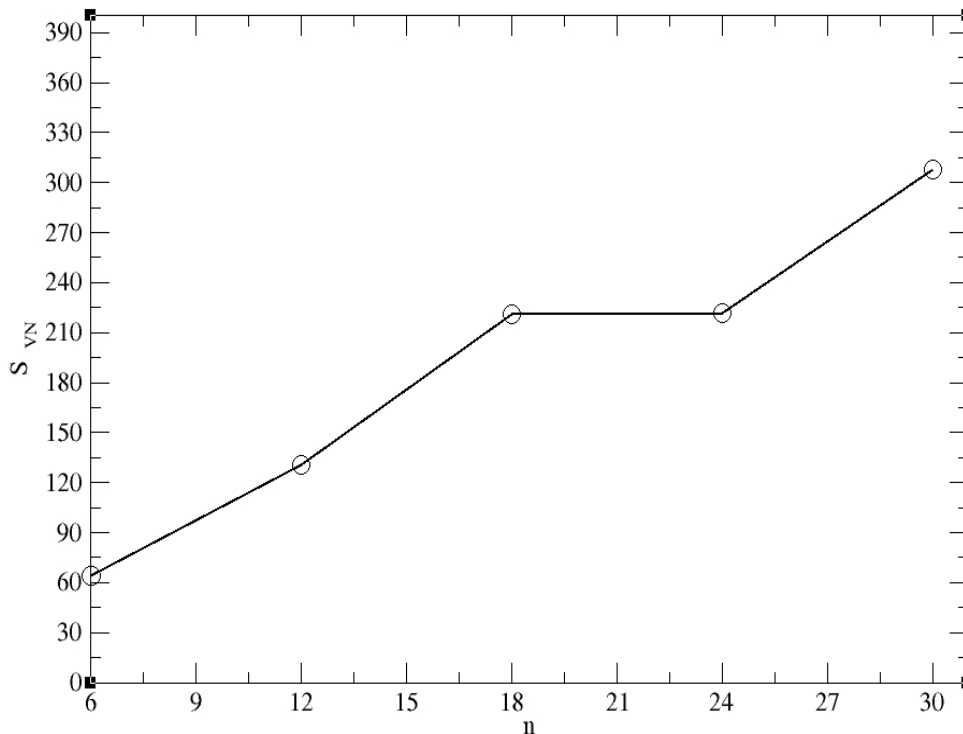


Σχήμα 9.3: Η μεταβολή της εντροπίας σε συνάρτηση με τον αριθμό των θέσεων. Όπως είναι αναμενόμενο, όσο μεγαλύτερη είναι η κατανομή, τόσο αυξάνεται η εντροπία.

Η επόμενη μέτρηση έγινε διατηρώντας σταθερό τον αριθμό των θέσεων στην διεύθυνση y και μεταβάλλοντας τον αριθμό τους στην διεύθυνση x .

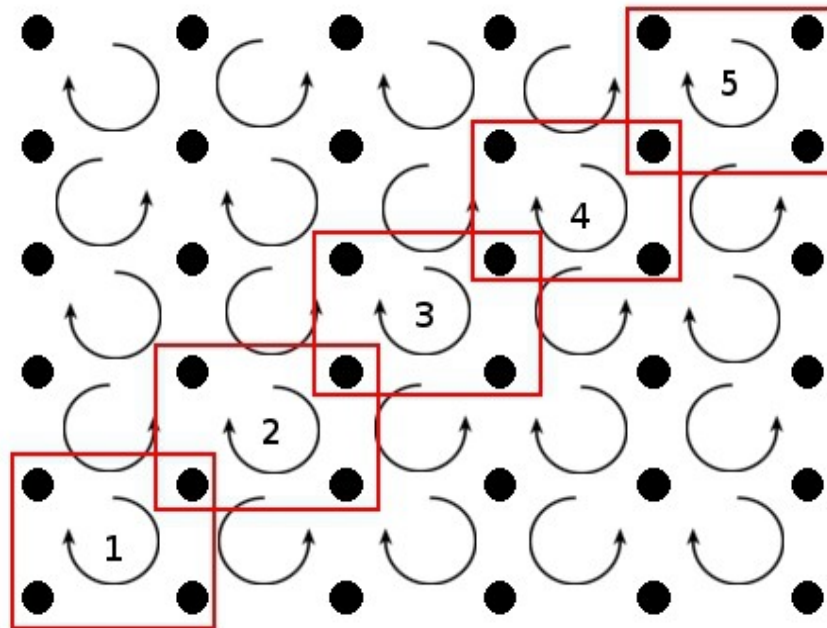


Σχήμα 9.4: Αναπαράσταση του τρόπου με τον οποίο επιλέχθηκαν οι κατανομές για την μέτρηση της εντροπίας. Σε αυτή την περίπτωση διατηρείται σταθερός ο αριθμός των θέσεων στην διεύθυνση y και μεταβάλλεται στην διεύθυνση x .



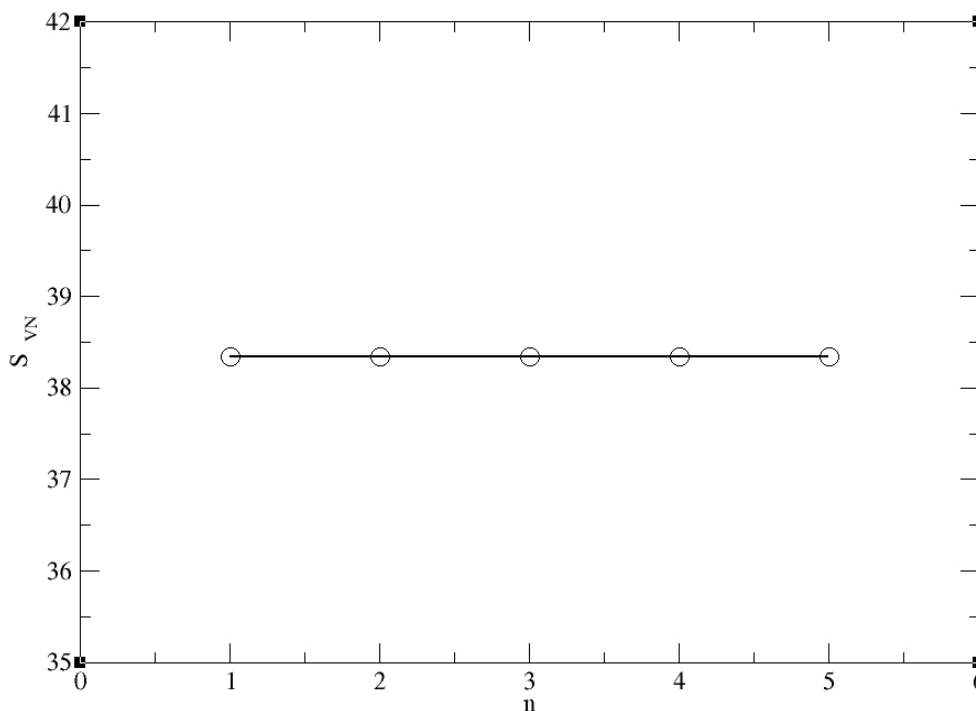
Σχήμα 9.5: Η μεταβολή της εντροπίας σε συνάρτηση με τον αριθμό των θέσεων. Και σε αυτή την περίπτωση όσο αυξάνεται το μέγεθος της κατανομής αυξάνεται και η εντροπία, με εξαίρεση ένα πλατό που δημιουργείται για 18 και 24 θέσεις.

Η επόμενη μέτρηση έγινε διατηρώντας σταθερό τον αριθμό και την γεωμετρία της περιοχής και μεταβάλλοντας την σχετική της θέση μέσα στο πλέγμα. Η περιοχή ήταν ένα τετράγωνο στις τέσσερις κορυφές του οποίου αντιστοιχεί μία θέση.



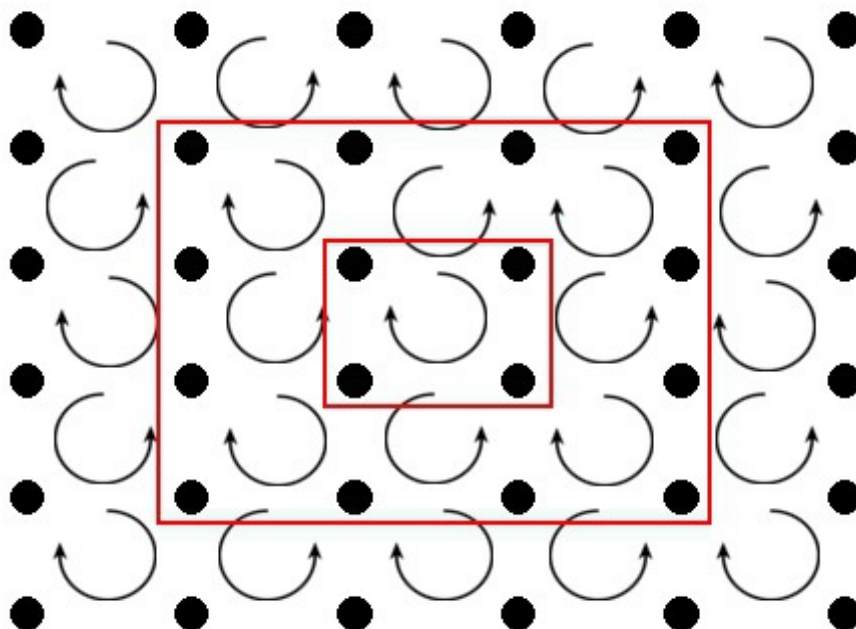
Σχήμα 9.6: Αναπαράσταση του τρόπου με τον οποίο επιλέχθηκαν τα τετράγωνα για την μέτρηση της εντροπίας.

Σε αυτή την περίπτωση η εντροπία διατηρήθηκε σταθερή σε κάθε μέτρηση

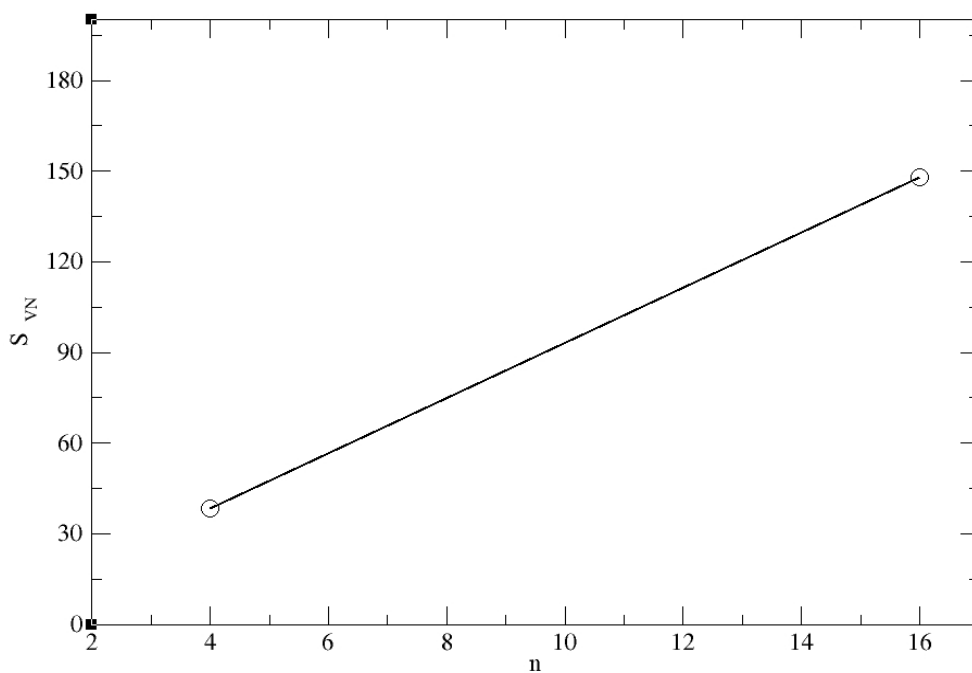


Σχήμα 9.7: Οι τιμές της εντροπίας για τις θέσεις στις οποίες αντιστοιχεί το κάθε τετράγωνο όπως φαίνονται στο σχήμα 9.5.

Ακολουθως έγιναν δύο μετρήσεις πάνω στα δύο τετράγωνα που μπορούμε να ορίσουμε ξεκινώντας από το εσωτερικό του πλέγματος και αυξάνοντας συμμετρικά τον αριθμό των θέσεων. Η αναπαράσταση για το πως επιλέχθηκαν οι περιοχές φαίνεται στο πιο κάτω σχήμα

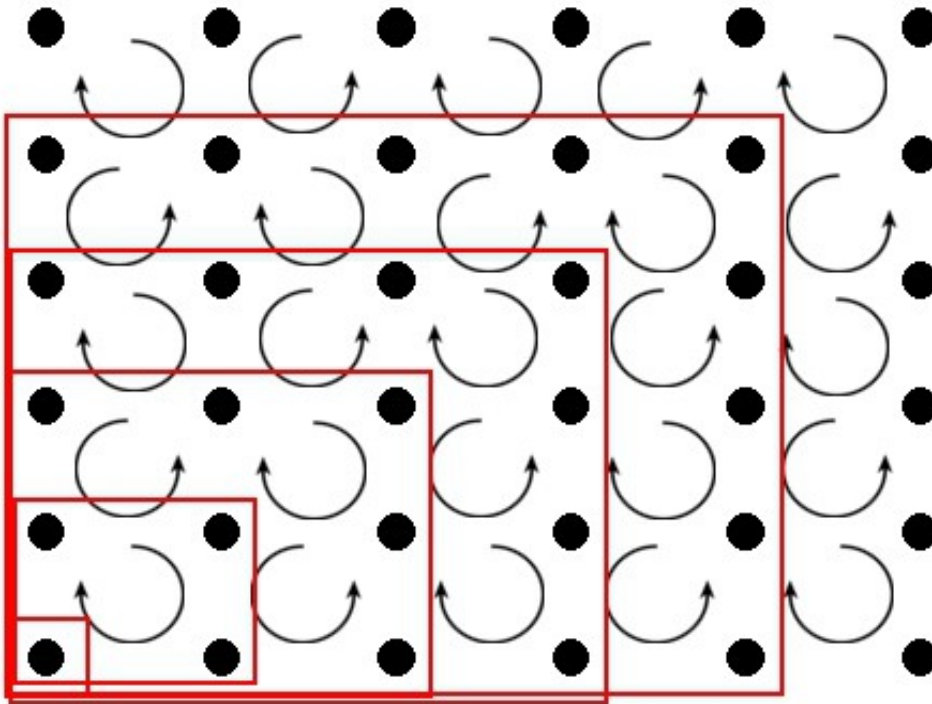


Σχήμα 9.8: Αναπαράσταση του τρόπου με τον οποίο επιλέχθηκαν οι δύο περιοχές για τον υπολογισμό της εντροπίας.

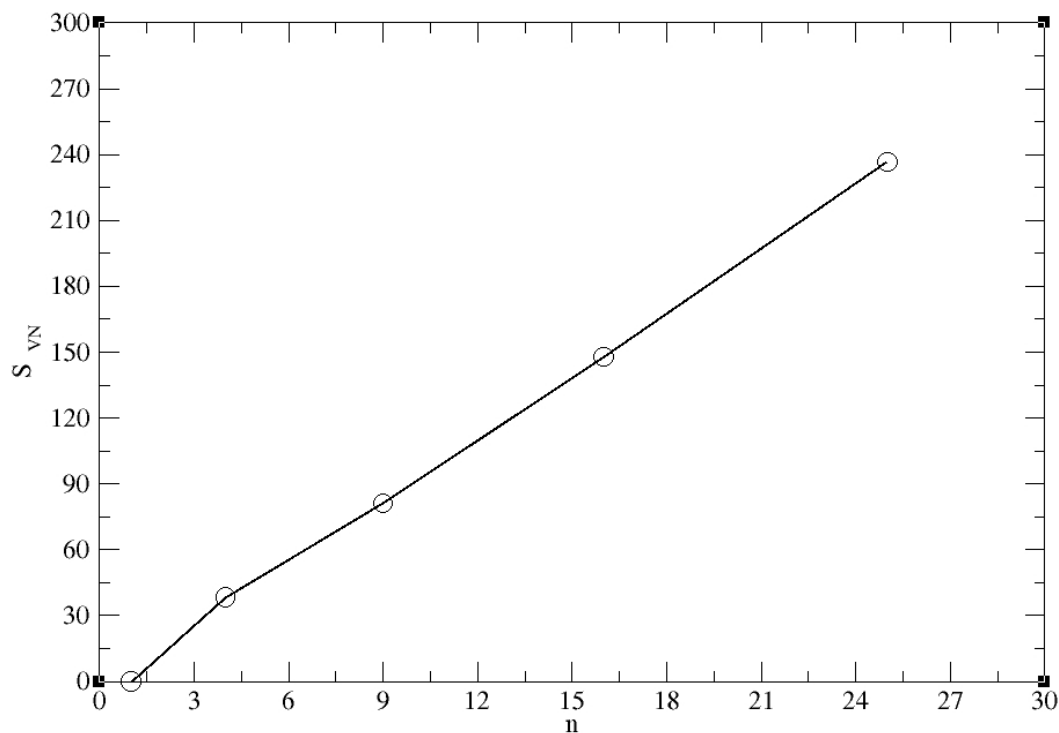


Σχήμα 9.9: Οι τιμές της εντροπίας σε συνάρτηση με τον αριθμό των σωματιδίων. Σε αυτή την περίπτωση μπόρεσαν να γίνουν δύο μόνο μετρήσεις λόγω του μεγέθους του πλέγματος.

Τέλος για την κατάσταση ροής έγινε ένα σύνολο μετρήσεων με βάση την αύξηση του αριθμού των θέσεων ξεκινώντας από την κορυφή που βρίσκεται την κάτω, αριστερή κορυφή του πλέγματος όπως φαίνεται στο σχήμα που ακολουθεί.



Σχήμα 9.10: Αναπαράσταση του τρόπου με τον οποίον επιλέχθηκαν οι κατανομές για την μέτρηση της εντροπίας. Οι μετρήσεις έγιναν ξεκινώντας από την κάτω αριστερή γωνία.

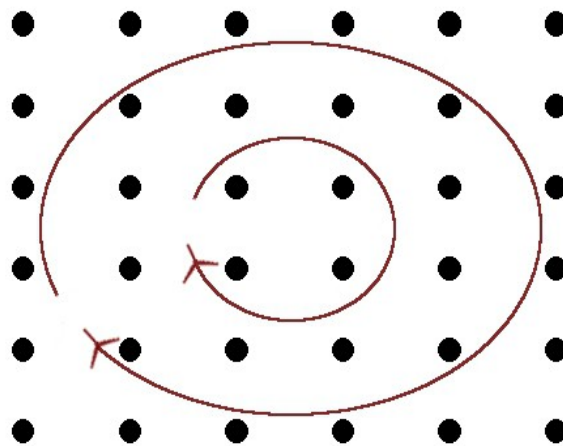


Σχήμα 9.11: Οι τιμές της εντροπίας σε συνάρτηση με τον αριθμό των σωματιδίων. Σε αυτή την περίπτωση και όπως φαίνεται από το σχήμα η μεταβολή της είναι σχεδόν γραμμική

Τα αποτελέσματα για την flux state είναι ικανοποιητικά αφού ήταν αναμενόμενη η αύξηση της εντροπίας με την αύξηση των θέσεων που λαμβάνονταν υπόψιν για τις μετρήσεις. Αρχικός στόχος ήταν να γίνουν υπολογισμοί σε πλέγματα με περισσότερες θέσεις. Σε αυτή την περίπτωση όμως οι τιμές της εντροπίας γίνονταν πολύ μεγάλες και από ένα σημείο και έπειτα το πρόγραμμα δεν έβγαζε κάποιο αποτέλεσμα αφού δεν μπορούσε να διαχειριστεί τις πολύ μεγάλες τιμές που προέκυπταν.

9.2 Η μέτρηση της εντροπίας von Neumann σε μία χειρόμορφη κατάσταση (chiral state)

Οι θέσεις του πλέγματος στο οποίο αποδίδεται μία χειρόμορφη κατάσταση χαρακτηρίζονται πάλι από διαφορές φάσεις. Αυτή την φορά όμως οι υποπεριοχές χωρίζονται διαφορετικά. Αρχικά ξεκινάμε από το τετράγωνο που βρίσκεται στο εσωτερικό του πλέγματος στις κορυφές του οποίου βρίσκονται τέσσερις θέσεις. Η κάθε θέση έχει διαφορά φάσης $\pi/2$ σε σχέση με τις γειτονικές της. Έπειτα αρχίζουμε και κατευθυνόμαστε προς τα “έξω” και περνάμε στο επόμενο τετράγωνο το οποίο αντιστοιχεί σε 12 κορυφές εκεί η κάθε κορυφή έχει διαφορά φάσης $\pi/6$ σε σχέση με τις γειτονικές της. Αφού ολοκληρώσουμε αυτό το τετράγωνο περνάμε στο επόμενο του οποίου οι γειτονικές θέσεις έχουν διαφορά φάσης $\pi/10$. Αυτό επαναλαμβάνεται μέχρι να φτάσουμε στο εξωτερικό τετράγωνο το οποίο οριοθετεί και το πλέγμα. Οι μετρήσεις της εντροπίας von Neumann έγιναν και σε αυτή την περίπτωση σε ένα πλέγμα 6×6 . Οι περιοχές στις οποίες έγιναν οι μετρήσεις είναι οι ίδιες με αυτές της περίπτωσης της κατάστασης ροής. Πιο κάτω βλέπουμε πως αποδίδεται σχηματικά το πλέγμα μίας χειρόμορφης κατάστασης.

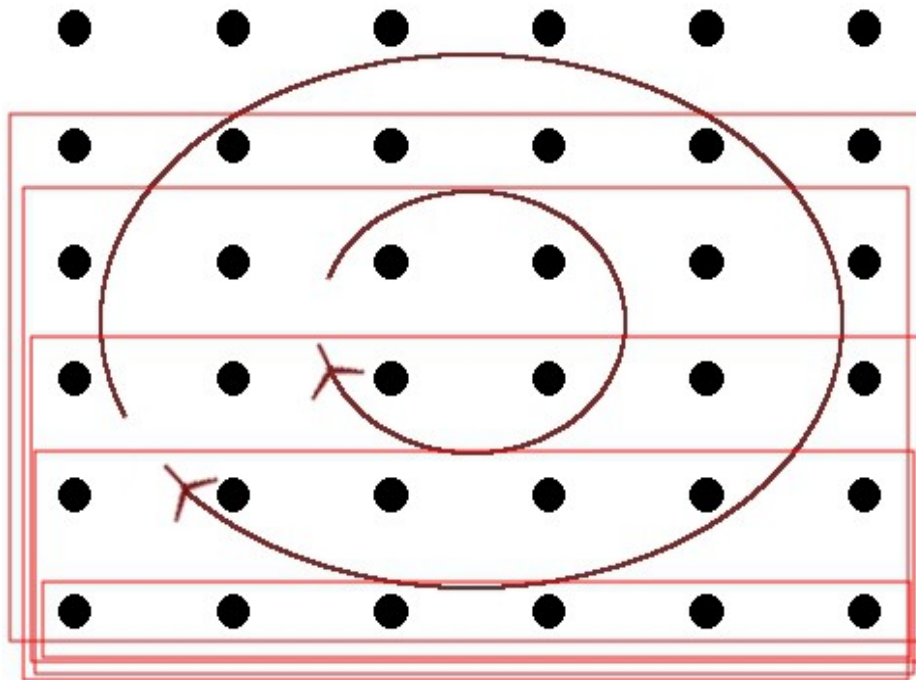


Σχήμα 9.12: Η αναπαράσταση του πλέγματος των θέσεων για μία χειρόμορφη κατάσταση.

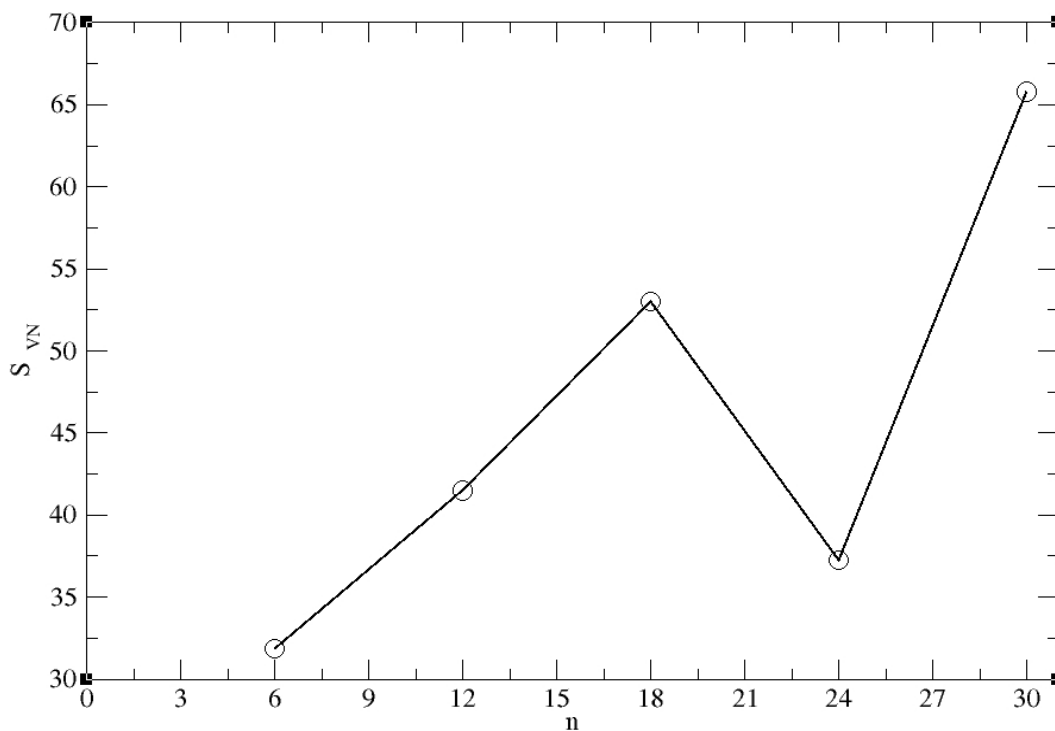
Η κατασκευή μίας χειρόμορφης κατάστασης είναι πιο σύνθετη σε σχέση με αυτήν για μία κατάσταση ροής. Αυτό οφείλεται στον τρόπο με τον οποίο σαρώνεται το πλέγμα και στις κυμαινόμενες διαφορές φάσης μεταξύ των θέσεων.

Η μορφολογία των χειρόμορφων καταστάσεων βασίζεται στον τρόπο με τον οποίο κινούνται τα ηλεκτρόνια παρουσία ενός μαγνητικού πεδίου. Οι τροχιές τους σε αυτή την περίπτωση είναι κυκλοτρονικές, οπότε τα ηλεκτρόνια κινούνται προς συγκεκριμένες κατευθύνσεις.

Όπως και πριν η πρώτη μέτρηση έγινε θεωρώντας σταθερές τις θέσεις στην διεύθυνση x και μεταβάλλοντας τον αριθμό τους κατά μήκος της διεύθυνσης y .

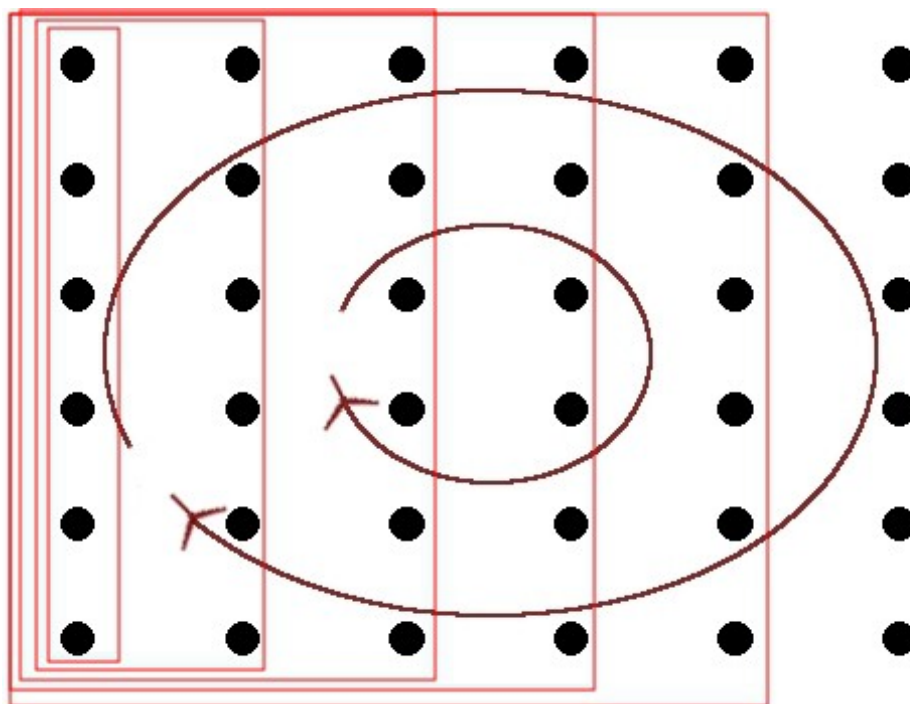


Σχήμα 9.13: Αναπαράσταση του τρόπου με τον οποίον επιλέχθηκαν οι περιοχές για την μέτρηση της εντροπίας, διατηρώντας σταθερό τον αριθμό των σωματιδίων στην διεύθυνση x και μεταβάλλοντας τον στην y .

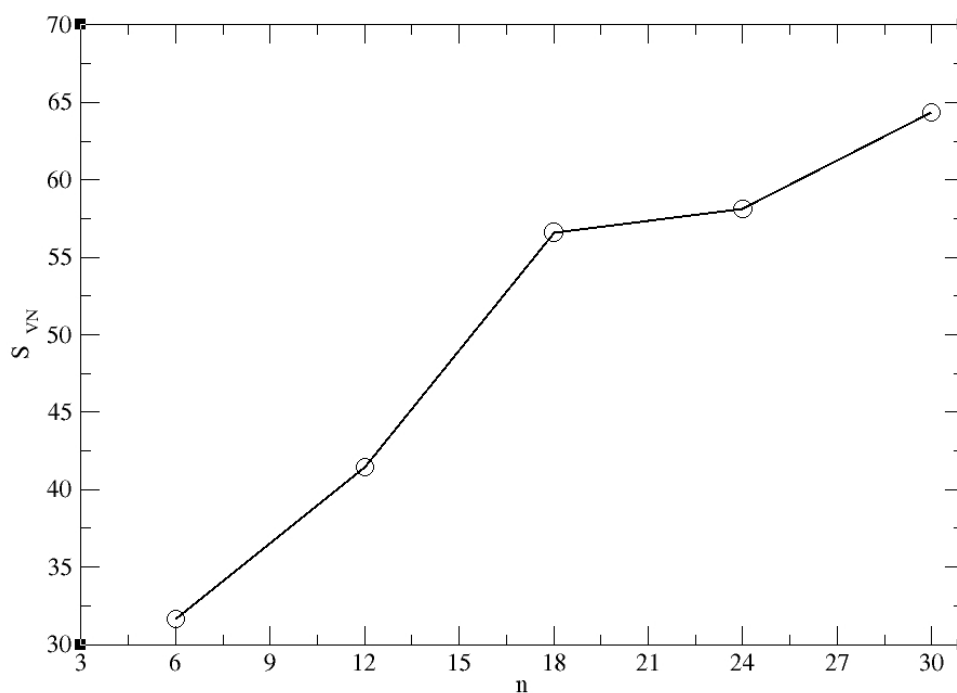


Σχήμα 9.14: Οι τιμές της εντροπίας σε συνάρτηση με τον αριθμό των σωματιδίων. Εδώ παρουσιάζει ενδιαφέρον το γεγονός ότι ενώ κανονικά θα έπρεπε να αυξάνεται με την αύξηση του αριθμού των σωματιδίων, για $n=18$, πέφτει σχεδόν στην αρχική τιμή

Ακολουθώς έγιναν μετρήσεις διατηρώντας σταθερό τον αριθμό των σωματιδίων στην διεύθυνση y και αυξάνοντάς τον στην διεύθυνση x .

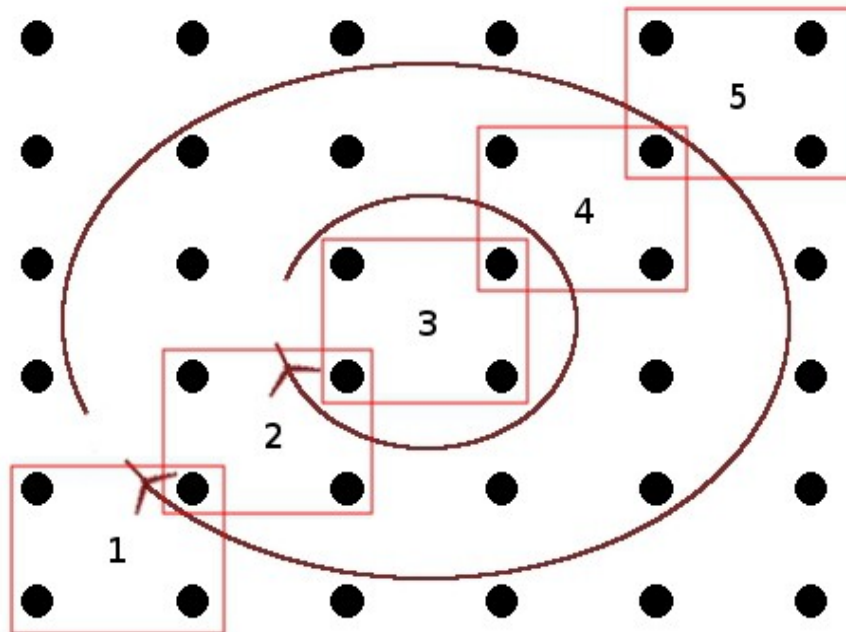


Σχήμα 9.15: Αναπαράσταση του τρόπου με τον οποίο επιλέχθηκαν οι περιοχές για την μέτρηση της εντροπίας, διατηρώντας σταθερό τον αριθμό των σωματιδίων στην διεύθυνση y και μεταβάλλοντας τον στην x .

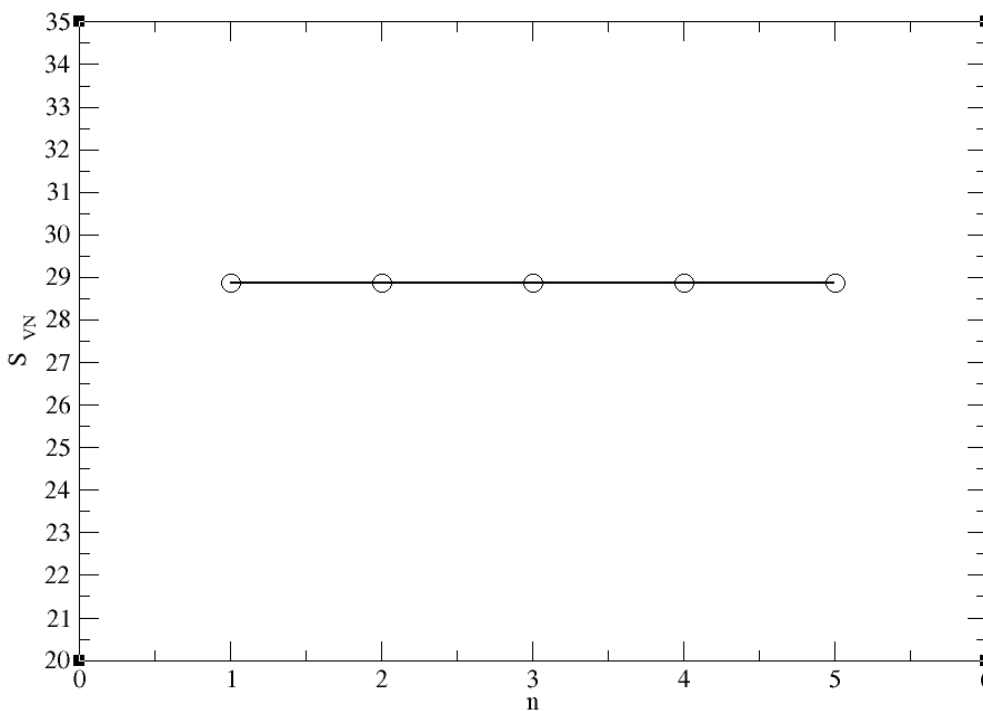


Σχήμα 9.16: Η εντροπία σε συνάρτηση με τον αριθμό των σωματιδίων. Σε αντίθεση με την κατάσταση ροής, εδώ η εντροπία δεν αυξάνεται γραμμικά, αλλά φαίνεται να συγκλίνει.

Εν συνεχεία έγιναν πάλι μετρήσεις διατηρώντας σταθερό τον αριθμό των θέσεων και μεταβάλλοντας την θέση της κατανομής στο επίπεδο. Το αποτέλεσμα ήταν το ίδιο με αυτό της κατάστασης ροής. Η εντροπία δεν μεταβάλλεται καθόλου.

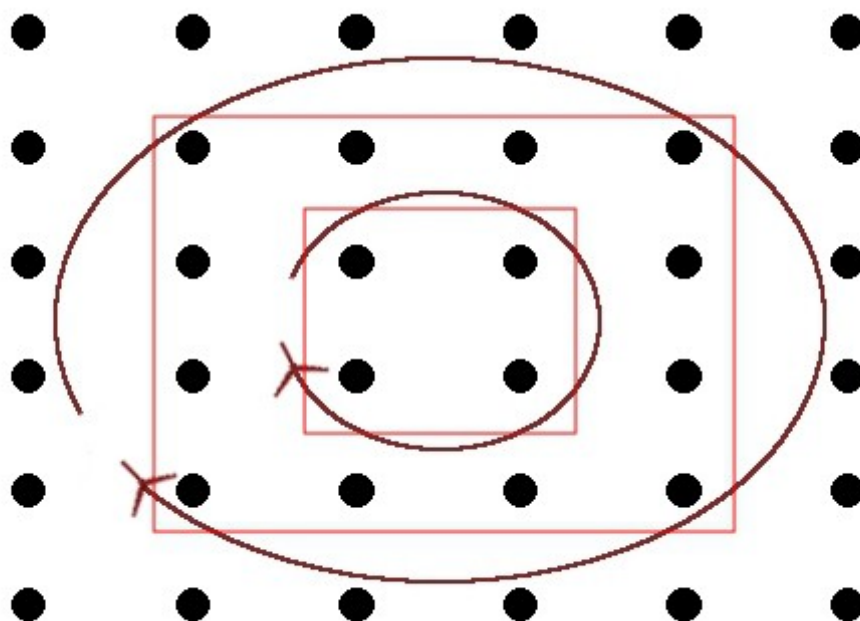


Σχήμα 9.17: Οι μετρήσεις έγιναν πάνω σε τετράγωνα στις κορυφές των οποίων αντιστοιχούν 4 θέσεις του πλέγματος.

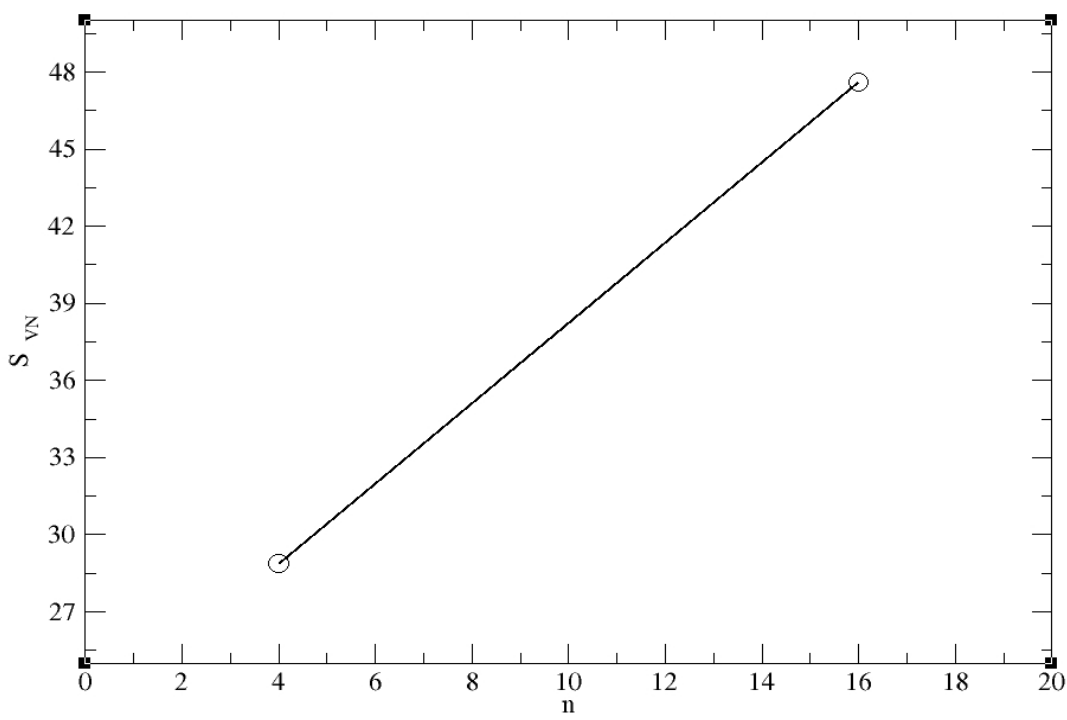


Σχήμα 9.18: Η εντροπία σε αυτή την περίπτωση παραμένει σταθερή όπως ήταν αναμενόμενο

Οι επόμενες μετρήσεις έγιναν πάλι ξεκινώντας από το εσωτερικό του πλέγματος επιλέγοντας το μικρότερο δυνατό τετράγωνο, με κατεύθυνση προς τα έξω αυξάνοντας συμμετρικά τον αριθμό των θέσεων.

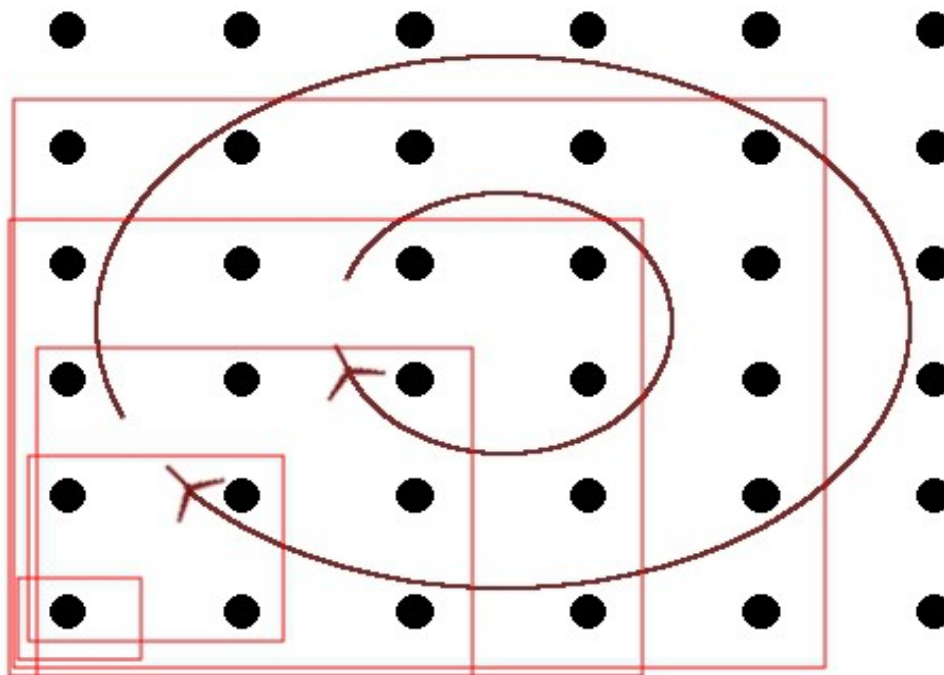


Σχήμα 9.19: Οι περιοχές στις οποίες έγιναν οι μετρήσεις για την χειρόμορφη κατάσταση

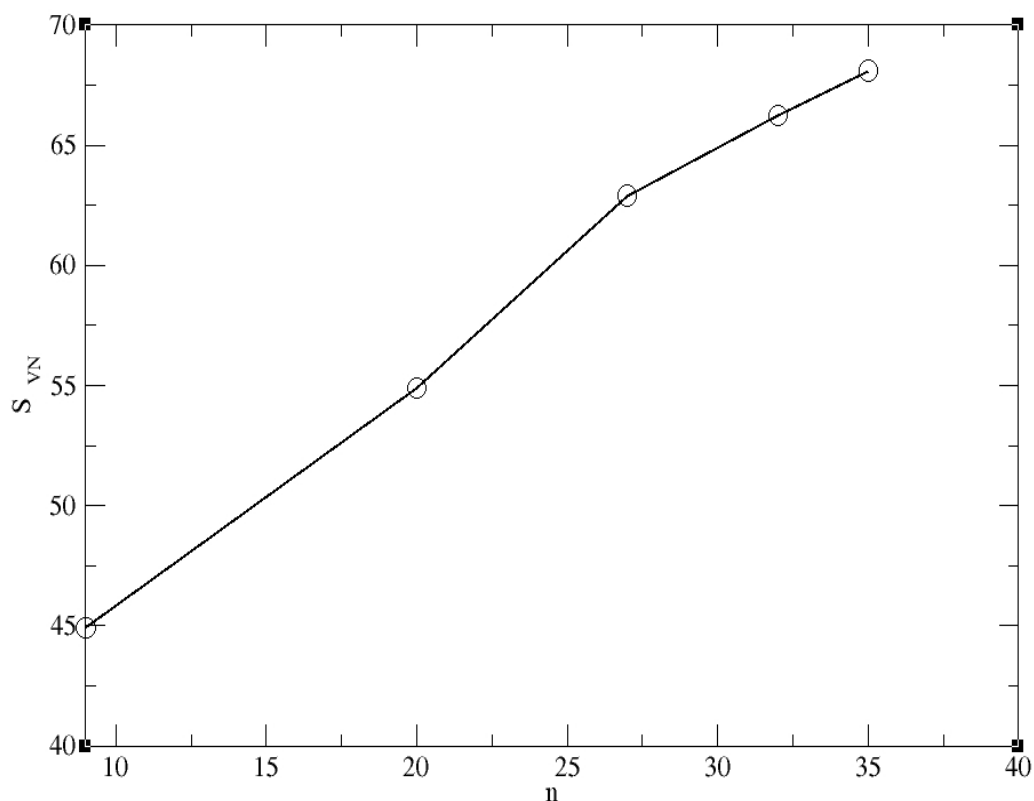


Σχήμα 9.20: Οι τιμές της εντροπίας von Neumann για τις δύο περιοχές που φαίνονται στο σχήμα 9.19

Οι τελευταίες μετρήσεις που έγιναν για την χειρόμορφη κατάσταση ήταν με την σταδιακή αύξηση των θέσεων στην περιοχή ξεκινώντας από την κάτω αριστερή γωνία



Σχήμα 9.21: Ο τρόπος με τον οποίο επιλέχθηκαν οι περιοχές για την μέτρηση της εντροπίας. Ξεκινήσαμε με την 1η θέση στην κάτω αριστερή γωνία και αυξήσαμε σταδιακά τον αριθμό τους όπως φαίνεται στο σχήμα

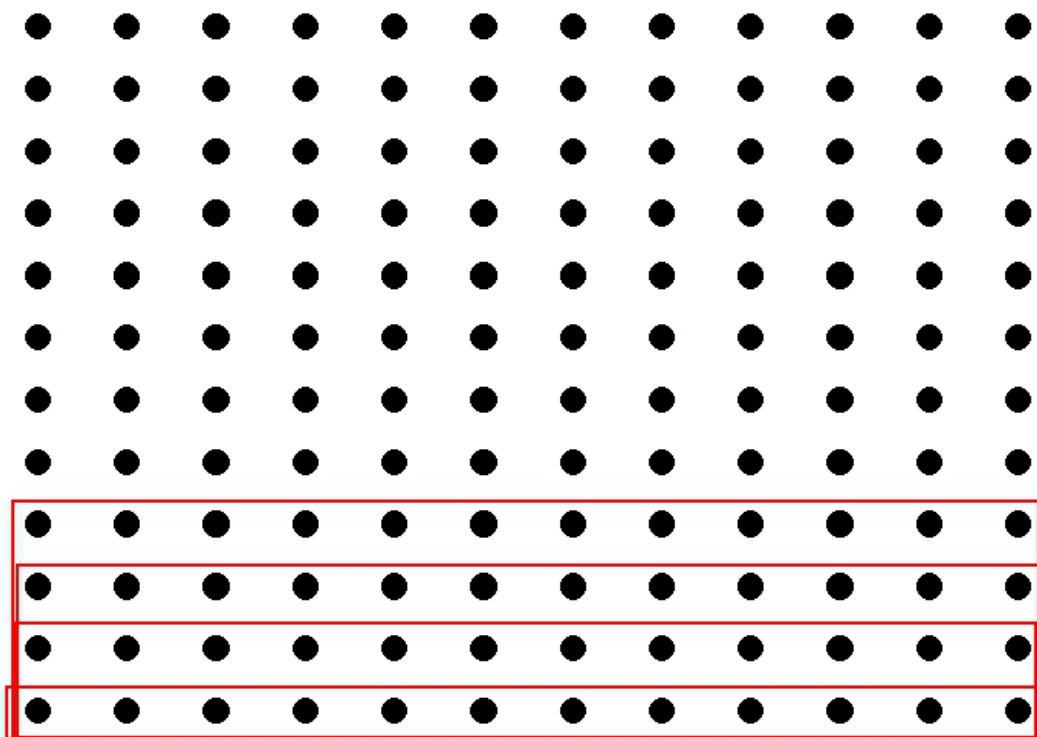


Σχήμα 9.22: Οι τιμές της εντροπίας von Neumann σε συνάρτηση με τον αριθμό των θέσεων για τις περιοχές που φαίνονται στο σχήμα 9.21.

9.3 Η μέτρηση της εντροπίας von Neumann σε μία τροποποιημένη εκδοχή της κατάστασης ροής

Οι τελευταίες μετρήσεις έγιναν πάνω σε μία τροποποιημένη μορφή των καταστάσεων ροής. Οι συντελεστές του ιδιοδιανύσματος αποτελούνταν από το γινόμενο των αντίστοιχων συντελεστών με αυτών της κατάστασης ροής, με έναν συντελεστή ο οποίος μεταβαλλόταν σύμφωνα με την σχετική θέση του σημείου στο πλέγμα. Οι διαστάσεις του πλέγματος σε αυτή την περίπτωση είναι 12×12 . Τα αποτελέσματα είχαν αρκετό ενδιαφέρον καθώς η εντροπία παρουσίαζε διαφορετική συμπεριφορά.

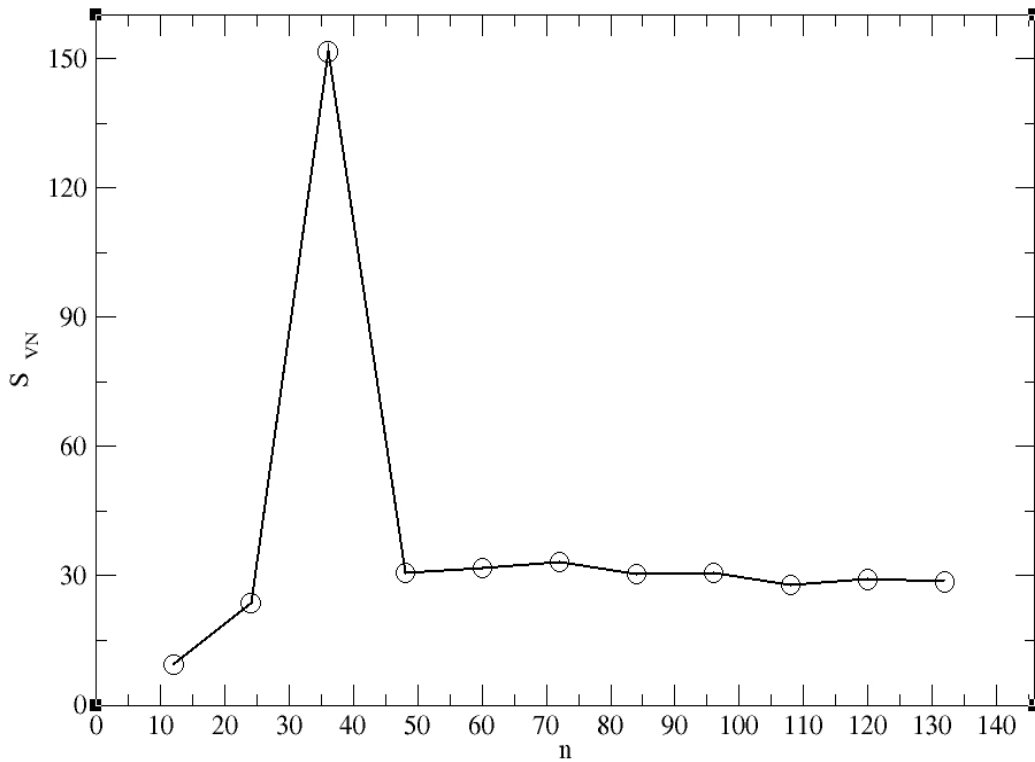
Η πρώτη μέτρηση έγινε πάλι διατηρώντας σταθερό τον αριθμό στην διεύθυνση x και μεταβάλλοντας τον αριθμό των θέσεων στην διεύθυνση y , όπως και στις προηγούμενες περιπτώσεις.



Σχήμα 9.23: Αναπαράσταση του τρόπου με τον οποίο επιλέχθηκαν οι περιοχές. Σε αυτή την περίπτωση διατηρείται σταθερός και ίσος με 12 ο αριθμός των σωματιδίων στην διεύθυνση x και μεταβάλλεται κατά την διεύθυνση y .

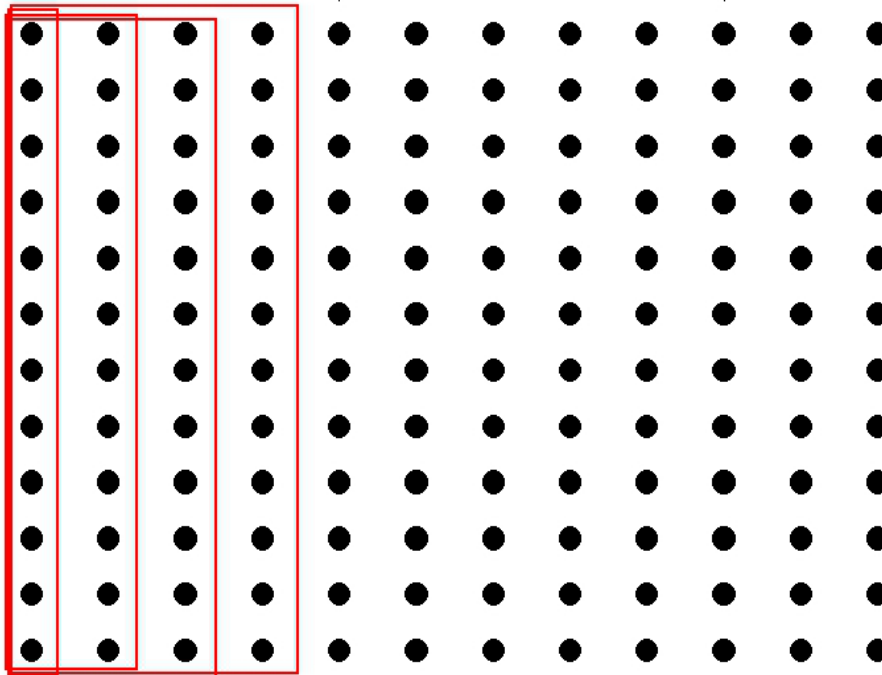
Σε αντίθεση με τις δύο προηγούμενες περιπτώσεις και λόγω του ότι το πλέγμα είναι πιο μεγάλο, δεν απεικονίζονται όλες οι περιοχές στις οποίες έγιναν μετρήσεις. Απεικονίζονται ενδεικτικά οι πρώτες προκειμένου να καταλάβει ο αναγνώστης ποιος ήταν ο αριθμός και η περιοχή των θέσεων στο πλέγμα.

Στο διάγραμμα της επόμενης σελίδας βλέπουμε την διακύμανση της εντροπίας von Neumann σε συνάρτηση με τον αριθμό των θέσεων.

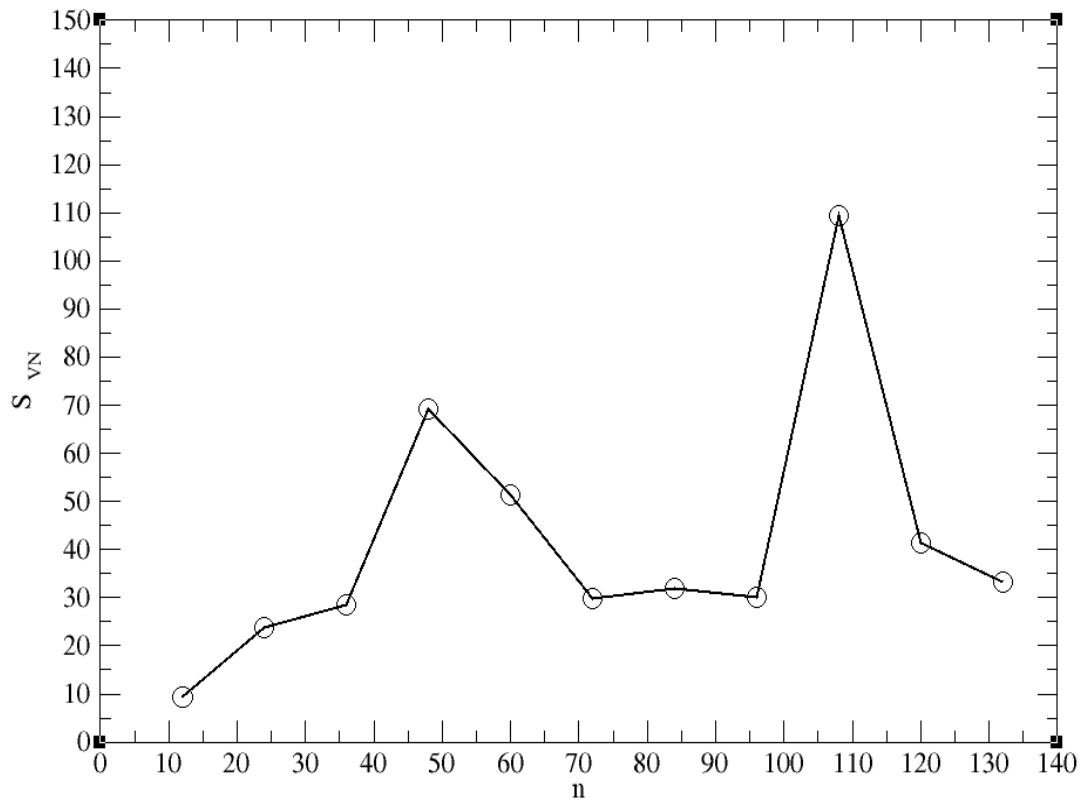


Σχήμα 9.24: Οι τιμές της εντροπίας von Neumann σε συνάρτηση με τον αριθμό των θέσεων. Παρατηρούμε ότι γενικά παρουσιάζει μικρές μεταβολές με την αύξηση του αριθμού των θέσεων με εξαίρεση την τιμή για $n=36$, όπου η τιμή γίνεται πολύ μεγάλη. Από εκεί και πέρα η τιμή της εντροπίας παραμένει σχεδόν σταθερή

Η δεύτερη μέτρηση έγινε διατηρώντας σταθερό τον αριθμό των θέσεων στην διεύθυνση y και μεταβάλλοντας τον στην διεύθυνση x . Όπως φαίνεται στο σχήμα πιο κάτω

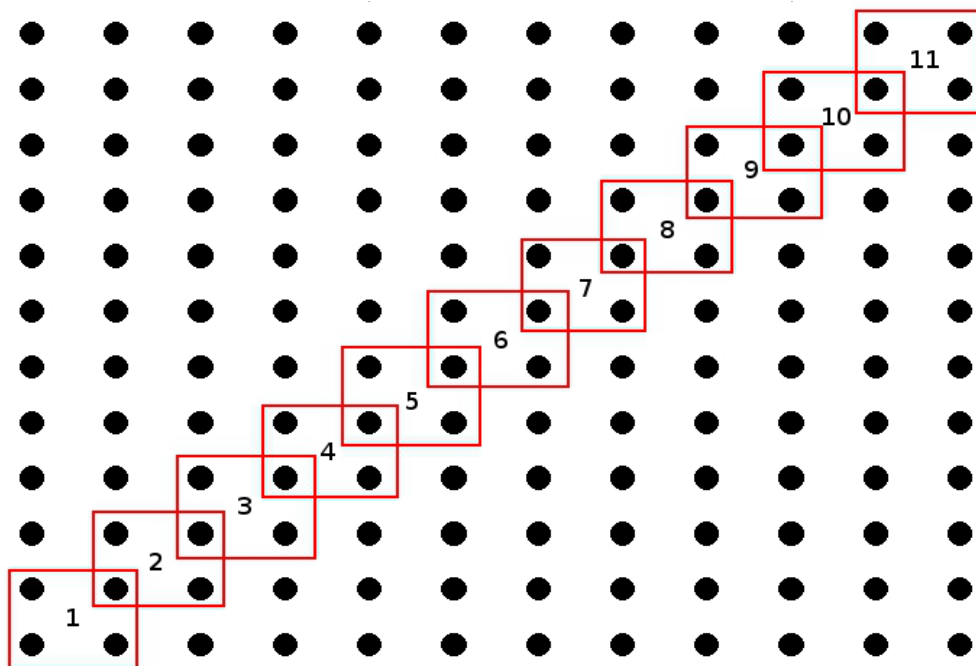


Σχήμα 9.25: Οι περιοχές πάνω στις οποίες έγινε η μέτρηση (δεν επισημαίνονται όλες) διατηρώντας σταθερό τον αριθμό στην διεύθυνση y και μεταβάλλοντας τον στην x



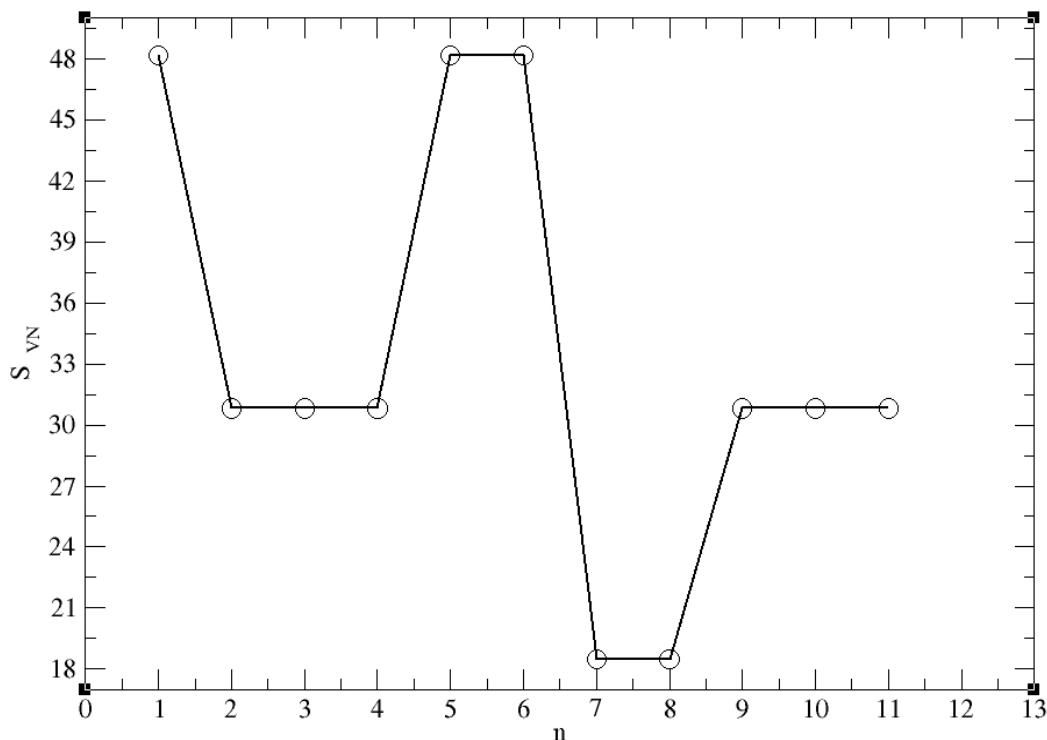
Σχήμα 9.26: Οι τιμές της εντροπίας von Neumann σε συνάρτηση με τον αριθμό των θέσεων. Εδώ παρατηρείται μία σταδιακή αύξηση για τις πρώτες μετρήσεις (από $n=12$, μέχρι $n=36$) με μία απότομη αύξηση για $n=48$, η οποία ακολουθείται από μία πτώση, μία εξισορρόπηση (από $n=72$, μέχρι $n=96$) και πάλι μία τοπική αύξηση για $n=108$, η οποία ακολουθείται από μία πτώση.

Οι επόμενες μετρήσεις έγιναν για σταθερό αριθμό θέσεων (και πάλι τετράγωνα στις κορυφές των οποίων αντιστοιχούν 4 θέσεις), ακολουθώντας την διαγώνιο του πλέγματος.



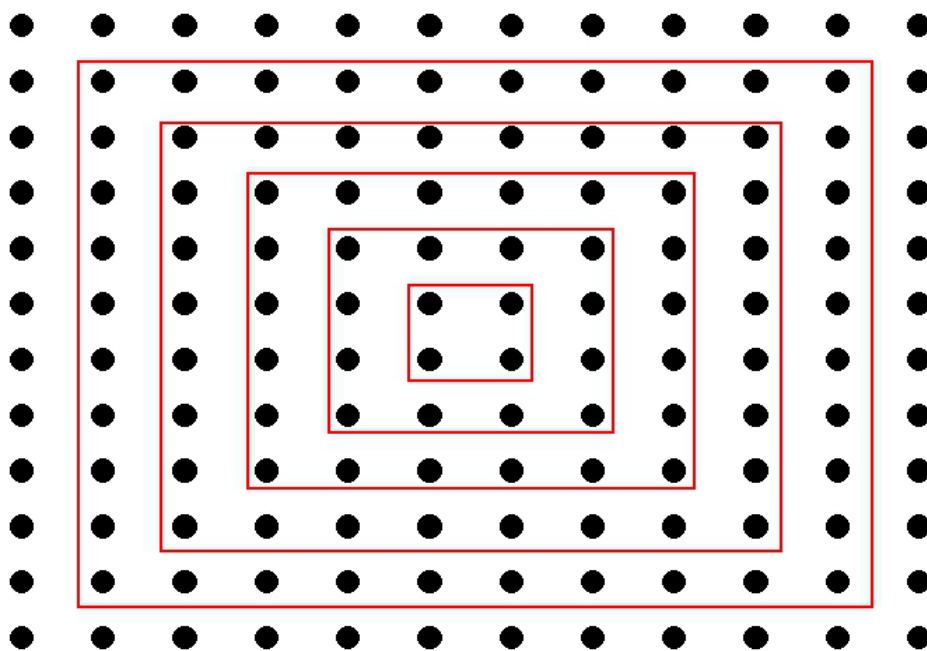
Σχήμα 9.27: Οι περιοχές στις οποίες έγιναν οι μετρήσεις.

Οι τιμές της εντροπίας για τις περιοχές που ορίζουν τα τετράγωνα ήταν οι ίδιες, όπως και στις προηγούμενες μετρήσεις. Αυτό που παρουσιάζει ενδιαφέρον είναι ότι οι τιμές της εντροπίας μεταβάλλονταν για τις περιοχές εκτός των τετραγώνων σε κάθε μέτρηση, κάτι το οποίο δεν ίσχυε για την flux state και την chiral state.

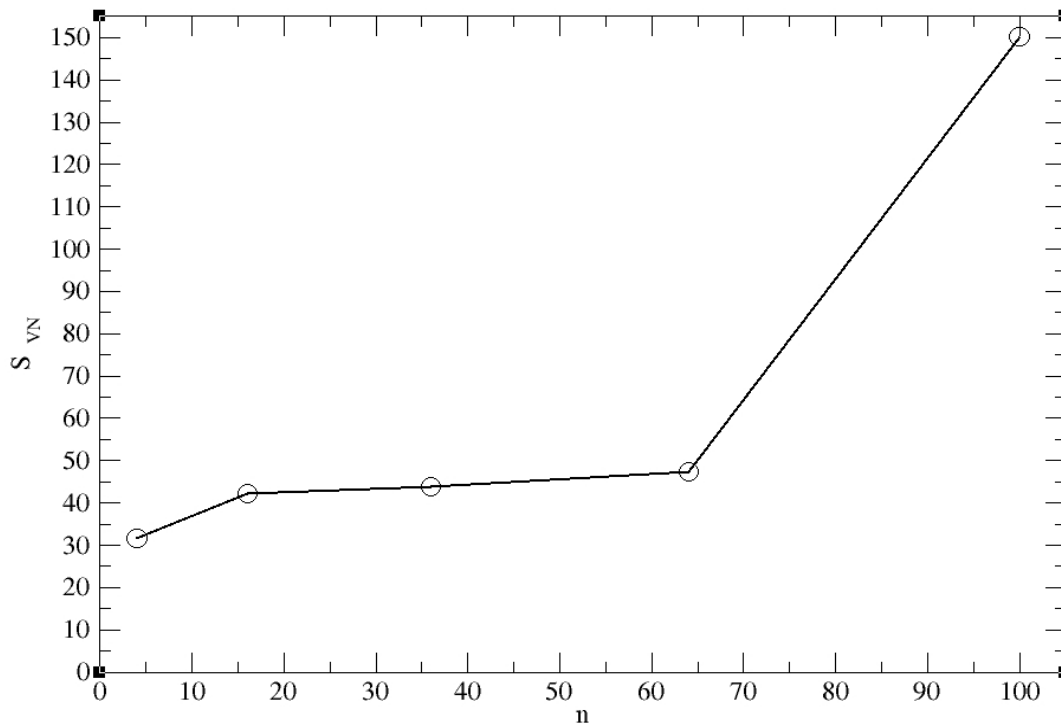


Σχήμα 9.28: Οι τιμές της εντροπίας von Neumann για όλη την περιοχή εκτός του τετραγώνου για το οποίο γίνεται η μέτρηση (περιοχή B).

Οι επόμενες μετρήσεις έγιναν ξεκινώντας από το εσωτερικό του πλέγματος επιλέγοντας το μικρότερο τετράγωνο, με κατεύθυνση προς τα έξω αυξάνοντας συμμετρικά τον αριθμό των θέσεων.

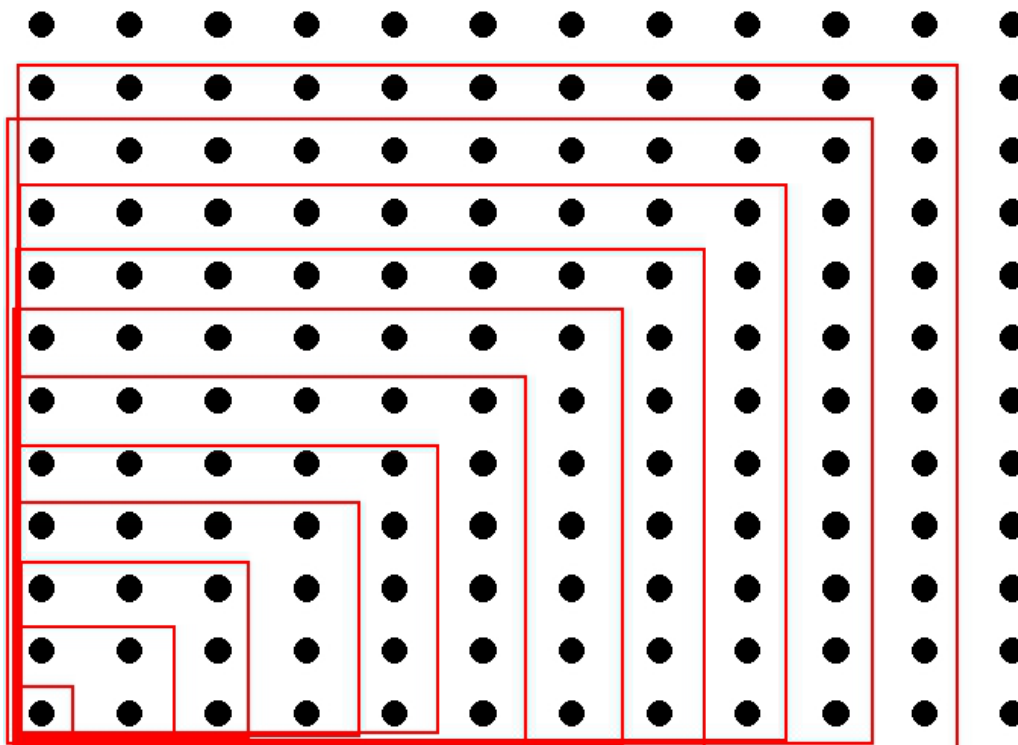


Σχήμα 9.29: Οι περιοχές στις οποίες έγιναν οι μετρήσεις.

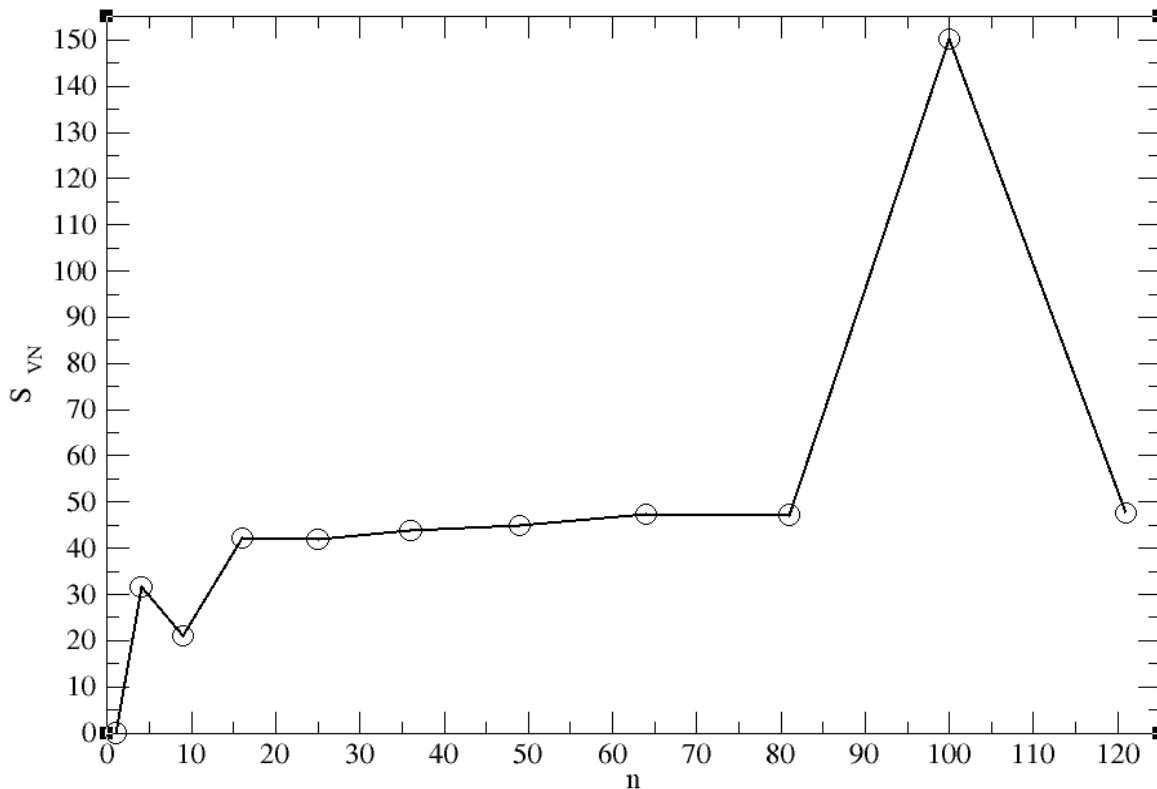


Σχήμα 9.30: Οι τιμές της εντροπίας von Neumann σε συνάρτηση με τον αριθμό των σωματιδίων. Αρχικά η εντροπία βαίνει αύξουσα ομαλά, αλλά για $n=100$, η τιμή της γίνεται πολύ μεγάλη σε σχέση με αυτή των προηγούμενων περιοχών.

Οι τελευταίες μετρήσεις που έγιναν για την τροποποιημένη περίπτωση της κατάστασης ροής ήταν με την σταδιακή αύξηση των θέσεων στην περιοχή ξεκινώντας από την κάτω αριστερή γωνία, όπως βλέπουμε στο ακόλουθο σχήμα



Σχήμα 9.31: Οι περιοχές στις οποίες έγιναν οι μετρήσεις για την εντροπία von Neumann.



Σχήμα 9.32: Και σε αυτή την περίπτωση η διακύμανση της εντροπίας δεν είναι ομαλή. Εκεί που φαίνεται πως θα προχωρήσει αύξουσα, για $n=9$, η τιμή της πέφτει. Μέχρι να φτάσουμε τις $n=81$ θέσεις, η αύξησή της δεν είναι σημαντική, ενώ για $n=100$ αυξάνεται απότομα, προκειμένου να ξαναπέσει για $n=121$.

9.4 Συμπεράσματα

Όπως ήταν αναμενόμενο, στην κατάσταση ροής και στην χειρόμορφη κατάσταση, η εντροπία αυξάνεται -όχι απαραίτητα γραμμικά- με την αύξηση του αριθμού των θέσεων, ανεξάρτητα από την σχετική θέση των κατανομών στο πλέγμα. Αυτό δεν ισχύει για την τροποποιημένη εκδοχή της κατάστασης ροής, αφού ανεξάρτητα από τον αριθμό των θέσεων, η εντροπία φαίνεται να κυμαίνεται γύρω από μία τιμή, με κάποιες εξαιρέσεις στις οποίες κυριολεκτικά εκτινάσσεται. Αυτό που προκαλεί πάλι εντύπωση είναι ότι μετά την απότομη αύξηση, στις περισσότερες φορές πέφτει πάλι με την αύξηση του αριθμού των θέσεων.

Παράρτημα Α:

Ο κώδικας του προγράμματος για τον υπολογισμό της εντροπίας von Neumann

```
#!/usr/bin/python

from math import *
from numpy import *
from numpy.linalg import *
from scipy.linalg.matfuncs import *
import string
import csv

def normalize(gxx):
    zxx=1.0/sqrt(dot(gxx, conj(gxx)))
    cxx=multiply(zxx,gxx)
    return cxx

def number_convert(n):
    l = string.atof(n)
    return l

def dm(eig_state):
    np=size(eig_state)

    density_matrix=[]

    for i in xrange(np):
        density_matrix.append([])
        for j in xrange(np):
            density_matrix[i].append(i+j)

    for i in range(np):
        for j in range(np):
            density_matrix[i][j]=0.0

    for i in range(np):
        crval=conj(eig_state[i])
        for j in range(np):
            density_matrix[i][j]=crval*eig_state[j]

    return density_matrix

#####
#file=open('eig_state.dat', 'r')
#numbers=file.read()
#numbers = string.split(numbers)
#numeric_numbers = []
#
#for x in numbers:
#    y = number_convert(x)          ##### VALID ONLY FOR REAL NUMBERS
#    numeric_numbers.append(y)     ##### USELESS IN OUR CASE SINCE
#                                ##### WE NEED COMPLEX NUMBERS
#soe=size(numeric_numbers)
#####
```



```

qxx=csv.reader(open('eig_state.dat', 'rb'))
oxx=list(qxx)
soe=size(oxx)

psi=[]
for i in xrange(soe):
    psi.append(soe)

psi_h=[]
for i in xrange(soe):
    psi_h.append(soe)

for r in range(soe):
    psi_h[r]=map(complex, oxx[r])

for m in range(soe):
    wxx=psi_h[m][0]
    psi[m]=wxx

#psi=numeric_numbers
psi=normalize(psi)
nop=size(psi)
psi_bk=psi
kb=8.6173324e-5

density_matrix=dm(psi)

print "Define Geometry Nx, Ny, Nz"

Nx=input()
Ny=input()
Nz=input()

print "Define Area A"

nx=input()
ny=input()
nz=input()

r_nx=nx[1]-nx[0]
r_ny=ny[1]-ny[0]
r_nz=nz[1]-nz[0]

k_cnt=0

for iz in range(r_nz+1):
    for iy in range(r_ny+1):
        for ix in range(r_nx+1):
            k_cnt=k_cnt+1

i_ndx=range(k_cnt)
u_ndx=0

for iz in range(r_nz+1):
    for iy in range(r_ny+1):
        for ix in range(r_nx+1):
            i_ndx[u_ndx]=(ix+1)+(Nx*(iy))+(Nx*Ny*(iz))-1
            u_ndx=u_ndx+1

```

```

dm_1=dm(psi)
dm_2=dm(psi)

tr_a=0.0
tr_b=0.0

for l in range(size(i_ndx)):
    for i in range(nop):
        for j in range(nop):
            if (i==i_ndx[l]):
                if(i==j):
                    tr_a=tr_a+dm_1[i][j]

ee=1

for i in range(nop):
    for j in range(nop):

        if (i==j):
            for lkk in range(size(i_ndx)):
                if(i==i_ndx[lkk]):
                    ee=1

            if(ee==0):
                tr_b=tr_b+dm_1[i][j]
    ee=0

for l in range(size(i_ndx)):
    for i in range(nop):
        for j in range(nop):
            if (i==i_ndx[l]):
                dm_2[i][j]=0
            if (j==i_ndx[l]):
                dm_2[i][j]=0

p_B=[]
for i in xrange(nop-size(i_ndx)):
    p_B.append([])
    for j in xrange(nop-size(i_ndx)):
        p_B[i].append(i+j)

p_A=[]
for i in xrange(size(i_ndx)):
    p_A.append([])
    for j in xrange(size(i_ndx)):
        p_A[i].append(i+j)

h_matrix_b=[]

for i in xrange((nop-size(i_ndx))*(nop-size(i_ndx))):
    h_matrix_b.append(i)

h_matrix_a=[]

for i in xrange((size(i_ndx))*(size(i_ndx))):
    h_matrix_a.append(i)

eax = 0
ebx = 0

```

```

ecx = 0

for i in range(nop):
    for j in range(nop):
        eax = 0
        ebx = 0

        for k in range(size(i_ndx)):

            if(i==i_ndx[k]):
                eax=1

            if(j==i_ndx[k]):
                ebx=1

            if (eax==1 and ebx==1):
                h_matrix_a[ecx] = dm_1[i][j]
                ecx = ecx+1

uxx = 0
vxx = 0

fxx=0

for i in range(nop):
    for j in range(nop):
        uxx=1
        vxx=1

        for k in range(size(i_ndx)):

            if(i==i_ndx[k]):
                uxx=0

            if(j==i_ndx[k]):
                vxx=0

            if (uxx==1 and vxx==1):
                h_matrix_b[fxx]=dm_1[i][j]
                fxx=fxx+1

k_hn=0

for i in range(nop-size(i_ndx)):
    for j in range(nop-size(i_ndx)):
        p_B[i][j] = h_matrix_b[k_hn]
        k_hn=k_hn+1

k_jn=0

for i in range(size(i_ndx)):
    for j in range(size(i_ndx)):
        p_A[i][j] = h_matrix_a[k_jn]
        k_jn=k_jn+1

#print trace(p_A," ",trace(p_B))

p_B=multiply(p_B, 1.0/(1.0-tr_a))
p_A=multiply(p_A, 1.0/(1.0-tr_b))

```

```
print "Von Neumann Entropy of Area A"
s_a = -trace(multiply(p_A, logm(p_A)))
print abs(s_a)

print

print "Von Neumann Entropy of Area B"
s_b = -trace(multiply(p_B, logm(p_B)))
print abs(s_b)
```

Βιβλιογραφία

- [1], D. D. Bhaktavatsala Rao, V. Ravishankar "A redefinition of concurrence and its generalisation to bosonic subsystems of N qubit systems" (2003)
- [2], I. Bengtsson, K. Zyczkowski "Geometry of Quantum States, An Introduction to Quantum Entanglement" (Cambridge University Press, 2006)
- [3], M. Nielsen, I. Chuang "Quantum Computation and Quantum Information" (Cambridge University Press, 2010)
- [4] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, V. Vedral "Entanglement in Many-Body Systems" (Rev. Mod. Phys. 80, 517–576 (2008))
- [5] A. Buchleitner, C. Viviescas, M. Tiersch "Entanglement and Decoherence" (Springer, 2009)
- [6] A. Bokulich, G. Jaeger "Quantum Information and Entanglement" (Cambridge University Press, 2010)
- [7] H. F. Song, S. Rachel, C. Flindt, I. Klich, N. Laflorencie, K. Le Hur "Bipartite Fluctuations as a Probe of Many-Body Entanglement" (Phys. Rev. B 85, 035409 (2012))
- [8], R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, K. Horodecki "Quantum Entanglement" (Reviews of Modern Physics, 81, 867 (2009))
- [9] Σ. Τραχανάς "Κβαντομηχανική II" (Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2008)
- [10] J. Eisert, M. Cramer, M. Plenio "Area laws for the entanglement entropy" (Rev. Mod. Phys. 82, 277–306 (2010))
- [11] M. Haque, O. S. Zozulya, K. Schoutens "Entanglement between particle partitions in itinerant many-particle states" (J. Phys. A: Math. Theor. 42 (2009) 504012)
- [12] G. Jaeger "ENTANGLEMENT, INFORMATION, AND THE INTERPRETATION OF QUANTUM MECHANICS" (Springer, 2009)
- [13] S. Hill, W. K. Wothers "Entanglement of a Pair of Quantum Bits" (Phys. Rev. Lett. 78, 5022–5025 (1997))
- [14] J. Dubail, N. Read "Entanglement spectra of complex paired superfluids" (Phys. Rev. Lett. 107, 157001 (2011))
- [15] W. K. Wothers "Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits" (Phys. Rev. Lett. 80, 2245–2248 (1998))
- [16] I. Peschel "Calculation of reduced density matrices from correlation functions" (2003 J. Phys. A: Math. Gen. 36 L205)
- [17] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha, L. M. K. Vandersypen "Spins in few-electron quantum dots" (Rev. Mod. Phys. 79, 1455–1455 (2007))

[18] M. Westmoreland, B. Schumacher "Quantum Processes, Systems and Information" (Cambridge University Press, 2010)

[19] J. F. Annet "Superconductivity, Superfluids and Condensates" (Oxford University Press, 2004)

[20] M.A. Martin-Delgado "Entanglement and Concurrence in the BCS State" (2002)

[21] J. Audretsch "Entangled Systems, New Directions in Quantum Physics" (Wiley, 2007)

Σε αυτό το σημείο οφείλω να επισημάνω ότι το μεγαλύτερο μέρος της θεωρίας βασίστηκε στις αναφορές [4], [7], [10], [11], [13], [16], [20], [21]. Οποιοδήποτε σχήμα ή διάγραμμα που παρατίθεται στα κεφάλαια 2, 4, 5, 6, 7, 8, δεν είναι δικό μου και βρίσκεται σε κάποια εκ των προαναφερθέντων αναφορών.

