

Multipartite und gebundene Verschränkung in Spinmodellen

Diplomarbeit
in der Studienrichtung Physik
zur Erlangung des akademischen Grades
Magister der Naturwissenschaften

eingereicht an der
Fakultät für Mathematik, Informatik und Physik
der **Universität Innsbruck**

von
Christian Knapp

Univ.-Prof. Dr. Hans Jürgen Briegel
Institut für Theoretische Physik

Innsbruck, 29. Februar 2008

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
Teil 1. Verschränkung und Separabilitätskriterien	3
Kapitel 1. Bipartite Verschränkung	4
1.1. Reine Zustände	4
1.2. Zustandsgemische	5
Kapitel 2. Separabilitätskriterien	7
2.1. Reine Zustände	7
2.2. Gemischte Zustände	8
Kapitel 3. Multipartite Verschränkung	19
3.1. Klassifizierung tripartiter Systeme der Dimension $2 \times 2 \times 2$	19
3.2. Separabilitätskriterien	20
Kapitel 4. Gebundene Verschränkung und Verschränkungsreinigung	27
4.1. Verschränkungsreinigung	27
4.2. Destillierbarkeit und partielle Transposition	28
Kapitel 5. Verschränkungsmaße	30
5.1. Reine Zustände	30
5.2. Gemischte Zustände	31
Teil 2. Untersuchung von Spinsystemen	33
Kapitel 6. Eigenschaften der untersuchten Spinsysteme	34
6.1. Wechselwirkungen	34
6.2. Thermisches Gleichgewicht	36
Kapitel 7. Spincluster	38
7.1. 3-Spin- $\frac{1}{2}$ -Cluster	38
7.2. 4-Spin- $\frac{1}{2}$ -Cluster	49
Kapitel 8. Untersuchung gebunden verschränkter Zustände	63
8.1. Spinketten	63
8.2. Horodecki-Zustände	65

8.3. Zusammenfassung	68
Kapitel 9. Dreiteilchenverschränkung im XY-Modell	69
9.1. Lösung des XY-Modells	69
9.2. Konstruktion geeigneter Zeugen	71
9.3. Ergebnisse	72
9.4. Zusammenfassung	74
Kapitel 10. Zusammenfassung der Resultate	75
Anhang A. Singulärwert-Zerlegung	77
Anhang. Literaturverzeichnis	78
Anhang. Danksagung	80

Einleitung

Obwohl die Anfänge der Quantentheorie bis zum Ende des 19. Jahrhunderts zurückreichen [1], blieben viele der von ihr aufgeworfenen Fragestellungen bis weit ins 20. Jahrhundert hinein unbeantwortet. Die Interpretation dieser Theorie bereitete wegen der aus ihr folgenden Konsequenzen erhebliche Schwierigkeiten. Eine kontroverse Publikation zu diesem Thema wurde 1935 von Einstein, Podolsky und Rosen [2] veröffentlicht und beschreibt ein Gedankenexperiment, mit welchem das Unvermögen der Quantenmechanik die physikalische Realität vollständig beschreiben zu können nachgewiesen werden sollte. Der später nach diesen Physikern benannten EPR-Effekt, der bisweilen auch als EPR-Paradoxon bekannt ist, brachte die nicht lokal-realistische Charakteristik der Quantenmechanik zum Ausdruck. Die Reaktionen darauf waren weitreichend, Kritik kam vor allem von Niels Bohr [3]. Von Einstein selbst wurde eine vermeintlich notwendige Erweiterung der Quantenmechanik mittels lokaler verborgener Variablen (LHV) propagiert. Noch Jahrzehnte später beschäftigten sich Physiker mit der Klärung der aufgeworfenen Fragen, z.B. mittels der Neuformulierung des Gedankenexperiments in einer prinzipiell durchführbaren Form durch Bohm [4, 5]. Erst die Bell'schen Ungleichungen [6] von 1964, welche eine Reihe von überprüfbar und notwendigen Bedingungen für alle lokalen deterministischen Theorien fordern, konnte die Unvereinbarkeit der Quantenmechanik mit ebendiesen Forderungen nachweisen. Damit, und mit dem ersten überzeugenden experimentellen Nachweis der Verletzung der Ungleichungen 1982 durch Alain Aspect [7, 8], wurde das Bestreben, die Quantenmechanik mittels LHV zu einer lokal-realistischen Theorie erweitern zu wollen, ad absurdum geführt und die Quantenmechanik als solche weitgehend bestätigt.

Eng verbunden mit dieser Diskussion ist der Begriff der Verschränkung, welcher 1935 nur kurz nach der Veröffentlichung des Gedankenexperiments von Einstein, Podolsky und Rosen durch Erwin Schrödinger eingeführt wurde [9]. In „Die gegenwärtige Situation der Quantenmechanik“ verwendet Schrödinger diesen Begriff als Bezeichnung für diejenige Korrelation zwischen Teilchen, welche sich nicht im Rahmen der klassischen Physik beschreiben lässt. Heute wird Verschränkung vor allem als Ressource für viele aber nicht notwendigerweise alle Anwendungen der Quanteninformationstheorie, wie z.B. Quantenteleportation oder schnelle Algorithmen (Shor-Algorithmus), wahrgenommen. Unabhängig davon sind jedoch bei weitem noch nicht alle Fragen um diesen Begriff geklärt. Die in den genannten Anwendungen benötigten reinen verschränkten Zustände können zwar eindeutig als solche identifiziert

werden, betrachtet man jedoch die in der physikalischen Realisierung aufgrund der unvermeidbaren Interaktion der zu untersuchenden System mit der Umwelt tatsächlich vorkommenden Zustandsgemische, so ist eine eindeutige Unterscheidung zwischen verschränkten und nicht verschränkten Zuständen nicht mehr ohne weiteres möglich.

Das Ziel dieser Diplomarbeit ist die Untersuchung der Verschränkungseigenschaften einfacher Spinmodelle, für welche auch entsprechende Beispiele in der Natur gefunden werden können. Dabei werden nicht nur die Grundzustände dieser Systeme betrachtet, sondern auch die thermischen Gleichgewichtszustände, wobei spezielle Formen der Verschränkung (gebundene Verschränkung), deren Existenz bereits in eigens konstruierten Zuständen bewiesen wurde, auch in diesen gewissermaßen natürlichen Systemen nachgewiesen werden sollen.

Im ersten Teil der Diplomarbeit werden zunächst die Begriffe Verschränkung und Separabilität näher erläutert und anschließend verschiedene bereits bekannte operative Separabilitätskriterien vorgestellt. Operativ bedeutet in diesem Fall, dass ein in Form einer Dichtematrix gegebener Zustand mittels eines Algorithmus auf Verschränkung hin überprüft werden kann. Desweiteren wird die Möglichkeit verschränkte Zustände zu destillieren kurz angeschnitten und auf die Zusammenhänge mit der bereits erwähnten gebunden Verschränkung hingewiesen. Zum Schluss gehe ich noch auf die laufenden Bemühungen ein, ein Maß zu definieren, mit welchem sich der Grad der Verschränkung eines Zustands quantifizieren lässt.

Der zweite Teil der Arbeit beschäftigt sich mit den eigentlichen Ergebnissen. Zuerst werden die untersuchten Systeme (Drei- und Vier-Qubit-Systeme mit Heisenbergwechselwirkung) beschrieben und anschließend im Detail untersucht, indem die im ersten Teil erläuterten Separabilitätskriterien angewandt werden. Dabei lässt sich die Existenz gebundener - und im Fall des einfacheren Dreiqubitmodells gleichzeitig auch multipartiter - Verschränkung beweisen. In einem eigenen Kapitel gehe ich noch einmal speziell auf diese gebundene Verschränkung ein, wobei ich diese bei größeren Systemen bestehend aus bis zu neun Qubits nachweisen kann und einen Ausblick auf noch größere Systeme zu geben versuche. Abschließend erläutere ich noch kurz einen möglichen Nachweis multipartiter Verschränkung in Spinketten mit XY-Wechselwirkung.

Teil 1

Verschränkung und
Separabilitätskriterien

Bipartite Verschränkung

Im ersten Kapitel wollen wir zunächst einige grundlegende Definitionen erläutern. Dabei beschränken wir uns zunächst auf bipartite Systeme, d.h. wir betrachten einen Gesamthilbertraum \mathcal{H} , der sich aus zwei Subsystemen \mathcal{H}_A und \mathcal{H}_B zusammensetzt:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B, \quad (1.0.1)$$

mit den Dimensionen $d_A = \dim(\mathcal{H}_A)$, $d_B = \dim(\mathcal{H}_B)$ und $d = \dim(\mathcal{H}) = d_A d_B$. Im üblichen Sprachgebrauch werden die Experimentatoren, welche die Kontrolle über jeweils eines der Subsysteme ausüben, Alice und Bob genannt, dementsprechend spricht man auch von Alices bzw. Bobs Subsystem.

Der Begriff Verschränkung lässt sich nun sowohl für die reinen Zustände dieses Gesamthilbertraums als auch für Zustandsgemische definieren.

1.1. Reine Zustände

DEFINITION 1.1.1. Ein reiner Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ist genau dann separabel, wenn es sich bei diesem um ein Tensorprodukt von Zuständen der beiden Subsysteme handelt:

$$|\psi\rangle = |\phi^a\rangle \otimes |\phi^b\rangle, \quad (1.1.1)$$

mit $|\phi^a\rangle \in \mathcal{H}_A$ und $|\phi^b\rangle \in \mathcal{H}_B$.

Wenn der Zustand nicht separabel ist, so wird er verschränkt genannt.

Als einfachstes Beispiel dient ein System, welches sich aus zwei Zweiniveausystemen, Qubits genannt, zusammensetzt. $|\psi\rangle = |0\rangle_A \otimes |0\rangle_B = |00\rangle$ ist beispielsweise ein separabler Zustand. Die sogenannten Bellzustände sind hingegen verschränkt:

$$|\phi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm |11\rangle), \quad (1.1.2)$$

$$|\psi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle). \quad (1.1.3)$$

1.2. Zustandsgemische

Für gemischte Zustände wird Verschränkung folgendermaßen definiert:

DEFINITION 1.2.1. Ein gemischter Zustand ρ ist genau dann separabel, wenn er sich als konvexe Kombination von reinen Produktzuständen schreiben lässt:

$$\rho = \sum_i p_i |a_i\rangle\langle a_i| \otimes |b_i\rangle\langle b_i|, \quad (1.2.1)$$

mit reellen Koeffizienten $p_i \geq 0$, $\sum_i p_i = 1$ und $|a_i\rangle \in \mathcal{H}_A$ bzw. $|b_i\rangle \in \mathcal{H}_B$.

Physikalisch bedeutet dies, dass Alice und Bob den gemischten Zustand ρ ausschließlich mittels lokaler Operationen auf jeweils ihr eigenes Subsystem und klassischer Kommunikation untereinander (LOCC) präparieren können, denn Alice und Bob können die Zustände $|a_i\rangle$ bzw. $|b_i\rangle$ jeweils lokal erzeugen und sich anschließend mittels klassischer Kommunikation über das gewünschte Mischungsverhältnis, also die Koeffizienten p_i , absprechen. Diese Zerlegung ist natürlich nicht eindeutig, weshalb es im Allgemeinen keineswegs trivial ist für einen gegebenen Zustand ρ zu zeigen, ob eine solche existiert oder nicht, also zu entscheiden ob ρ nun separabel oder verschränkt ist. Das nächste Kapitel befasst sich ausführlich mit verschiedenen Separabilitätskriterien.

Der vollständig gemischte Zustand $\frac{1}{d}\mathbb{1}_d = \frac{1}{d_A}\mathbb{1}_{d_A}^A \otimes \frac{1}{d_B}\mathbb{1}_{d_B}^B$ ist separabel und enthält somit keine quantenmechanischen Korrelationen, jedoch auch keinerlei klassische Korrelationen, da er sich als Tensorprodukt von gemischten Zuständen der einzelnen Subsysteme schreiben lässt. Ein separabler, aber dennoch klassisch korrelierter Zustand in unserem 2-Qubit-Hilbertraum ist beispielsweise

$$\rho = \frac{1}{2}(|00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|) = \frac{1}{2}|0\rangle_A\langle 0| \otimes |0\rangle_B\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle_A\langle 1| \otimes |1\rangle_B\langle 1|. \quad (1.2.2)$$

Als bekanntes Beispiel für gemischte verschränkte Zustände seien die aufgrund ihrer Symmetrieeigenschaften interessanten Werner Zustände [10] genannt:

DEFINITION 1.2.2. Die Wernerzustände eines Hilbertraums $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ mit $d = \dim(\mathcal{H}_A) = \dim(\mathcal{H}_B)$ sind gegeben durch

$$\rho_W(p) = p \frac{2}{d^2 - d} P^A + (1 - p) \frac{2}{d^2 + d} P^S, \quad (1.2.3)$$

mit $0 \leq p \leq 1$. P^S und P^A bezeichnen hier die Projektionsoperatoren auf den symmetrischen bzw. antisymmetrischen Unterraum von \mathcal{H} :

$$P^S = \frac{\mathbb{1}_{2d} + V}{2}; \quad P^A = \frac{\mathbb{1}_{2d} - V}{2}, \quad (1.2.4)$$

mit dem Vertauschungsoperator $V|\phi^1\rangle_A \otimes |\phi^2\rangle_B = |\phi^2\rangle_A \otimes |\phi^1\rangle_B$.

Die Wernerzustände sind invariant unter beliebigen auf beiden Subsystemen gleichzeitig angewandten unitären Operationen U :

$$\rho_W = U \otimes U \rho_W U^\dagger \otimes U^\dagger. \quad (1.2.5)$$

Wir werden uns die speziellen Eigenschaften der tripartiten Zustände, welche einer derartigen Symmetrie unterliegen, im zweiten Teil dieser Diplomarbeit noch zu nutze machen.

Bemerkung: Werner bewies in [10] bereits 1989, also einige Jahre bevor die ersten operativen Verschränkungskriterien für gemischte Zustände vorgeschlagen wurden, dass alle Wernerzustände im Intervall $\frac{1}{2} < p \leq 1$ Verschränkung aufweisen, die übrigen Zustände aber separabel sind. Darüber hinaus konnte er für die Zustände mit $p = 1 - \frac{d+1}{2d^2}$ ein lokal realistisches Modell mit verborgenen Variablen konstruieren, wobei $p \geq \frac{1}{2}$ für alle (sinnvollen) d gilt. Es existieren somit verschränkte Zustände, welche sich in einem lokal realistischen Modell beschreiben lassen. Die Existenz eines solchen Modells ist demnach nur eine notwendige, aber keine hinreichende Bedingung für die Separabilität eines Zustandes.

Im Fall $d = 2$ lassen sich die Wernerzustände als Mischung des Bellzustandes $|\psi^-\rangle$ mit der Identität darstellen, da es sich bei $|\psi^-\rangle\langle\psi^-|$ selbst um den Projektor auf den asymmetrischen Unterraum handelt:

$$\rho_W = (1 - \tilde{p}) \frac{\mathbb{1}}{4} + \tilde{p} |\psi^-\rangle\langle\psi^-|. \quad (1.2.6)$$

Diese sind im Bereich $\frac{1}{3} < \tilde{p} \leq 1$ verschränkt. Das erwähnte lokal realistische Modell ist für $\tilde{p} \leq \frac{1}{2}$ definiert.

Der Verschränkung bzw. Separabilität eines Zustands kommt auch eine geometrische Bedeutung zu. Die Menge aller separablen Zustände eines zusammengesetzten Hilbertraums \mathcal{H} bildet eine konvexe Untermenge in der ebenfalls konvexen Menge aller Zustände von \mathcal{H} . Schematische Darstellungen der konvexen Teilmengen des Zustandsraums werden in den folgenden Kapiteln des öfteren vorzufinden sein, zum Beispiel die Abbildung 2.2.1 auf Seite 11. In [11] wird eine gute Übersicht über die Struktur und die Eigenschaften des Zustandsraums gegeben.

Separabilitätskriterien

Ist es bei einigen speziell gewählten Zustände offensichtlich oder zumindest leicht zu zeigen, ob diese separabel oder verschränkt sind, so ist es ungleich schwieriger dies für einen beliebigen Zustand zu entscheiden. Es wurden im Laufe der letzten Jahre verschiedene Separabilitätskriterien gefunden, mit welchen sich verschränkte Zustände als solche erkennen lassen. Die wichtigsten werden in diesem Kapitel vorgestellt.

2.1. Reine Zustände

Bei reinen Zustände ist eine eindeutige Unterscheidung zwischen separablen und verschränkten Zuständen mittels Anwendung der Schmidt-Zerlegung möglich.

THEOREM 2.1.1. *Schmidt-Zerlegung*

Seien \mathcal{H}_A und \mathcal{H}_B zwei Hilberträume jeweils mit Dimension $d_A = \dim(\mathcal{H}_A)$ bzw. $d_B = \dim(\mathcal{H}_B)$. Für jedes $|\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ existiert eine Zerlegung der Form:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^d a_i |e_i\rangle_A \otimes |f_i\rangle_B, \quad (2.1.1)$$

mit positiven reellen Schmidt-Koeffizienten a_i , mit $\sum_i a_i^2 = 1$, orthonormalen Zuständen $|e_i\rangle$ ($|f_i\rangle$) in \mathcal{H}_A (\mathcal{H}_B) und $d = \min[d_A, d_B]$.

BEWEIS. Für den (konstruktiven) Beweis benötigen wir die Singulärwertzerlegung, welche im Anhang näher erläutert wird.

Sei nun oBdA $d_a \leq d_b$. Der Zustandsvektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ kann in einer beliebigen orthonormalen Basis (ONB) gegeben sein:

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{d_A} \sum_{l=1}^{d_B} A_{kl} |k\rangle_A \otimes |l\rangle_B. \quad (2.1.2)$$

Nach Anwendung der Singulärwertzerlegung auf die Matrix A bestehend aus den Koeffizienten A_{kl} , also $A = UaV^*$, ergibt sich daraus

$$|\psi\rangle = \sum_{k,i=1}^{d_A} \sum_{l,j=1}^{d_B} U_{ki} a_i \delta_{ij} V_{lj}^* |k\rangle_A \otimes |l\rangle_B. \quad (2.1.3)$$

Weiters erhalten wir mit den Basistransformationen $|e_i\rangle_A = \sum_k U_{ki}|k\rangle_A$ und $|f_j\rangle_B = \sum_l V_{lj}^*|l\rangle_B$, wobei aus der Unitarität von U und V die Orthonormalität von $|e_i\rangle$ und $|f_j\rangle$ folgt, schlussendlich die Schmidt-Zerlegung:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{d_A} \sum_{j=1}^{d_B} a_i \delta_{ij} |e_i\rangle_A \otimes |f_j\rangle_B = \sum_{i=1}^{\min[d_A, d_B]} a_i |e_i\rangle_A \otimes |f_i\rangle_B. \quad (2.1.4)$$

□

DEFINITION 2.1.2. Die Anzahl aller Schmidt-Koeffizienten a_i ungleich Null wird Schmidt-Rang r genannt, mit $1 \leq r \leq d$.

Aus der Definition der Schmidt-Zerlegung und des Schmidt-Rangs ergibt sich unmittelbar folgendes Separabilitätskriterium:

THEOREM 2.1.3. *Ein Zustand $|\psi\rangle$ ist genau dann separabel, wenn der Schmidt-Rang gleich eins ist.*

Die Quadrate der Schmidt-Koeffizienten a_i^2 sind zugleich die Eigenwerte der auf eines der Subsysteme reduzierten Dichteoperatoren ρ_A und ρ_B . Damit entspricht der Schmidt-Rang r dem Rang der reduzierten Dichtematrizen und lässt sich demnach leicht berechnen.

2.2. Gemischte Zustände

Ungleich schwieriger ist es, Verschränkung bzw. Separabilität von gemischten Zuständen zu erkennen, da zu zeigen ist, ob sich ein Zustand durch eine unbekannte konvexe Kombination von reinen Produktzuständen darstellen lässt oder nicht. Dennoch wurden auch für diesen Fall einige operative sowie nicht operative Kriterien gefunden, mit welchen eine Unterscheidung möglich ist. Unter einem nicht operativen Kriterium verstehen wir hierbei ein solches, welches zwar eine Bedingung für die Separabilität eines Zustandes aufstellt, diese Bedingung aber nicht mittels eines vorgegebenen Algorithmus' überprüfbar ist. Daher werden wir uns im Wesentlichen auf die bekannten operativen Kriterien beschränken. Aus diesen ergibt sich in den meisten Fällen aber nur eine notwendige, jedoch nicht hinreichende Bedingung für Separabilität.

2.2.1. Peres-Horodecki-Kriterium. Eines der ältesten operativen Separabilitätskriterien stellt das Peres-Horodecki-Kriterium dar. Trotz seiner Einfachheit zählt es, wie im zweiten Teil zu sehen sein wird, zu den stärksten Kriterien. Hierbei muss lediglich die partiell Transponierte der Dichtematrix

bezüglich eines Subsystems gebildet und anschließend deren Spektrum berechnet werden.

DEFINITION 2.2.1. Gegeben sei eine Zustand ρ im Gesamthilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ in einer beliebigen orthonormalen Produktbasis:

$$\rho = \sum_{i,j}^{d_a} \sum_{k,l}^{d_b} \langle i, k | \rho | j, l \rangle |i\rangle_A \langle j| \otimes |k\rangle_B \langle l|. \quad (2.2.1)$$

Unter einer partiellen Transposition T_A bezüglich des ersten Subsystems in \mathcal{H}_A versteht man nun

$$\begin{aligned} \rho^{T_A} &= \sum_{i,j}^{d_a} \sum_{k,l}^{d_b} \langle i, k | \rho | j, l \rangle (|i\rangle_A \langle j|)^T \otimes |k\rangle_B \langle l| \\ &= \sum_{i,j}^{d_a} \sum_{k,l}^{d_b} \langle i, k | \rho | j, l \rangle |j^*\rangle_A \langle i^*| \otimes |k\rangle_B \langle l|, \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

mit der komplexen Konjugation $*$. Die partielle Transposition bezüglich des zweiten Subsystem wird analog definiert.

Zwar ist ρ^{T_A} abhängig von der Wahl der Produktbasis, aber dessen Spektrum bleibt wie bei der Transposition des gesamten Systems invariant unter einer Basistransformation. Dies erlaubt folgende Klassifizierung:

Ein Zustand wird ‘‘PPT’’ - positive partial transpose - genannt, falls ρ^{T_A} positiv ist, d.h. keine negativen Eigenwerte besitzt. Da die Transposition über den Gesamthilbertraum angewandt auf einen positiven Operator ρ selbst einen positiven Operator ρ^T ergibt und außerdem $(\rho^{T_A})^{T_B} = \rho^T$ gilt, folgt aus der Positivität von ρ^{T_A} die Positivität von ρ^{T_B} und umgekehrt.

Besitzt die partielle Transposition eines Zustandes hingegen auch negative Eigenwerte, wird dieser ‘‘NPT’’ genannt.

Das von Asher Peres in [12] aufgestellte Kriterium lautet nun wie folgt:

THEOREM 2.2.2. *Jeder separable Zustand ist auch PPT.*

BEWEIS. Angenommen ρ sei separabel, dann existiert eine Zerlegung der Form

$$\rho = \sum_i p_i |a_i\rangle \langle a_i| \otimes |b_i\rangle \langle b_i|, \quad (2.2.3)$$

mit der partiell Transponierten

$$\rho^{T_A} = \sum_i p_i (|a_i\rangle \langle a_i|)^T \otimes |b_i\rangle \langle b_i|. \quad (2.2.4)$$

Da $(|a_i\rangle\langle a_i|)^T = |a_i^*\rangle\langle a_i^*|$ selbst wieder einen Dichteoperator in \mathcal{H}_A darstellt, ist somit auch ρ^{TA} als Ganzes ein Dichteoperator und hat deshalb auch ausschließlich positive Eigenwerte. \square

M., P. und R. Horodecki erweiterten dieses Kriterium um folgenden Satz [13]:

THEOREM 2.2.3. *Für Systeme der Dimension 2×2 und 2×3 gilt auch die Umkehrung, d.h. jeder PPT-Zustand ist separabel.*

Somit existiert für solche Systeme ein einfaches, operatives, sowohl notwendiges als auch hinreichendes Separabilitätskriterium. In höheren Dimensionen gilt diese Umkehrung jedoch nicht mehr, vielmehr existieren auch verschränkte Zustände, welche trotz positiver partieller Transposition verschränkt sind. Eine einfache schematische Darstellung ist in 2.2.1 gegeben. Die ersten bekannten Beispiele solcher PPT-verschränkter Zustände [14] sind in explizit in Kapitel 8 angeführt. Derartige Zustände weisen eine besondere Eigenschaft auf, die gebundene Verschränkung genannt wird [15], wobei an dieser Stelle auf Kapitel 4 verwiesen sei.

2.2.2. PPT-symmetrische Erweiterung. Andrew C. Doherty, Pablo A. Parrilo und Federico M. Spedalieri führten in [16, 17] eine ganze Familie von neuen Separabilitätskriterien auf der Basis von PPT-symmetrischen Erweiterungen eines bipartiten Zustands um eine oder mehrere Kopien eines der beiden Subsysteme ein.

DEFINITION 2.2.4. Gegeben sei ein separabler Zustand ρ :

$$\rho = \sum_i p_i |a_i\rangle\langle a_i| \otimes |b_i\rangle\langle b_i| \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B. \quad (2.2.5)$$

Das System wird nun durch Hinzufügen einer Kopie eines der beiden Subsysteme erweitert:

$$\tilde{\rho} = \sum_i p_i |a_i\rangle\langle a_i| \otimes |b_i\rangle\langle b_i| \otimes |a_i\rangle\langle a_i| \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \otimes (\mathcal{H}_C = \mathcal{H}_A). \quad (2.2.6)$$

Dieser neue Zustand erfüllt folgende Bedingungen:

$$\text{Tr}_C[\tilde{\rho}] = \rho.$$

$\tilde{\rho}$ ist symmetrisch unter Austausch der beiden Subsysteme A und C.

$\tilde{\rho}$ ist PPT bezüglich jeder der drei Subsysteme A, B und C.

Für einen beliebigen Zustand ρ wird $\tilde{\rho}$ genau dann eine PPT-symmetrische Erweiterung von ρ genannt, wenn es obige drei Bedingungen erfüllt.

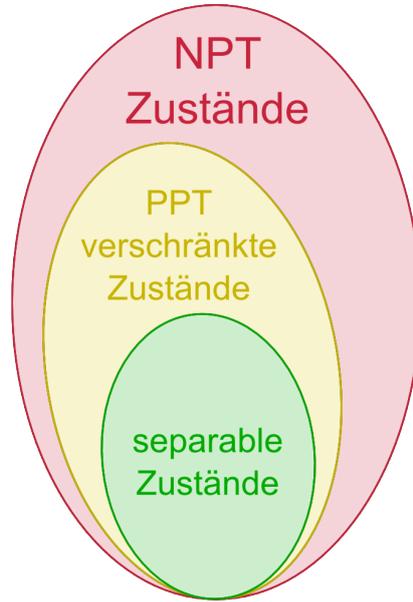


ABBILDUNG 2.2.1. Schematische Darstellung der separablen, NPT- und PPT-verschränkten Zustände in der konvexen Menge aller Zustände. In dieser vereinfachten zweidimensionalen Darstellung wird aber beispielsweise nicht deutlich, dass die reinen Zustände am Rand der Menge der separablen Zustände auch am Rand der Menge aller Zustände liegen müssen, da diese sonst durch eine komplexe Kombination anderer Zustände gebildet werden könnten, was der Definition eines reinen Zustandes zuwider läuft.

Da sich per Definition für jeden separablen Zustand solch eine Erweiterung konstruieren lässt, ist deren Existenz eine notwendige Bedingung für Separabilität. Die Suche nach solchen PPT-symmetrischen Erweiterungen kann als semidefinites Programm (SDP) formuliert werden, wofür bereits effiziente Algorithmen existieren. Unter [18] wurde ein für Matlab geschriebenes Programm zu Verfügung gestellt, welches einen Zustand mittels eines SDPs auf eine PPT-symmetrische Erweiterung hin überprüft.

In der gleichen Art und Weise ist auch eine Erweiterung auf beliebig viele Kopien eines Subsystems möglich:

$$\tilde{\rho}_n = \sum_i p_i |a_i\rangle\langle a_i| \otimes |b_i\rangle\langle b_i| \otimes (|a_i\rangle\langle a_i|)^{\otimes n-1} \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_A^{\otimes n-1}, \quad (2.2.7)$$

welche analog die drei Bedingungen erfüllt.

Für jedes $n \in \mathbb{N}$ existiert somit eine notwendige Bedingung für Separabilität, nämlich die Existenz einer PPT-symmetrischen Erweiterung des Zustandes

auf n Kopien eines Subsystems. Somit haben wir nun eine abzählbar unendliche Menge neuer Separabilitätskriterien, welche sich ebenfalls als SDP formulieren lassen, deren Laufzeit noch dazu polynomial mit der Anzahl der Kopien skaliert. Leider ist die Laufzeit des semidefiniten Programms bereits bei einer einzelnen Kopie im Vergleich zu den übrigen operativen Separabilitätskriterien unverhältnismäßig lang und dessen Anwendung daher nicht immer praktikabel. Doherty et al. konnten in [17] darüber hinaus zwei bemerkenswerte Eigenschaften dieser neuen Familie von Separabilitätskriterien beweisen:

THEOREM 2.2.5. *Die Separabilitätskriterien bilden eine Hierarchie in folgendem Sinne: Existiert eine PPT-symmetrische Erweiterung auf n Kopien eines Subsystems, so folgt daraus, dass auch eine PPT-symmetrische Erweiterung auf $n - 1$ Kopien existiert.*

Somit detektiert das n -te Separabilitätskriterium aus dieser Familie mindestens jene verschränkten Zustände, welche auch vom $(n - 1)$ -ten Separabilitätskriterium detektiert wurden. Da das erste Kriterium ($n = 1$), bei welchem der ursprüngliche Zustand nicht erweitert wird, gerade dem Peres-Horodecki-Kriterium entspricht, bietet sich diese Hierarchie zur gezielten Suche nach verschränkten PPT-Zuständen an. Darüber hinaus konnten Doherty et al. auch die Vollständigkeit dieser Hierarchie beweisen:

THEOREM 2.2.6. *Jeder verschränkte Zustand wird an einer bestimmten endlichen Stelle n in der Hierarchie den Separabilitätstest nicht bestehen, womit dann dessen Verschränkung eindeutig nachgewiesen ist.*

2.2.3. Computable-Cross-Norm- oder Realignment-Kriterium.

Betrachten wir nun eine neue, vom Peres-Horodecki-Kriterium unabhängige Separabilitätsbedingung, das Computable-Cross-Norm-Kriterium oder kurz CCN-Kriterium. Hierfür betrachten wir die Schmidt-Zerlegung des Dichteoperators ρ .

$$\rho = \sum_i a_i A_i \otimes B_i, \quad (2.2.8)$$

mit den Schmidt-Koeffizienten a_i und den orthonormalen Elementen $A_i \otimes B_i$ des Operatorraums. Diese ist möglich, da hermitesche Operatoren auf einen Hilbertraum selbst wieder einen Hilbertraum bilden, wenn wir ein zugehöriges Skalarprodukt definieren, nämlich $\text{Tr}(\rho_1 \rho_2)$. Über dieses Skalarprodukt definiert sich auch die geforderte Orthonormalität der $A_i \otimes B_i$:

$$\text{Tr}((A_i \otimes B_i)(A_j \otimes B_j)) = \delta_{ij}. \quad (2.2.9)$$

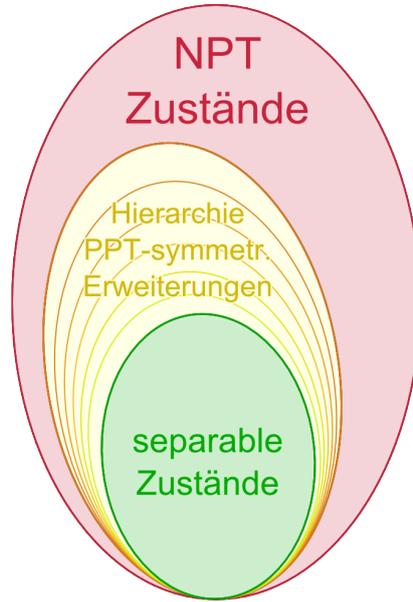


ABBILDUNG 2.2.2. Schematische Darstellung der separablen und NPT-verschränkten Zustände und der Hierarchie PPT-symmetrischer Erweiterungen in der konvexen Menge aller Zustände.

Das von O. Rudolph in [19, 20] beschriebene CCN-Kriterium verwendet nun diese Zerlegung wie folgt:

THEOREM 2.2.7. *Ist die Computable-Cross-Norm (CCN) von ρ , also die Summe aller Schmidt-Koeffizienten a_i , größer als eins, so ist ρ verschränkt.*

$$\sum_i a_i > 1 \implies \rho \text{ ist verschränkt.}$$

Ein dazu äquivalentes [21] Kriterium stellt das von K. Chen und L. A. Wu in [22] formulierte Realignment-Kriterium dar. Mit Realignment ist eine Umordnung der Einträge der in einer Produktbasis gegebenen Dichtematrix eines Zustands gemeint, die folgendermaßen definiert ist:

DEFINITION 2.2.8. Um die Operation des Realignment (Umordnung) einer Dichtematrix zu beschreiben, müssen wir zuerst eine weitere Definition einführen:

Sei $A = [a_{\mu\nu}]$ eine beliebige $m \times n$ Matrix. Wir definieren nun den Vektor $\text{vec}(A)$:

$$\text{vec}(A) = [a_{11}, \dots, a_{m1},], \dots, a_{m2}, \dots, a_{1n}, \dots, a_{mn}]. \quad (2.2.10)$$

Nun betrachten wir eine Dichtematrix ρ des Hilbertraums $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ mit $d_A = \dim(\mathcal{H}_A)$ bzw. $d_B = \dim(\mathcal{H}_B)$. ρ ist also eine $d_A \times d_A$ Blockmatrix mit Blöcken $B_{i,j}$ der Größe $d_B \times d_B$ und $i, j = 1 \dots d_A$. Aus den einzelnen Blöcken werden die Vektoren $\text{vec}(B_{i,j})$ der Länge d_B^2 gebildet und zu einer neuen Matrix $\tilde{\rho}$ der Dimension $d_A^2 \times d_A^2$ folgend zusammengesetzt:

$$\tilde{\rho} = \begin{bmatrix} \text{vec}(B_{1,1}) \\ \vdots \\ \text{vec}(B_{m,1}) \\ \vdots \\ \text{vec}(B_{1,m}) \\ \vdots \\ \text{vec}(B_{m,m}) \end{bmatrix}. \quad (2.2.11)$$

Zur Veranschaulichung sei hier die Realignment-Transformation einer 3×2 Dichtematrix dargestellt:

$$\rho = \left(\begin{array}{cc|cc|cc} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} & \rho_{15} & \rho_{16} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} & \rho_{25} & \rho_{26} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} & \rho_{34} & \rho_{35} & \rho_{36} \\ \rho_{41} & \rho_{42} & \rho_{43} & \rho_{44} & \rho_{45} & \rho_{46} \\ \rho_{51} & \rho_{52} & \rho_{53} & \rho_{54} & \rho_{55} & \rho_{56} \\ \rho_{61} & \rho_{62} & \rho_{63} & \rho_{64} & \rho_{65} & \rho_{66} \end{array} \right) \longrightarrow \tilde{\rho} = \left(\begin{array}{cccc} \rho_{11} & \rho_{21} & \rho_{12} & \rho_{22} \\ \rho_{31} & \rho_{41} & \rho_{32} & \rho_{42} \\ \rho_{51} & \rho_{52} & \rho_{61} & \rho_{62} \\ \rho_{13} & \rho_{23} & \rho_{14} & \rho_{24} \\ \rho_{33} & \rho_{43} & \rho_{34} & \rho_{44} \\ \rho_{53} & \rho_{63} & \rho_{54} & \rho_{64} \\ \rho_{15} & \rho_{25} & \rho_{16} & \rho_{26} \\ \rho_{35} & \rho_{45} & \rho_{36} & \rho_{46} \\ \rho_{55} & \rho_{65} & \rho_{56} & \rho_{66} \end{array} \right).$$

Für die Beschreibung des von Chen und Wu aufgestellten Kriteriums benötigen wir allerdings noch eine weitere Definition:

DEFINITION 2.2.9. Die Spurnorm $\|A\|_1$ einer Matrix A errechnet sich wie folgt:

$$\|A\|_1 = \text{Tr}\sqrt{AA^\dagger}. \quad (2.2.12)$$

Bemerkung: Wendet man die Singulärwertzerlegung auf A an, lässt sich die Spurnorm auch so schreiben:

$$\begin{aligned} \|A\|_1 &= \text{Tr}\sqrt{UDV^\dagger VDU^\dagger} = \text{Tr}\sqrt{UDU^\dagger UDU^\dagger} \\ &= \text{Tr}(UDU^\dagger) = \text{Tr}D \\ &= \sum_i d_i. \end{aligned} \quad (2.2.13)$$

Die Spurnorm ist also gleich der Summe aller Singulärwerte einer Matrix.

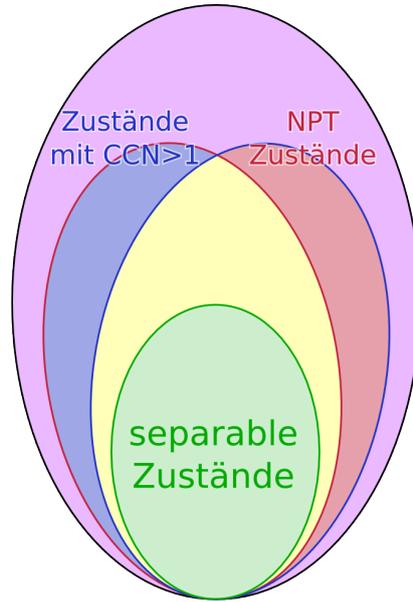


ABBILDUNG 2.2.3. Darstellung der separablen, der NPT-verschränkten und der durch das CCNR-Kriterium detektierten Zustände in der konvexen Menge aller Zustände. Das CCNR- und das Peres-Horodecki-Kriterium sind unabhängig, es existieren verschränkte Zustände, welche nur jeweils eines der Kriterien verletzen.

Mit der Umsortierung der Dichtematrix und der Spurnorm lässt sich nun die Separabilitätsbedingung aufstellen:

THEOREM 2.2.10. *Ist eine bipartiter Zustand ρ_{AB} separabel, dann ist die Spurnorm der zugehörigen umsortierten Dichtematrix $\tilde{\rho}_{AB}$ kleiner oder gleich eins oder umgekehrt:*

$$\|\tilde{\rho}_{AB}\|_1 = \sum_{i=1} d_i(\tilde{\rho}_{AB}) > 1 \implies \rho_{AB} \text{ ist verschränkt.}$$

CCN- und Realignment-Kriterium sind äquivalent, entspricht die oben beschriebene Umsortierung doch folgender Darstellung des Dichteoperators, wie leicht nachzurechnen ist:

$$\rho = \sum_{i,j} \tilde{\rho}_{ij} A_i \otimes B_j, \quad (2.2.14)$$

mit der Standardbasis des Operatorraums $A_i \otimes B_j$. Die Spurnorm der Matrix $\tilde{\rho}_{ij}$ und die Summe der Schmidt-Koeffizienten des Dichteoperators ρ , also die Computable-Cross-Norm, sind somit ein und dasselbe.

2.2.4. Permutations-Separabilitätskriterien. Ein alternativer Ansatz für eine Klasse neuer Separabilitätskriterien, welcher gewissermaßen eine Verallgemeinerung des CCNR-Kriteriums darstellt, stammt von M., P. und R. Horodecki [23]. Hierfür betrachten wir zunächst die Darstellung eines Dichteoperators in einer Produktbasis:

$$\rho = \sum_{i_1, i_2}^{d_A} \sum_{i_3, i_4}^{d_B} \rho_{i_1 i_2 i_3 i_4} |i_1\rangle_A \langle i_2| \otimes |i_3\rangle_B \langle i_4|. \quad (2.2.15)$$

Die Idee hinter diesen Kriterien lässt sich kurz zusammenfassen: Bei separablen Zuständen ändert sich die Spurnorm der Dichtematrix $\rho_{i_1 i_2 i_3 i_4}$ unter vorheriger Anwendung einer beliebigen Permutation der Indizes $i_1 - i_4$ nicht. Dies lässt sich zur Konstruktion einer Reihe von Separabilitätskriterien verwenden.

DEFINITION 2.2.11. Sei nun σ eine Permutation aus der Symmetrischen Gruppe auf vier Elementen S_4 . Jede Permutation definiert nun eine Abbildung Λ_σ auf ρ mit folgender Wirkung:

$$\Lambda_\sigma \rho = \sum_{i_1, i_2}^{d_A} \sum_{i_3, i_4}^{d_B} \rho_{i_1 i_2 i_3 i_4} |i_{\sigma(1)}^\#\rangle_A \langle i_{\sigma(2)}^\#| \otimes |i_{\sigma(3)}^\#\rangle_B \langle i_{\sigma(4)}^\#|, \quad (2.2.16)$$

mit $i_{\sigma(j)}^\# = i_{\sigma(j)}^*$, wenn $\sigma(j)$ einen (Zeilenindex mit einem Spaltenindex) oder umgekehrt vertauscht und $i_{\sigma(j)}^\# = i_{\sigma(j)}$ sonst. In der Standardbasis spielt diese komplexe Konjugation natürlich keine Rolle.

Das Separabilitätskriterium lautet nun wie folgt:

THEOREM 2.2.12. *Aus $\|\Lambda_\sigma \rho\|_1 > 1$ folgt, dass ρ verschränkt ist.*

Jedoch resultiert nicht aus jeder Permutation ein neues Separabilitätskriterium, da die Spurnorm unter voller Transposition ($\sigma_T = [1234 \rightarrow 2143]$) und unter Transformationen des Typs $X \rightarrow UXV$ (U, V unitär) erhalten bleibt. Mit diesen beiden Operationen lassen sich alle diese $4! = 24$ Permutationen bipartiter Systeme auf nur drei Basispermutationen zurückführen: Auf die Identität, aus welcher natürlich kein sinnvolles Separabilitätskriterium folgen kann, auf das Peres-Horodecki-Kriterium oder auf das CCNR-Kriterium.

Die beim CCNR-Kriterium notwendige Umsortierung der Dichtematrix entspricht dabei - wie leicht nachgerechnet werden kann - der Permutation

$\sigma_{CCNR} = [1234 \rightarrow 2413]$, also

$$\rho = \sum_{ijkl} \rho_{ijkl} |i\rangle_A \langle j| \otimes |k\rangle_B \langle l|, \quad (2.2.17)$$

$$\Lambda_{\sigma_{CCNR}} \rho = \sum_{ijkl} \rho_{ijkl} |j^*\rangle_A \langle i^*| \otimes |k^*\rangle_B \langle l^*|. \quad (2.2.18)$$

Das Peres-Horodecki-Kriterium andererseits ist über die partielle Transposition eines Subsystems definiert, also beispielsweise $\sigma_{T_A} = [1234 \rightarrow 2134]$:

$$\Lambda_{\sigma_{T_A}} \rho = \sum_{ijkl} \rho_{ijkl} |j^*\rangle_A \langle i^*| \otimes |k\rangle_B \langle l|. \quad (2.2.19)$$

Um die Äquivalenz des aus dieser Transposition folgenden Kriteriums und des Peres-Horodecki-Kriteriums zu beweisen, muss lediglich gezeigt werden, dass die Spurnorm von ρ^{T_A} genau dann größer als eins ist, wenn ρ NPT ist. Dazu benötigen wir folgende Eigenschaft der Spurnorm:

THEOREM 2.2.13. *Ist A hermitesch, dann ist die Spurnorm gleich der Summe über die Beträge der Eigenwerte von A :*

$$\|A\|_1 = \sum_i |\lambda_i|. \quad (2.2.20)$$

Bemerkung: Handelt es sich bei A außerdem um eine Dichtematrix ($\text{Tr} A = 1$, $\lambda_i \geq 0$), so ist die Spurnorm gleich eins.

Da ρ^{T_A} hermitesch ist und $\text{Tr} \rho^{T_A} = 1$ und somit auch $\sum_i \lambda_i = 1$ gilt, ist die Spurnorm $\|\rho^{T_A}\|_1 = \sum_i |\lambda_i|$ nur dann echt größer eins, wenn zumindest einer der Eigenwerte negativ ist, also ein NPT-Zustand vorliegt. Ansonsten ist die Spurnorm gleich eins, im Gegensatz zu den übrigen auf solchen Permutationen beruhenden Kriterien, bei welchen die Spurnorm auch kleiner eins sein kann.

Bemerkung: Auch wenn dieser Ansatz im bipartiten Fall zu keinen neuen Separabilitätskriterien führt, so kann man offensichtlich leicht eine Erweiterung hin zu multipartiten Systemen finden, wie es auch im nächsten Kapitel ausgeführt wird.

2.2.5. Verschränkungszeugen. Eine weitere Separabilitätsbedingung stellen sogenannte Verschränkungszeugen dar. Unter einem solchen Zeugen (witness) versteht man einen Operator W mit folgenden Bedingungen:

- Für alle separablen Zustände ρ_{sep} ist der Erwartungswert des Operators W größer oder gleich Null.

$$\langle W \rangle_{\rho_{sep}} = \text{Tr}(W \rho_{sep}) \geq 0. \quad (2.2.21)$$

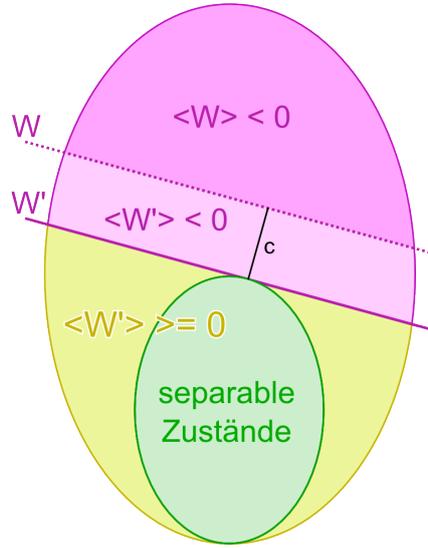


ABBILDUNG 2.2.4. Darstellung der separablen Zustände, der von den Zeugen W und $W' = W - c\mathbb{1}$ (nicht) detektierten verschränkten Zustände und der durch die Zeugen aufgespannten Hyperebenen.

- Es existieren verschränkte Zustände ρ_v mit einem negativen Erwartungswert von W .

$$\langle W \rangle_{\rho_v} = \text{Tr}(W\rho_v) < 0. \quad (2.2.22)$$

Ein gegebener Verschränkungszeuge lässt sich in gewisser Weise optimieren: Die Gleichung $\text{Tr}(W\rho) = 0$ definiert eine Hyperebene, $\text{Tr}(W\rho)$ einen Abstand auf ebendiese, wobei für jeden separablen Zustand dieser Abstand größer oder gleich Null sein muss. Somit liegen die separablen Zustände geschlossen auf einer Seite der Hyperebene wie in Abbildung 2.2.4 zu sehen ist. Wenn c den kleinsten Abstand der Menge der separablen Zustände zur Hyperebene bezeichnet, so definiert $\text{Tr}(W'\rho) = 0$ mit $W' = W - c\mathbb{1}$ nun eine tangential anliegende Hyperebene. Mit dem Zeuge W' lässt sich nun ein größerer Bereich von verschränkten Zuständen detektieren, aber eine weitere Optimierung durch einfaches Subtrahieren einer Konstanten ist nicht mehr möglich, da zumindest ein separabler Zustand ρ_{sep} mit $\text{Tr}(W'\rho_{sep}) = 0$ existiert.

Bei diesen Verschränkungszeugen handelt es sich natürlich nicht um operative Separabilitätskriterien, denn für jede Anwendung muss erst ein passender Zeuge gefunden werden, welcher dann meist nur einen sehr eingeschränkten Bereich verschränkter Zustände zu detektieren vermag.

KAPITEL 3

Multipartite Verschränkung

War bisher immer nur von bipartiten Systemen die Rede, so kann der Begriff der Verschränkung auch auf Systeme ausgeweitet werden, die aus mehreren Partitionen bestehen. Gegeben sei ein Hilbertraum, der sich aus r Subsystemen zusammensetzt.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_r. \quad (3.0.23)$$

DEFINITION 3.0.14. Ein reiner Zustand ist genau dann separabel, wenn es sich dabei um einen Produktzustand handelt.

$$|\psi\rangle = |\phi^1\rangle \otimes |\phi^2\rangle \otimes \cdots \otimes |\phi^r\rangle. \quad (3.0.24)$$

Analog dazu wird ein gemischter Zustand separabel genannt, falls er sich als konvexe Summe solcher reiner Zustände schreiben lässt.

$$\rho = \sum_i p_i |\phi_i^1\rangle\langle\phi_i^1| \otimes |\phi_i^2\rangle\langle\phi_i^2| \otimes \cdots \otimes |\phi_i^r\rangle\langle\phi_i^r|, \quad (3.0.25)$$

mit reellen Koeffizienten $p_i \geq 0$, $\sum_i p_i = 1$.

3.1. Klassifizierung tripartiter Systeme der Dimension $2 \times 2 \times 2$

Betrachten wir nun den Fall dreier Subsysteme etwas genauer, welcher insofern interessant ist, als dass in [24] eine Klassifizierung der möglichen Zustände dreier Qubits gelang.

Wie auch schon bei den bipartiten Systemen bilden die separablen Zustände $\rho_{sep} = \sum_i p_i |\phi_i^A\rangle\langle\phi_i^A| \otimes |\phi_i^B\rangle\langle\phi_i^B| \otimes |\phi_i^C\rangle\langle\phi_i^C|$, diese werden hier vollseparabel genannt, eine konvexe Teilmenge S innerhalb der Menge aller Zustände.

DEFINITION 3.1.1. Als biseparabel bezüglich einer gegebenen bipartiten Aufspaltung - beispielsweise $A|BC$ - bezeichnet man nun einen Zustand, bei welchem zwei Subsysteme BC miteinander verschränkt sind, das dritte Subsystem A aber separabel zu diesen beiden ist.

$$|\psi\rangle_{bisep}^{A|BC} = |\phi^A\rangle \otimes |\phi^{BC}\rangle, \quad (3.1.1)$$

$$\rho_{bisep}^{A|BC} = \sum_i p_i |\phi_i^A\rangle\langle\phi_i^A| \otimes |\phi_i^{BC}\rangle\langle\phi_i^{BC}|. \quad (3.1.2)$$

Die biseparablen Zustände jeder bipartiten Aufspaltung ($A|BC$, $B|AC$, $C|AB$) bilden für sich zusammen mit den vollseparablen Zuständen jeweils eine konvexe Teilmenge. Die Vereinigung dieser drei Teilmengen ist jedoch nicht konvex. Deren konvexe Hülle enthält demnach auch Zustandsgemische, die sich aus biseparablen Zuständen bezüglich verschiedener Aufspaltungen zusammensetzen, beispielsweise:

$$\rho_{bisep} = \frac{1}{2} \sum_i p_i |\phi_i^A\rangle\langle\phi_i^A| \otimes |\phi_i^{BC}\rangle\langle\phi_i^{BC}| + \frac{1}{2} \sum_j q_j |\phi_j^{AB}\rangle\langle\phi_j^{AB}| \otimes |\phi_j^C\rangle\langle\phi_j^C|, \quad (3.1.3)$$

wobei auch diese zu den biseparablen Zuständen gezählt werden.

Außerhalb dieser Menge befinden sich die Zustände mit echter multipartiter Verschränkung. Auch hierfür lassen sich verschiedene Fälle unterscheiden. In [25] konnten W. Dür et al. nachweisen, dass für Systeme bestehend aus drei Qubits zwei verschiedene Formen tripartiter Verschränkung existieren.

DEFINITION 3.1.2. Der GHZ- und der W-Zustand sind wie folgt definiert:

$$|GHZ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|000\rangle + |111\rangle), \quad (3.1.4)$$

$$|W\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|001\rangle + |010\rangle + |100\rangle). \quad (3.1.5)$$

Es konnte gezeigt werden, dass sich aus einer Kopie (vergleiche mit der Definition der Destillierbarkeit im nächsten Kapitel) eines beliebigen reinen tripartit-verschränkten Zustands mittels lokaler Operationen und klassischer Kommunikation zumindest mit endlicher Wahrscheinlichkeit (stochastic local operations and classical communication - SLOCC) einer dieser beiden Zustände erzeugen lässt. Eine Umwandlung zwischen solchen GHZ- und W-Zuständen ist damit andererseits nicht möglich.

Wie in [24] gezeigt wurde, bilden die Zustandsgemische aus Zuständen des Typs W gemeinsam mit den voll- und biseparablen Zuständen ebenfalls eine konvexe Teilmenge, außerhalb davon liegen die Zustände vom Typ GHZ , wie in Abbildung 3.1.1 dargestellt.

Für Systeme mit mehr als drei Subsystemen ist eine analoge Klassifizierung nicht mehr möglich, es kann gezeigt werden, dass unendlich viele multipartit verschränkte Zustände existieren, welche sich nicht durch SLOCC ineinander umwandeln lassen [26].

3.2. Separabilitätskriterien

3.2.1. Permutations-Separabilitätskriterien. Schon in der ursprünglichen Veröffentlichung [23] der Familie Horodecki wurde darauf hingewiesen,

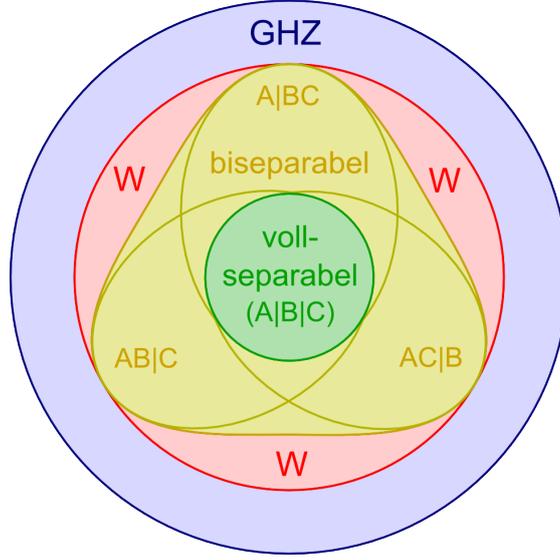


ABBILDUNG 3.1.1. Schematische Darstellung der verschiedenen Klassen von bi- und tripartiter Verschränkung dreier Qubits

dass sich die Permutationskriterien leicht auf multipartite Systeme erweitern lassen. Sei nun r die Anzahl der Subsysteme. Wieder geht man von der Darstellung des Dichteoperators in einer Produktbasis aus, wobei i_{2k-1} den Zeilenindex und i_{2k} den Spaltenindex des k -ten Subsystems repräsentiert:

$$\rho = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_{2r}} \rho_{i_1, i_2, \dots, i_{2r}} |i_1\rangle\langle i_2| \otimes \dots \otimes |i_{2r-1}\rangle\langle i_{2r}|. \quad (3.2.1)$$

Nun wendet man eine der $(2r)!$ möglichen Permutationen $\sigma \in S_{2r}$ an:

$$\Lambda_\sigma \rho = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_{2r}} \rho_{i_1, i_2, \dots, i_{2r}} |i_{\sigma(1)}^\#\rangle\langle i_{\sigma(2)}^\#| \otimes \dots \otimes |i_{\sigma(2r-1)}^\#\rangle\langle i_{\sigma(2r)}^\#|. \quad (3.2.2)$$

Aus $\|\Lambda_\sigma \rho\|_1 > 1$ folgt, dass ρ verschränkt ist. Die eigentliche Schwierigkeit besteht darin herauszufinden, aus welchen Permutationen äquivalente Separabilitätskriterien resultieren. Führt eine Permutation σ' zu einer normerhaltenden Abbildung $\Lambda_{\sigma'}$, so wird jede Permutation $\tilde{\sigma} = \sigma \sigma'^{m \in \mathbb{N}}$ zwangsläufig zum selben Separabilitätskriterium wie σ selbst führen, diese werden dann kombinatorisch abhängig genannt. In [27] konnte die Anzahl kombinatorisch unabhängiger Permutationen zunächst auf 9 im Fall von drei Parteien und höchstens 34 im Fall von vier Parteien beschränkt werden. Später wurde in [28] bewiesen, dass es tatsächlich nur 6 (3 Parteien) bzw. 22 (4 Parteien) unabhängige Permutationskriterien gibt.

Alle diese Permutationen lassen sich aus zwei elementaren Vertauschungsoperationen, der partiellen Transposition PT eines Subsystems und einer Reshuffle genannten Operation zwischen zwei Subsystemen, zusammensetzen.

DEFINITION 3.2.1. Die Reshuffle-Operation (zwischen erstem und zweiten Subsystem) ist durch die Permutation $\sigma_{RAB} = [1234 \rightarrow 1324]$, also der Vertauschung des Spaltenindex des ersten Systems mit dem Zeilenindex des zweiten, definiert:

$$\rho = \sum_{ijkl\dots} \rho_{ijkl\dots} |i\rangle_A \langle j| \otimes |k\rangle_B \langle l| \otimes \dots \quad , \quad (3.2.3)$$

$$\Lambda_{\sigma_{RAB}} \rho = \sum_{ijkl\dots} \rho_{ijkl\dots} |i\rangle_A \langle k^*| \otimes |j^*\rangle_B \langle l| \otimes \dots \quad . \quad (3.2.4)$$

Die elementaren Permutationen und deren, aus den beiden vorher genannten Veröffentlichungen übernommene, graphische Darstellung finden sich in Tabelle 1.

Name	Permutation	graphische Darstellung
Identität	$()$	$k \bullet$
partielle Transposition (PT)	$(2k-1, 2k)$	$k \circ$
Reshuffle (R)	$(2k, 2l-1)$	$k \bullet \longrightarrow \bullet l$

TABELLE 1. elementare Permutationen an den Subsystemen k bzw. l

Die vollständige Auflistung aller unabhängiger Permutationen von zwei, drei oder vier Subsystemen aus [28] ist, in Form der vorhin definierten graphischen Darstellung, in der weitgehend aus eben dieser Veröffentlichung stammenden Tabelle 2 abgebildet.

a)

Typ	
PT	$\circ \cdot$
R	$\cdot \dashrightarrow$

b)

Typ	1	2	3
PT	$\begin{array}{c} \circ \\ \cdot \cdot \end{array}$	$\begin{array}{c} \cdot \\ \circ \cdot \end{array}$	$\begin{array}{c} \cdot \\ \cdot \circ \end{array}$
R	$\begin{array}{c} \downarrow \\ \cdot \end{array}$	$\begin{array}{c} \cdot \\ \dashrightarrow \end{array}$	$\begin{array}{c} \cdot \\ \searrow \end{array}$

c)

Typ	1	2	3	4	5	6
PT	$\begin{array}{c} \circ \cdot \\ \cdot \cdot \end{array}$	$\begin{array}{c} \cdot \cdot \\ \circ \cdot \end{array}$	$\begin{array}{c} \cdot \cdot \\ \cdot \circ \end{array}$	$\begin{array}{c} \cdot \cdot \\ \cdot \cdot \end{array}$		
2PT	$\begin{array}{c} \circ \cdot \\ \circ \cdot \end{array}$	$\begin{array}{c} \cdot \cdot \\ \circ \circ \end{array}$	$\begin{array}{c} \circ \cdot \\ \cdot \circ \end{array}$			
R	$\begin{array}{c} \downarrow \cdot \\ \cdot \end{array}$	$\begin{array}{c} \cdot \\ \dashrightarrow \end{array}$	$\begin{array}{c} \cdot \\ \downarrow \end{array}$	$\begin{array}{c} \dashrightarrow \\ \cdot \cdot \end{array}$	$\begin{array}{c} \searrow \\ \cdot \cdot \end{array}$	$\begin{array}{c} \nearrow \\ \cdot \cdot \end{array}$
R+PT	$\begin{array}{c} \downarrow \circ \\ \cdot \end{array}$	$\begin{array}{c} \cdot \\ \dashrightarrow \end{array}$	$\begin{array}{c} \circ \downarrow \\ \cdot \end{array}$	$\begin{array}{c} \dashrightarrow \\ \circ \cdot \end{array}$	$\begin{array}{c} \searrow \\ \circ \cdot \end{array}$	$\begin{array}{c} \nearrow \\ \cdot \cdot \end{array}$
2R	$\begin{array}{c} \dashrightarrow \\ \dashrightarrow \end{array}$	$\begin{array}{c} \uparrow \uparrow \\ \uparrow \uparrow \end{array}$	$\begin{array}{c} \downarrow \downarrow \\ \downarrow \downarrow \end{array}$			

TABELLE 2. Auflistung aller unabhängigen Permutationskriterien für a) zwei, b) drei und c) vier Subsysteme

Hierzu sind folgende Bemerkungen hinzuzufügen:

- Jeder Punkt bzw. Ring steht für ein Subsystem/Teilchen.
- Die Permutationen sind, entsprechend der elementaren Vertauschungen aus denen sie sich zusammensetzen, in verschiedene Typen unterteilt.
- Diejenigen Permutationskriterien, die nur auf partiellen Transpositionen beruhen, also von Typ PT oder 2PT sind, beschreiben offensichtlich das Peres-Horodecki-Kriterium bezüglich einer entsprechenden bipartiten Aufspaltung des Gesamtsystems.
- Ist in einer Permutation nur eine Reshuffle-Operation R enthalten, so ist die Richtung egal, d.h. die Vertauschungen $(2k, 2l - 1)$ und $(2k - 1, 2l)$ führen zu abhängigen Permutationskriterien. Daher wird

der Reshuffle in diesen Fällen nur durch eine Linie statt einem Pfeil dargestellt. In diesem Fall kann mit der Reshuffle-Operation sowohl die Permutation $\sigma_{R_{AB}} = [1234 \rightarrow 1324]$ als auch $\sigma_{R_{BA}} = [1234 \rightarrow 4231]$ gemeint sein. Außerdem sind beide abhängig von der Permutation $\sigma_{CCNR} = [1234 \rightarrow 2413]$, entsprechen also im bipartiten Fall dem CCNR-Kriterium, denn es gilt $\sigma_{R_{BA}} = \sigma_{CCNR}^{T_{(AB)}}$.

- Bei drei Subsystemen hingegen finden wir keine Übereinstimmungen mit dem CCNR-Kriterium. Dieses entspricht dagegen einer Reshuffle-Operation zwischen einem einzelnen Subsystem und einem aus den beiden verbleibenden Subsystemen zusammengesetzten System.
- Sind zwei Reshuffle enthalten (Typ 2R) so ist die relative Richtung der Reshuffle-Operationen entscheidend. Eine gleichzeitige Änderung der Richtung beider Operationen führt aber wieder zu einer abhängigen Permutation.
- Überdies entsprechen die Permutationskriterien vom Typ 2R jeweils dem CCNR-Kriterium bezüglich einer bestimmten bipartiten Aufspaltung von zwei mal zwei Subsystemen: Die Anfangspunkte bzw. die Endpunkte der Pfeile bilden jeweils ein zusammengesetztes Subsystem.

3.2.2. Verschränkungszeugen. Analog zu den bereits im vorherigen Kapitel beschriebenen Verschränkungszeugen, die eine Separabilitätsbedingung für vollseparable Zustände darstellen, lassen sich auch “strenger“ gefasste Zeugen konstruieren, welche beispielsweise nicht nur für alle vollseparablen, sondern auch für alle biseparablen Zustände einen positiven Erwartungswert aufweisen und demnach echte Mehrteilchenverschränkung detektieren. Im letzten Kapitel werden derartige Zeugen verwendet, um Dreiteilchenverschränkung in Spinketten nachzuweisen.

3.2.3. Spin-Squeezing-Ungleichungen. Einen zu den Verschränkungszeugen ähnlichen Ansatz stellen Spin-Squeezing-Ungleichungen dar. Hierbei muss der Dichteoperator des Systems nicht notwendigerweise bekannt sein, die Kenntnis über die Komponenten des Gesamtdrehimpulses sowie deren Quadrate ist ausreichend, um eine Reihe von Ungleichungen aufzustellen, die für alle separablen Zustände zwingend erfüllt sein müssen.

DEFINITION 3.2.2. Die Gesamtdrehimpulsoperatoren J_x, J_y, J_z eines aus N Qudits (d -dimensionalen Subsystemen) zusammengesetzten Systems sind gegeben durch:

$$J_{x,y,z} = \sum_{k=1}^N s_{x,y,z}^k, \quad (3.2.5)$$

mit den Spinoperatoren $s_{x,y,z}$, die bei Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen, auf welche wir uns im folgenden beschränken werden, den Paulioperatoren mit einem Vorfaktor $\frac{1}{2}$ entsprechen:

$$J_{x,y,z} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sigma_{x,y,z}^k. \quad (3.2.6)$$

$\langle J_{x,y,z} \rangle$ bezeichnet den Erwartungswert des Gesamtdrehimpulses. Weiters seien auch noch die Erwartungswerte der Quadrate dieser Spinoperatoren, $\langle J_{x,y,z}^2 \rangle$, bekannt.

Mit diesen sechs Größen lassen sich eine Reihe von sogenannten Spin-Squeezing-Ungleichungen aufstellen, die zwingend für alle vollseparablen N -Qubit-Zustände erfüllt sein müssen. Am bekanntesten dürfte die folgende, von A. Sorensen [29] aufgestellte Ungleichung sein:

$$\frac{(\Delta J_x)^2}{\langle J_y \rangle^2 + \langle J_z \rangle^2} \geq \frac{1}{N}, \quad (3.2.7)$$

wobei mit $(\Delta J_{x,y,z})^2$ im folgenden die Varianz gemeint ist, also

$$(\Delta J_{x,y,z})^2 = \langle J_{x,y,z}^2 \rangle - \langle J_{x,y,z} \rangle^2. \quad (3.2.8)$$

Seither wurde eine große Anzahl weiterer Ungleichungen gefunden. In einer erst jüngst erschienen Veröffentlichung von Géza Tóth et al. [30] sind folgende acht Ungleichungen angeführt, für die gezeigt werden kann, dass von diesen alle anderen Ungleichungen abgeleitet werden können.

$$\langle J_x^2 \rangle + \langle J_y^2 \rangle + \langle J_z^2 \rangle \leq \frac{N(N+2)}{4}, \quad (3.2.9)$$

$$(\Delta J_x)^2 + (\Delta J_y)^2 + (\Delta J_z)^2 \geq \frac{N}{2}, \quad (3.2.10)$$

$$\langle J_k^2 \rangle + \langle J_l^2 \rangle - \frac{N}{2} \leq (N-1) (\Delta J_m)^2, \quad (3.2.11)$$

$$(N-1) [(\Delta J_k)^2 + (\Delta J_l)^2] \geq \langle J_m^2 \rangle + \frac{N(N-2)}{4}. \quad (3.2.12)$$

Mit k, l, m sind alle möglichen Permutationen von x, y, z gemeint, die letzten beiden Zeilen entsprechen daher jeweils drei Ungleichungen.

THEOREM 3.2.3. *Von diesen Ungleichungen kann - zumindest für große Teilchenzahlen N - gezeigt werden, dass alle anderen denkbaren Ungleichungen, welche ausschließlich auf den genannten sechs Größen basieren, aus diesen acht hergeleitet werden können.*

BEWEIS. Für den vollständigen Beweis sei auf [30] verwiesen, an dieser Stelle wird nur die Beweisidee erläutert:

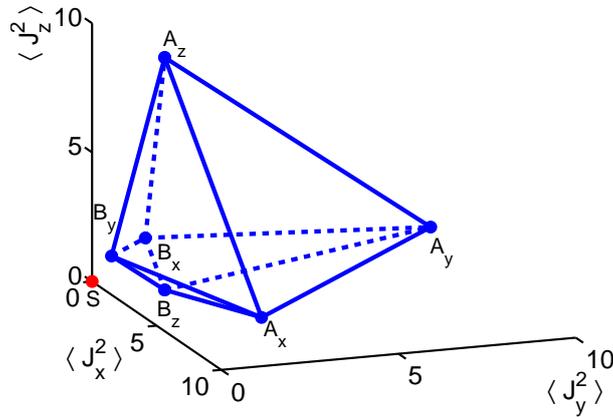


ABBILDUNG 3.2.1. Das Polytop der separablen Zustände für $N = 6$ und $\vec{J} = (\langle J_x \rangle, \langle J_y \rangle, \langle J_z \rangle) = 0$ dargestellt im Raum $(\langle J_x^2 \rangle, \langle J_y^2 \rangle, \langle J_z^2 \rangle)$. Für die Eckpunkte $A_{x,y,z}$ kann immer ein separabler Zustand gefunden werden, für die Eckpunkte $B_{x,y,z}$ sind nur näherungsweise separable Zustände bekannt.

Zu einem festen Wert von $\vec{J} = (\langle J_x \rangle, \langle J_y \rangle, \langle J_z \rangle)$ bilden die Ungleichungen ein Polytop in dem dreidimensionalen Raum, der durch die $\langle J_{x,y,z}^2 \rangle$ aufgespannt wird. Dabei ist das Polytop zu $\vec{J} = (0, 0, 0)$ am größten und schließt alle anderen Polytope ein. Außerhalb dieses Polytops befinden sich keine separablen Zustände, da immer zumindest eine der Ungleichungen verletzt wird. Dass keine Ungleichungen existieren, welche besser als die genannten acht sind, also welche das Polytop schneiden, kann bewiesen werden, indem gezeigt wird, dass zu jedem Punkt $(\langle J_x^2 \rangle, \langle J_y^2 \rangle, \langle J_z^2 \rangle)$ innerhalb des Polytops ein separabler Zustand existiert. Wegen der Konvexität der separablen Zustände ist es ausreichend die sechs Eckpunkte des Polytops zu betrachten. Für drei dieser Punkte konnten entsprechende Zustände gefunden werden, für die übrigen drei nur bei bestimmten Werten von N und \vec{J} . Jedoch war es zumindest möglich separable Zustände für nahegelegene Punkte zu konstruieren, deren maximale Abstände zu den eigentlichen Eckpunkten unabhängig von der Teilchenzahl N sind, während das Volumen des Polytops mit N^6 zunimmt. Somit ist die Behauptung zumindest für $N \rightarrow \infty$, also für makroskopische Systeme, bewiesen. \square

Gebundene Verschränkung und Verschränkungsreinigung

4.1. Verschränkungsreinigung

Während die meisten Anwendungen in der Quanteninformationsverarbeitung möglichst reine verschränkte Zustände voraussetzen, sind in der Praxis aber aufgrund der ständigen Wechselwirkungen des betrachteten Systems mit der Umgebung (z.B. verrauschte Kanäle) nur Zustandsgemische realisierbar, was die Durchführung der einzelnen Schritte eines Experiments erschwert.

DEFINITION 4.1.1. Ein reiner Zustand ist maximal verschränkt, falls seine Schmidtzerlegung die folgende Form hat:

$$|\psi_{\max}\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{i=1}^d |i_A, i_B\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B, \quad (4.1.1)$$

mit $d = \min[\dim(\mathcal{H}_A), \dim(\mathcal{H}_B)]$. Dies trifft zum Beispiel auf die bereits erwähnten Bellzustände zu, welche in Formel (1.1.2) und (1.1.3) gegeben sind.

Als Maß für die Güte eines Zustandsgemisches ρ in Bezug auf einen gewählten reinen Zustand $|\psi\rangle$ dient die Fidelity F .

DEFINITION 4.1.2. Die Fidelity F eines Zustands ρ ist gegeben durch:

$$F = \langle \psi | \rho | \psi \rangle. \quad (4.1.2)$$

Die Fidelity des reinen Zustands $|\psi\rangle$ selbst beträgt demnach $F = 1$, was den größtmöglichen Wert darstellt.

DEFINITION 4.1.3. Der Begriff Verschränkungsreinigung oder auch Destillation umfasst nun Protokolle, mit welchen auf Grundlage lokaler Operationen und klassischer Kommunikation (LOCC) aus mehreren Kopien eines bestimmten Zustands mit einer Fidelity $F_1 < 1$ ein Zustand mit einer höheren Fidelity $F_2 > F_1$ erzeugt werden kann.

Das erste derartige Destillationsprotokoll wurde von Bennett, Brassard, Popescu, Schumacher, Smolin und Wootters beschrieben und ist dementsprechend als BBPSSW-Protokoll bekannt [31]. Es ermöglicht die schrittweise Destillation eines Bellzustands aus mehreren Kopien desselben gemischten Zustands, falls dieser eine Fidelity $F > \frac{1}{2}$ aufweist.

4.2. Destillierbarkeit und partielle Transposition

Die bekannten Protokolle zur Verschränkungsreinigung stellen bestimmte Anforderungen an die zu destillierenden Zustände, beispielsweise die erwähnte untere Schranke für die Fidelity beim BBPSSW-Protokoll. Dies wirft zwangsläufig die Frage auf, ob sich prinzipiell alle verschränkten Zustände zur Destillation eignen, oder welche Voraussetzungen erfüllt sein müssen, falls dies nicht der Fall ist.

DEFINITION 4.2.1. Ein Zustand ρ wird k -destillierbar genannt, falls aus k Kopien dieses Zustands mittels lokaler Operationen und klassischer Kommunikation zwischen Alice und Bob (LOCC) ein maximal verschränkter Zustand $|\psi_{\max}\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ mit beliebiger Genauigkeit erzeugt werden kann. Ein solcher Zustand heißt deshalb auch frei verschränkt.

$$\rho^{\otimes k} \xrightarrow{\text{LOCC}} |\psi_{\max}\rangle\langle\psi_{\max}|.$$

Ein verschränkter Zustand, aus welchem unabhängig von der Anzahl der vorliegenden Kopien kein maximal verschränkter Zustand destilliert werden kann, wird hingegen gebunden verschränkt genannt.

Es zeigt sich, dass die Frage nach der Destillierbarkeit eines Zustandes eng mit dem Peres-Horodecki-Kriterium verknüpft ist. Konkret konnte in [15] folgender Zusammenhang bewiesen werden:

THEOREM 4.2.2. *Aus $\rho^{TA} \geq 0$, also ρ ist PPT folgt, dass ρ nicht destillierbar ist.*

Weiters gilt nach [32, 33] auch:

THEOREM 4.2.3. *Für alle Systeme der Dimension $2 \times N$ mit $N \in \mathbb{N}$ trifft auch die Umkehrung der vorangegangenen Behauptung zu: Aus $\rho^{TA} < 0$, also ρ ist NPT folgt, dass ρ destillierbar ist.*

Für andere Systeme gelang hingegen kein Beweis für diese Behauptung, es steht vielmehr die Vermutung im Raum, dass tatsächlich auch gebunden verschränkte NPT-Zustände existieren [33, 34].

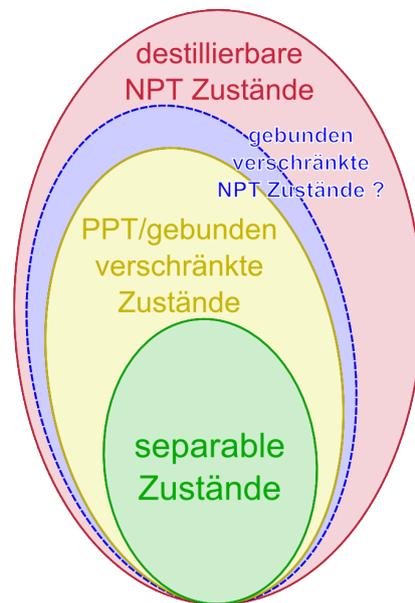


ABBILDUNG 4.2.1. Darstellung der Menge der separablen Zustände, der PPT- und damit auch gebunden verschränkten Zustände ($\dim > 2 \times 3$), der destillierbaren NPT-Zustände und der vermuteten gebunden verschränkten NPT-Zustände ($\dim > 2 \times \mathbb{N}$) in der konvexen Gesamtmenge aller Zustände

REMARK. Die zuvor angeführte Definition von Destillierbarkeit beschränkt sich auf Kopien ein und desselben Zustands. Es ist jedoch beispielsweise möglich gebundene Verschränkung zu aktivieren, in dem Sinne, dass mit einem frei verschränkten Zustand unter Zuhilfenahme gebunden verschränkter Zustände und LOCC Anwendungen machbar sind, die mit dem frei verschränkten Zustand alleine aufgrund seiner zu niedrigen Fidelity nicht möglich wären [35].

Verschränkungsmaße

In Anbetracht der Möglichkeit mittels Destillation Verschränkung „bündeln“ zu können, stellt sich nun die Frage, inwieweit Verschränkung quantifiziert werden kann, also ob es möglich ist, ein Maß dafür definieren zu können, wie stark ein gegebener Zustand die Separabilität verletzt.

5.1. Reine Zustände

1996 zeigten Bennett et al., dass für reine bipartite Zustände die Von-Neumann-Entropie eines der beiden Subsysteme ein solches Verschränkungsmaß darstellt [36].

DEFINITION 5.1.1. Die Von-Neumann-Entropie ist gegeben durch:

$$S(\rho) = -\text{Tr} \rho \log_2 \rho = -\sum_n \lambda_n \log_2 \lambda_n, \quad (5.1.1)$$

wobei $\rho = -\sum_{n=1}^N \lambda_n |n\rangle\langle n|$ die Eigenwertzerlegung des Zustands bezeichnet.

REMARK. Dies ist die in der Quanteninformationstheorie gebräuchliche Definition. Im Vergleich zu der in der Statistischen Physik üblichen Definition wird die Boltzmannkonstante weggelassen und statt des natürlichen Logarithmus der Logarithmus zur Basis zwei verwendet.

Ein reiner Zustand mit $N = 1$ und $\lambda_1 = 1$ hat somit eine Entropie von Null, während der maximal gemischte Zustand $\rho = \frac{\mathbb{1}_d}{d}$ (d ...Dimension des Systems) die höchste Entropie $S = \log_2 d$ aufweist. Die Von-Neumann-Entropie kann somit als Maß für die Unkenntnis über ein quantenmechanisches System interpretiert werden. Außerdem läßt sich mit dieser Größe nun folgendes Verschränkungsmaß definieren:

DEFINITION 5.1.2. Die Entropie der Verschränkung E_S eines reinen Zustands $|\psi\rangle$ ist gegeben als die Von-Neumann-Entropie des auf ein Subsystem reduzierten Dichteoperators dieses Zustands:

$$E_S(|\psi\rangle) = -\text{Tr} \rho^A \log_2 \rho^A = -\text{Tr} \rho^B \log_2 \rho^B, \quad (5.1.2)$$

mit den reduzierten Dichteoperatoren $\rho^A = \text{Tr}_B(|\psi\rangle\langle\psi|)$ bzw. $\rho^B = \text{Tr}_A(|\psi\rangle\langle\psi|)$.

Es ist leicht zu erkennen, dass Produktzustände $|\psi\rangle = |\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle$ diesem Maß nach keine Verschränkung aufweisen, da deren reduzierte Dichteoperatoren wieder reinen Zuständen entsprechen:

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}_B(|\psi\rangle\langle\psi|) &= |\phi_A\rangle\langle\phi_A| \otimes \mathrm{Tr}_B(|\phi_B\rangle\langle\phi_B|) \\ &= |\phi_A\rangle\langle\phi_A| \otimes \langle\phi_B|\phi_B\rangle \\ &= |\phi_A\rangle\langle\phi_A|. \end{aligned} \tag{5.1.3}$$

Reduziert man hingegen einen der Bellzustände (1.1.2) und (1.1.3) auf ein Subsystem, erhält man den komplett gemischten Zustand $\rho = \frac{\mathbb{1}_2}{2} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$ mit einer Von-Neumann-Entropie von $S = 1$. Diese Zustände sind demnach maximal verschränkt.

5.2. Gemischte Zustände

Für gemischte Zustände eignet sich die Entropie der Verschränkung klarerweise nicht als Verschränkungsmaß, denn der reduzierte Dichteoperator des komplett gemischten und somit separablen Zustands $\rho = \frac{\mathbb{1}_d}{d}$ ist selbst wieder ein komplett gemischter Zustand mit maximaler Entropie. ρ wäre demnach auch maximal verschränkt was natürlich einen Widerspruch darstellt. Leider gibt es für gemischten Zustände kein eindeutiges Verschränkungsmaß, es existieren hierfür aber zahlreiche Ansätze, welche die verschiedenen Anforderungen, die an ein solches Maß gestellt werden, mehr oder minder erfüllen. Da aber im Rahmen dieser Diplomarbeit auf keinerlei Verschränkungsmaße zurückgegriffen wird, sei zu den an diese gestellten Anforderungen beispielsweise auf [37] verwiesen. Wir beschränken uns an dieser Stelle auf zwei Kriterien, die zum Teil in den angeführten Referenzen der folgenden Kapitel Verwendung finden und deshalb hier auch kurz erläutert werden.

5.2.1. Entanglement of Formation. Zunächst ist die sogenannte “Entanglement of Formation” E_F zu nennen [38]. Sie entspricht gewissermaßen der minimalen Verschränkung (gemessen mit der Entropie der Verschränkung) welche notwendig ist, um den gegebenen gemischten Zustand aus reinen Zuständen zusammenzusetzen.

DEFINITION 5.2.1. Die Entanglement of Formation eines Zustandsgemisches ist gegeben durch:

$$E_F(\rho) = \min_{\{p_n, |\phi_n\rangle\}} \sum_n p_n E_S(|\phi_n\rangle), \tag{5.2.1}$$

also durch das Minimum der Summe über die (gewichteten) Entropien der Verschränkung der reinen Zustände eines Ensembles unter allen möglichen Zerlegungen $\rho = -\sum_{n=1}^N p_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$.

Diese Minimierung ist im Allgemeinen nicht praktikabel durchzuführen, jedoch kann E_F für beliebige 2-Qubit-Systeme mittels eines anderen Verschränkungsmaßes, der Concurrence, einfach berechnet werden [39].

5.2.2. Concurrence. Um dieses Maß zu beschreiben, benötigen wir mehrere Definitionen:

DEFINITION 5.2.2. Sei ρ eine Dichtematrix (in Standardbasis) im 2-Qubit-Hilbertraum und ρ^* deren komplex Konjugierte. Damit definieren wir die Matrix

$$\tilde{\rho} = (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho^* (\sigma_y \otimes \sigma_y). \quad (5.2.2)$$

DEFINITION 5.2.3. Weiters definieren wir eine hermitesche Matrix $R = \sqrt{\sqrt{\rho} \tilde{\rho} \sqrt{\rho}}$ mit den Eigenwerten $\{\lambda_i\}$ (in absteigender Reihenfolge) und mit diesen schlussendlich das gesuchte Verschränkungsmaß, die Concurrence, selbst:

$$C(\rho) = \max[0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4]. \quad (5.2.3)$$

Die Concurrence kann Werte zwischen 0 (alle separablen Zustände) und 1 (maximal verschränkte Zustände wie die Bellzustände) annehmen und findet häufig als Verschränkungsmaß Verwendung.

THEOREM 5.2.4. *Die Entanglement of Formation kann nun wie folgt aus der Concurrence berechnen werden:*

$$E_F(C(\rho)) = h\left(\frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2}\right), \quad (5.2.4)$$

$$h(x) = -x \log_2 x - (1 - x) \log_2 (1 - x). \quad (5.2.5)$$

$E_F(C)$ ist eine monoton steigende Funktion von C und nimmt ebenfalls Werte zwischen 0 und 1 an.

Bemerkung: An dieser Stelle werden wir auf keine weiteren Verschränkungsmaße mehr eingehen, welche mittlerweile in großer Zahl aufgestellt wurden. Einen guten Überblick über den aktuelle Stand liefert [40].

Teil 2

Untersuchung von Spinsystemen

Eigenschaften der untersuchten Spinsysteme

6.1. Wechselwirkungen

Eine notwendige Voraussetzung für das Auftreten von Verschränkung ist eine Form von Wechselwirkung zwischen den einzelnen Subsystemen. Dabei beschränken sich die meisten für Spinsysteme physikalisch relevanten Modelle auf paarweise Austauschsterme zwischen den einzelnen Spins. Die wichtigsten Beispiele solcher Spinmodelle, welche wir im weiteren Verlauf auf ihre Verschränkungseigenschaften hin untersuchen werden, sollen nun kurz vorgestellt werden:

6.1.1. Heisenbergmodell. Das 1928 von W. Heisenberg aufgestellte [41] und später nach ihm benannte Heisenbergmodell beruht auf Austauschwechselwirkungstermen zwischen jeweils zwei Spins von der Form $J_{12} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = J_{12} (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y + S_1^z S_2^z)$, wobei das Vorzeichen der Austauschkonstante J über die relative Ausrichtung der Spins entscheidet. Ist $J < 0$, so wird eine parallele Ausrichtung der Spins bevorzugt, was zu einem ferromagnetischen Zustand führt, während $J > 0$ eine antiparallelen Ausrichtung, also einen antiferromagnetischen Zustand bewirkt. In der quantenmechanischen Formulierung des Systems werden die einzelnen Komponenten der Spinvektoren durch die entsprechenden Paulioperatoren ersetzt. Wenn man noch ein zusätzliches externes Magnetfeld hinzunimmt lautet der Hamiltonoperator des gesamten Spinsystems lautet also:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j + h \sum_{i=1}^N \sigma_i^z. \quad (6.1.1)$$

(Der Faktor $\frac{1}{2}$ soll zum Ausdruck bringen, dass jedes Paar nur einmal gewertet wird, denn es gilt $J_{ij} = J_{ji}$.) In vielen Fällen, insbesondere bei Systemen mit großen Teilchenzahlen wie z.B. Festkörper oder Spinketten, wird die Wechselwirkung nicht benachbarter Gitterplätze gänzlich vernachlässigt, die übliche Schreibweise hierfür ist:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j + h \sum_{i=1}^N \sigma_i^z, \quad (6.1.2)$$

wobei $\sum_{\langle i,j \rangle}$ für die Summation benachbarter Gitterplätze i und j steht, im Fall einer Spinkette also über alle ij mit $j = i + 1$ summiert wird. Heisenberg konnte das Modell im eindimensionalen Fall mit Hilfe der Mean-Field-Theorie näherungsweise lösen [41], eine exakte Lösung gelang 1931 mittels des Bethe-Ansatzes [42]. Es werden im Allgemeinen aber nicht nur Modelle mit isotroper Wechselwirkung, sondern auch solche mit unterschiedlicher Gewichtung der Spinkomponenten als Heisenbergmodell bezeichnet, also:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij}^x \sigma_i^x \sigma_j^x + J_{ij}^y \sigma_i^y \sigma_j^y + J_{ij}^z \sigma_i^z \sigma_j^z + h \sum_{i=1}^N \sigma_i^z, \quad (6.1.3)$$

mit $J_{ij}^x \neq J_{ij}^y \neq J_{ij}^z$. Einige Spezialfälle dieses allgemeiner gefassten Modells, wie das XXZ-Modell mit $J_{ij}^x = J_{ij}^y \neq J_{ij}^z$ wurden in der Vergangenheit ebenfalls genauer analysiert.

6.1.2. Isingmodell. Das 1924 von Ernst Ising auf eine Idee von Wilhelm Lenz hin als mögliche Beschreibung des Ferromagnetismus auf mikroskopischer Ebene entwickelte Modell [43, 44] kann als Spezialfall des (anisotropen) Heisenbergmodells, dem es zeitlich vorausgeht, betrachtet werden. Auch im Isingmodell wird von einer Wechselwirkung benachbarter Gitterplätze, welche zwei diskrete Zustände - im Nachhinein als Spin identifiziert - einnehmen können, ausgegangen. Im Gegensatz zum Heisenbergmodell werden jedoch nicht die drei Komponenten des Spins berücksichtigt, sondern nur eine. In der Quantenmechanik mit Hilfe der Paulioperatoren formuliert lautet der Hamiltonoperator des Systems unter Annahme eines externen Magnetfelds also:

$$H_{Ising} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - h \sum_{i=1}^N \sigma_i^z. \quad (6.1.4)$$

Ising selbst konnte das klassische Isingmodell in einer Dimension analytisch exakt lösen, wobei diese Lösung jedoch keinen Phasenübergang erlaubt, welcher das Phänomen der spontanen Magnetisierung ohne äußerem Magnetfeld hätte erklären können. Ein Phasenübergang tritt erst im zweidimensionalen Fall auf, welcher 1944 von L. Onsager gelöst werden konnte [45].

6.1.3. XY-Modell. Einen weiteren Spezialfall des anisotropen Heisenbergmodells stellt das XY-Modell dar:

$$H_{XY} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \left[(1 + \gamma) \sigma_i^x \sigma_j^x + (1 - \gamma) \sigma_i^y \sigma_j^y \right] - h \sum_{i=1}^N \sigma_i^z. \quad (6.1.5)$$

Für den eindimensionalen Fall, also einer unendlich langen Spinkette ist die analytische Lösung der reduzierten Zwei-Qubit-Dichteoperatoren bei endlicher Temperatur bekannt [46, 47, 48]. Diese Lösung wird im neunten Kapitel verwendet und ist dort explizit angeführt.

6.2. Thermisches Gleichgewicht

Ziel dieser Diplomarbeit ist die Untersuchung der Verschränkungseigenschaften von Spinsystemen im thermischen Gleichgewicht mit einem Wärmebad der Temperatur T . Dabei findet kein Teilchenaustausch zwischen dem Spinsystem und der Umgebung statt, d.h. die Anzahl der Teilchen bleibt konstant und wir betrachten somit ein kanonisches Ensemble. Die Dichtematrix eines solchen Gibbszustands ist allein durch den Hamiltonoperator H und der Temperatur T bestimmt:

$$\rho(T) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}, \quad (6.2.1)$$

mit $\beta = \frac{1}{k_B T}$ und der Zustandssumme $Z = \text{Tr} [e^{-\beta H}]$.

Beim Grenzübergang $T \rightarrow \infty$ geht der Gibbszustand in den maximal gemischten Zustand über und ist somit separabel.

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \rho(T) = \frac{\mathbb{1}}{\dim(\mathcal{H})}. \quad (6.2.2)$$

Für den Grenzübergang $T \rightarrow 0$ erhalten wir den Projektor auf den Grundzustand falls eben dieser nicht entartet ist und somit einen reinen Zustand, also $\rho(0) = |\phi_0\rangle\langle\phi_0|$. Wenn jedoch eine m -fache Entartung auftritt, so erhalten wir beim Temperaturnullpunkt eine gleichverteilte Mischung zwischen den m Grundzuständen.

$$\lim_{T \rightarrow 0} \rho(T) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m |\phi_0^j\rangle\langle\phi_0^j|. \quad (6.2.3)$$

Betrachten wir nun die Abhängigkeit der Verschränkungseigenschaften von der Temperatur. Wenn wir nicht gerade vom trivialen Fall eines bei allen Temperaturen separablen Systems ausgehen, so werden wir verschiedene kritische Temperaturen finden, bei denen ein Übergang zwischen verschränkten und separablen Gibbszuständen stattfindet. In [49] finden sich folgende Definitionen solcher Übergangstemperaturen:

- Es ist klar, dass es zu jedem Hamiltonoperator eine endliche Temperatur $0 \leq T_S < \infty$ geben muss, ab welcher jeder Gibbszustand $\rho(T \geq T_S)$ aufgrund der Nähe zum maximal gemischten Zustand $\frac{\mathbb{1}}{\dim(\mathcal{H})}$ separabel ist.

- T_E hingegen bezeichnet jene Temperatur, unterhalb der alle Gibbszustände $\rho(0 \leq T < T_E)$ verschränkt sind, während $\rho(T_E)$ selbst separabel ist.

Damit lassen sich nun verschiedene Szenarien beschreiben. Im trivialen Fall $T_E = T_S = 0$ existiert bei keiner Temperatur ein verschränkter Zustand.

Ist der Grundzustand separabel, also $T_E = 0$, so kann dennoch bei höheren Temperaturen Verschränkung auftreten. Es gibt demnach eine Temperatur $0 < T_1 < T_S$ bei welcher ein Übergang zu verschränkten Gibbszuständen stattfindet. Auch mehrere Übergänge sind möglich, für 2×3 Systeme ist in [49] ein Beispiel angegeben.

Liegt hingegen ein verschränkter Grundzustand vor, muss $T_E > 0$ sein. Im Standardfall ist dabei $T_E = T_S$, es findet nur ein einzelner Übergang von verschränkten hin zu separablen Zuständen bei Erhöhung der Temperatur statt. Für $T_E < T_S$ müssen hingegen weiter Übergänge stattfinden, auch dafür lassen sich Beispiele in 2×3 bzw. 2×2 Dimensionen finden [49, 50].

KAPITEL 7

Spincluster

In diesem Kapitel betrachten wir einige kleine Spinsysteme und untersuchen deren Verschränkungseigenschaften sowohl im Grundzustand als auch im thermischen Gleichgewicht. Derartige Systeme sind aber nicht nur von theoretischem Interesse, vielmehr können in der Natur tatsächlich Anwendungsfälle für solche Modelle gefunden werden. Hier wären etwa die sogenannten Nanomagnete zu nennen, deren magnetische Eigenschaften in erster Linie durch kleine, von einander isolierte Cluster aus wenigen Spins bestimmt werden. Eine Übersicht über solche molekularen Magnete ist in [51] gegeben. Für die jeweiligen untersuchten Systeme werden noch explizit Beispiele angeführt. Da sich deren Dichteoperatoren zumindest numerisch direkt berechnen lassen, können wir die im ersten Teil vorgestellten operativen Separabilitätskriterien anwenden.

7.1. 3-Spin- $\frac{1}{2}$ -Cluster

Wir beginnen zunächst mit einem relativ einfachen System bestehend aus drei Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen mit isotroper antiferromagnetischer Heisenbergwechselwirkung. Der Hamiltonoperator lautet demnach

$$H_I = \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + \vec{\sigma}_2 \cdot \vec{\sigma}_3 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_3. \quad (7.1.1)$$

Ein Beispiel für eine derartige Wechselwirkung liefert beispielsweise die Verbindung $Cu_3(O_2C_{16}H_{23})_6 \cdot 1.2 C_6H_{12}$, bei welcher jeweils drei Kupferionen in jedem Molekül ein solches Spin- $\frac{1}{2}$ -Trimer bilden [52].

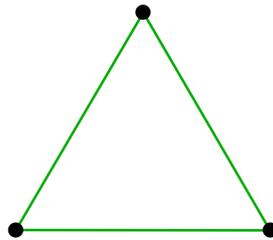


ABBILDUNG 7.1.1. 3-Spin- $\frac{1}{2}$ -System mit Heisenbergwechselwirkung

Weiters setzen wir dieses System einem externen Magnetfeld variabler Stärke h aus, um dessen möglichen Einfluss auf die Verschränkungseigenschaften zu beobachten. Hinzu kommt also ein Term der Form

$$H_B = h(\sigma_1^z + \sigma_2^z + \sigma_3^z), \quad (7.1.2)$$

und wir erhalten den Gesamthamiltonoperator

$$H = H_I + H_B. \quad (7.1.3)$$

Die Verschränkungseigenschaften dieses Systems werden wir nun etwas genauer untersuchen.

7.1.1. Grundzustand.

7.1.1.1. *Grundzustand ohne Magnetfeld ($h = 0$).* Betrachten wir zunächst den Grundzustand des Systems bei abgeschaltetem Magnetfeld. Es weist offensichtlich Frustration auf, da eine durchgehend antiparallele Anordnung der Spins, welche sich durch die antiferromagnetische Wechselwirkung eigentlich einstellen müsste, nicht möglich ist. Der Grundzustand ist in Folge vierfach entartet zum Eigenwert -3 mit der Eigenbasis:

$$|\phi_0^1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|110\rangle - |011\rangle), \quad (7.1.4)$$

$$|\phi_0^2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(2|101\rangle - |110\rangle - |011\rangle), \quad (7.1.5)$$

$$|\phi_0^3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|100\rangle - |010\rangle), \quad (7.1.6)$$

$$|\phi_0^4\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(2|010\rangle - |001\rangle - |100\rangle). \quad (7.1.7)$$

Demnach erhalten wir am Temperaturnullpunkt ein Zustandsgemisch, das in der Standardbasis folgender Dichtematrix entspricht:

$$\rho_{I,0} = \frac{1}{12} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.1.8)$$

Bezüglich einer bipartiten Aufspaltung - aufgrund der Symmetrie des Systems sind alle bipartiten Aufspaltungen äquivalent - weist $\rho_{I,0}$ Verschränkung nach dem Peres-Horodecki-Kriterium auf: Unter Anwendung der partiellen Transposition erhalten wir eine Matrix $\rho_{I,0}^{TA}$ mit negativen Eigenwerten

($-\frac{1}{12}$) bzw. mit einer Spurnorm von $\frac{4}{3}$. Mit dem CCNR-Kriterium hingegen lässt sich keine Verschränkung nachweisen, denn nach Anwendung der zugehörigen Umsortierung der Dichtematrix erhalten wir eine Spurnorm von $\sqrt{\frac{1}{6} + \frac{1}{2}} \approx 0,9082$. Von den unabhängigen Permutationen für drei Parteien bleibt neben der bereits genannten Partiellen Transposition nur noch das Reshuffling zwischen zwei Subsystemen übrig. Auch hiermit kann Verschränkung nachgewiesen werden, die Spurnorm der auf diese Weise umsortierten Matrix beträgt ungefähr 1,2152.

7.1.1.2. *Grundzustand mit Magnetfeld ($h > 0$).* Das Magnetfeld hebt die Entartung des Grundzustands teilweise auf:

- Im Intervall $0 < h < 3$ ist dieser nur mehr zweifach entartet. Im gesamten Bereich bleibt die Verschränkung konstant und ist quantitativ höher als im Fall des ungestörten Hamiltonoperators H_I . Die Spurnorm nach partieller Transposition beträgt $1 + \frac{\sqrt{2}}{3}$, der kleinste Eigenwert ist nun $-\frac{\sqrt{2}}{6}$. Auch das CCNR-Kriterium detektiert nun Verschränkung bei einer Spurnorm von $\frac{2+\sqrt{8}+\sqrt{10}}{6} \approx 1,3317$ ebenso wie das Reshuffling (Spurnorm $\approx 1,5129$).
- Bei $h = 3$ erhält man einen dreifach entarteten Grundzustand. Abgesehen vom CCNR-Kriterium kann auch hier noch Verschränkung nachgewiesen werden, wenn auch auf niedrigerem Niveau verglichen mit $h = 0$.
- Ist h jedoch größer als 3, so dominiert das externe Magnetfeld über die antiferromagnetische Heisenbergwechselwirkung: Alle Spins richten sich parallel zum Magnetfeld aus und die Entartung des Grundzustands wird komplett aufgehoben. Dabei handelt es sich dann um den reinen und separablen Zustand $|\phi_0\rangle = |111\rangle$.

7.1.2. Gibbszustand. Wenden wir uns nun den Verschränkungseigenschaften des Systems bei endlichen Temperaturen $T > 0$ zu. Sämtliche Ergebnisse basieren auf numerischen Berechnungen, wobei die Stärke des Magnetfeldes h im Intervall $[0, 5]$ in Schritten der Länge 0,01 und die Temperatur, genauer kT , im Intervall $[0,05, 6]$ mit derselben Auflösung variiert wurde. Da nach [50] durchaus auch in kleinen Systemen mit steigender Temperatur mehrfache Übergänge zwischen verschränkten und separablen Zuständen stattfinden können, wurde in entsprechend größeren Schritten bis zu einer Temperatur von $kT = 50$ überprüft, ob oberhalb des untersuchten Temperaturintervalls noch verschränkte Zustände gefunden werden können, dies war jedoch nicht der Fall. Im Detail erhalten wir für die einzelnen Kriterien folgende Ergebnisse:

7.1.2.1. *Peres-Horodecki-Kriterium.* Wir beginnen mit dem bekanntesten aller operativen Separabilitätskriterien, dem Peres-Horodecki-Kriterium, hierfür wird in Abbildung 7.1.2 die Spurnorm nach partieller Transposition der Dichtematrizen für verschiedene Werte von h und T mit Hilfe einer Farbskala dargestellt.

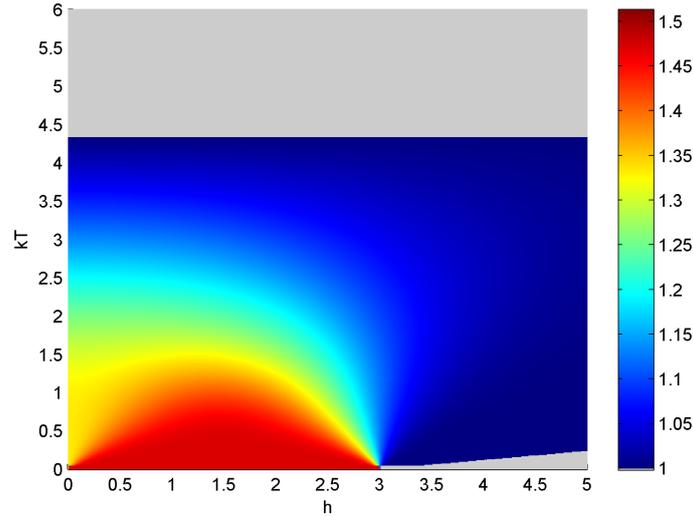


ABBILDUNG 7.1.2. Peres-Horodecki-Kriterium: Spurnorm nach partieller Transposition der Dichtematrix in Abhängigkeit der Magnetfeldstärke h und der Temperatur T . Die grauen Flächen stellen jene Bereiche dar, bei welchen die Spurnorm kleiner als $1 + \epsilon$ (mit $\epsilon = 10^{-15}$) ist. Von den Zuständen im oberen Bereich kann tatsächlich davon ausgegangen werden, dass diese PPT sind, beim grauen Bereich in der rechten unteren Ecke handelt es sich hingegen um NPT-Zustände, wie in Folge noch gezeigt wird.

Auffallend ist, dass die Spurnorm und somit die Stärke der Verletzung des Separabilitätskriteriums vom Magnetfeld abhängt, aber andererseits eine davon unabhängige Übergangstemperatur $kT_S^{PPT} \approx 4,34$ existiert, ab welcher alle Zustände eine Spurnorm von 1 aufweisen, also PPT-Zustände sind. Dies lässt sich wie folgt erklären:

THEOREM 7.1.1. *Kommutiert der Hamiltonoperator H_I eines ungestörten Spinsystems mit dem eines externen Magnetfeldes H_B , so hat die Stärke des Magnetfeldes h keinen Einfluss darauf, ob ein Gibbszustand $\rho(T > 0)$ des gestörten Systems PPT oder NPT ist:*

$$[H_I, H_B] = 0 \quad \implies \quad \rho(T, h = 0) \text{ ist PPT.} \quad \Leftrightarrow \quad \rho(T, h \neq 0) \text{ ist PPT.}$$

BEWEIS. Es sei also $[H_I, H_B] = 0$, wobei wir o.B.d.A. ein Magnetfeld in z -Richtung wählen. Damit können wir die Dichtematrix umformen:

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}(T) &= \frac{1}{Z} e^{-\beta(H_I+H_B)} \\ &= \frac{1}{Z} e^{-\frac{1}{2}\beta H_B} e^{-\beta H_I} e^{-\frac{1}{2}\beta H_B} \\ &= \sqrt{\frac{\tilde{Z}}{Z}} e^{-\frac{\beta h}{2}\sigma_N^z} \dots e^{-\frac{\beta h}{2}\sigma_1^z} \left(\frac{1}{Z} e^{-\beta H_I} \right) \sqrt{\frac{\tilde{Z}}{Z}} e^{-\frac{\beta h}{2}\sigma_1^z} \dots e^{-\frac{\beta h}{2}\sigma_N^z},\end{aligned}\tag{7.1.9}$$

mit $Z = \text{Tr} [e^{-\beta(H_I+H_B)}]$, $\tilde{Z} = \text{Tr} [e^{-\beta H_I}]$ und der Teilchenzahl N .

Die einzelnen ${}^{2N}\sqrt{\frac{\tilde{Z}}{Z}} e^{-\frac{\beta h}{2}\sigma_j^z}$ sind hermitesche Operatoren der Form $a(\beta, h)\mathbb{1} - b(\beta, h)\sigma_j^z$ mit $a, b \in \mathbb{R}_{>0}$ und können als lokale Filter F_j aufgefasst werden, die einem Anschalten eines Magnetfeldes entsprechen. Analog kann man einen lokalen Filter $\tilde{F}_j = {}^{2N}\sqrt{\frac{\tilde{Z}}{Z}} e^{+\frac{\beta h}{2}\sigma_j^z}$ der Form $\tilde{a}(\beta, h)\mathbb{1} + \tilde{b}(\beta, h)\sigma_j^z$ definieren, entsprechend dem Abschalten des Magnetfeldes. Derartige Filteroperationen können keinen PPT-Zustand in einen NPT-Zustand überführen:

Sei ρ in einer Produktbasis gegeben, also $\rho = \sum_i \lambda_i G_i^A \otimes G_i^B$ und $\tilde{\rho} = F_A \otimes F_B \rho F_A^\dagger \otimes F_B^\dagger$, worauf wir die partielle Transposition anwenden:

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}^{TA} &= \left(F_A \otimes F_B \rho F_A^\dagger \otimes F_B^\dagger \right)^{TA} \\ &= \sum_i \lambda_i \left(F_A G_i^A F_A^\dagger \right)^T \otimes F_B G_i^B F_B^\dagger \\ &= \sum_i \lambda_i F_A^* G_i^A F_A^T \otimes F_B G_i^B F_B^\dagger \\ &= F_A^* \otimes F_B \rho^{TA} F_A^T \otimes F_B^\dagger.\end{aligned}\tag{7.1.10}$$

$\mathbb{1}$ und σ^z sind invariant unter komplexer Konjugation und Transposition, also gilt $F = F^* = F^T = F^\dagger$ und weiters

$$\tilde{\rho}^{TA} = F_A \otimes F_B \rho^{TA} F_A^\dagger \otimes F_B^\dagger.\tag{7.1.11}$$

Für Magnetfeldkomponenten in x - oder y -Richtung ist zu beachten, dass σ^x unter Transposition und σ^y unter komplexer Konjugation das Vorzeichen ändert, es gilt also

$$\tilde{\rho}^{TA} = \tilde{F}_A \otimes F_B \rho^{TA} \tilde{F}_A^\dagger \otimes F_B^\dagger,\tag{7.1.12}$$

mit $\tilde{F}_A \simeq \sum_{j \text{ von } A} {}^{2N}\sqrt{\frac{\tilde{Z}}{Z}} e^{+\frac{\beta h}{2}\sigma_j^{x,y}}$, was aber wiederum eine Filteroperation darstellt. Außerdem gilt für alle Dichteoperatoren X

$$X \geq 0 \iff F X F^\dagger \geq 0.\tag{7.1.13}$$

Somit folgt aus $\rho^{TA} \geq 0$, d.h. ρ ist ein PPT-Zustand, dass auch $\tilde{\rho}$ PPT ist.

Daher kann allein durch das Anschalten eines Magnetfelds bei endlichen Temperaturen kein Übergang von PPT-Zuständen hin zu NPT-Zuständen stattfinden, wenn der Hamiltonoperator H_I des ungestörten Systems mit dem des Magnetfelds kommutiert. Die obige Argumentation gilt auch dann noch, wenn der ursprüngliche Operator H_I eine zusätzlich Komponente entsprechend einem Magnetfeld in entgegengesetzter Richtung zu H_B enthält. Da in diesem Fall das Gesamtmagnetfeld mit steigendem h geschwächt wird, kann man die Behauptung insoweit verallgemeinern, als dass keine Änderung des Magnetfelds einen PPT- in einen NPT-Zustand umwandeln kann, was zu zeigen war. \square

Für unser System muss nur noch gezeigt werden, dass der Hamiltonoperator des isotropen Heisenbergmodells tatsächlich mit dem eines (homogenen) Magnetfelds kommutiert. Dazu betrachten wir den Kommutator $[\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2, \sigma_1^z + \sigma_2^z]$, der verschwindet, wie sich mit Hilfe der bekannten Eigenschaften der Paulimatrizen einfach ausrechnen lässt:

$$\begin{aligned}
[\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2, \sigma_1^z + \sigma_2^z] &= [\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y + \sigma_1^z \sigma_2^z, \sigma_1^z + \sigma_2^z], \\
&= [\sigma_1^x \sigma_2^x, \sigma_1^z] + [\sigma_1^y \sigma_2^y, \sigma_1^z] + [\sigma_1^z \sigma_2^z, \sigma_1^z] \\
&\quad + [\sigma_1^x \sigma_2^x, \sigma_2^z] + [\sigma_1^y \sigma_2^y, \sigma_2^z] + [\sigma_1^z \sigma_2^z, \sigma_2^z], \\
&= -2i\sigma_1^y \sigma_2^x + 2i\sigma_1^x \sigma_2^y + 0 \\
&\quad -2i\sigma_1^x \sigma_2^y + 2i\sigma_1^y \sigma_2^x + 0, \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{7.1.14}$$

Die analogen Rechnungen für die anderen Komponenten des Magnetfeldes ergeben ebenfalls Null, demnach lässt sich Theorem 7.1.1 auf unser System anwenden.

Dass ein solcher nicht erlaubter Übergang in Abbildung 7.1.2 im Bereich $h > 3$ bei kleinen Temperaturen offenbar trotzdem auftritt, kann dadurch erklärt werden, dass das Produkt βh im Exponenten der lokalen Filter zu groß wird und die verbleibende Verschränkung deshalb soweit abnimmt, dass diese innerhalb der numerischen Genauigkeit nicht mehr detektiert werden kann.

Behauptung: Die im Beweis genannten Filteroperationen können, da sie nur lokal auf die einzelnen Subsysteme wirken, keine Verschränkung erzeugen, d.h. keine (bi-)separablen Zustände in verschränkte überführen. Dies ist insofern interessant, als dass gezeigt werden kann, dass in unserem System bei abgeschaltetem Magnetfeld die thermischen Zustände positiver partieller Transposition auch biseparabel sind.

Diese Behauptung geht aus einer von T. Eggeling und R. F. Werner in [53] bewiesenen Eigenschaft $U \otimes U \otimes U$ -symmetrischer tripartiter Systeme hervor:

THEOREM 7.1.2. *Sei $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A^d \otimes \mathcal{H}_B^d \otimes \mathcal{H}_C^d$ ein aus drei Subsystemen beliebiger, aber endlicher Dimension d zusammengesetzter Hilbertraum. Weiters sei W die Untermenge aller Operatoren ρ auf \mathcal{H} , welche invariant unter Transformationen der Form $U \otimes U \otimes U$ sind, mit den unitären Operatoren U auf \mathcal{H}^d . Dann ist jeder Zustand $\rho \in W$ biseparabel bezüglich einer bestimmten Aufspaltung, beispielsweise $A|BC$, der PPT bezüglich dieser Aufspaltung, und invariant unter Vertauschung $V_{(BC)}\phi_A \otimes \phi_B \otimes \phi_C = \phi_A \otimes \phi_C \otimes \phi_B$ der Subsysteme innerhalb der zusammengesetzten Partei ist, also $V_{(BC)}\rho = \rho$.*

Da die thermischen Zustände des ungestörten Heisenbergmodells beide Invarianzen erfüllen, wissen wir, dass alle PPT-Zustände biseparabel bezüglich aller Aufspaltungen sind. Weiters wissen wir, dass das Anschalten des Magnetfelds an der Separabilität nichts ändert, also der gesamte Bereich in Abbildung 7.1.2 ab der Grenztemperatur $kT_S^{bisep.} = kT_S^{PPT} \approx 4,34$ biseparabel sein muss.

Nachdem das Peres-Horodecki-Kriterium bereits enge Grenzen bezüglich der Verschränkungseigenschaften des Systems gesetzt hat, betrachten wir nun ein paar weitere Kriterien.

7.1.2.2. PPT-symmetrische Erweiterungen. Es bietet sich gerade zu an, die oben behauptete Biseparabilität der PPT-Zustände des Systems mit Hilfe PPT-symmetrischer Erweiterungen zu überprüfen. Auch wenn wir uns dabei auf den zweiten Schritt in der Hierarchie PPT-symmetrischer Erweiterungen beschränken, also lediglich den Fall einer zusätzlichen Kopie eines der beiden Subsysteme betrachten, wofür wir das in Kapitel 2, Abschnitt 2.2 erwähnte Programm [18] verwenden, können wir aufgrund der Laufzeit des semidefiniten Programms nicht den gesamten gewählten Bereich überprüfen. Daher schränken wir uns weiters auf jene Zustände ein, welche bei, bzw. nur einen Temperaturschritt unterhalb von T_S^{PPT} liegen und stellen fest, dass alle getesteten PPT-Zustände im Gegensatz zu den NPT-Zuständen PPT-symmetrischen Erweiterung besitzen und das Kriterium die Übergangstemperatur somit bestätigt.

7.1.2.3. *CCNR-Kriterium.* Fahren wir nun mit dem CCNR-Kriterium fort, mit welchem ebenfalls die biseparable Verschränkung zwischen einem einzelnen und den beiden übrigen Qubits überprüft werden kann, wobei wir natürlich erwarten, keinen PPT-verschränkten Zustand zu finden. Wie in Abbildung 7.1.3 zu sehen ist, fällt der Bereich verschränkter Zustände wesentlich kleiner aus als beim Peres-Horodecki-Kriterium und ist tatsächlich komplett im Bereich der NPT-Zustände enthalten. Auffällig ist, dass keine Zustände bei starkem ($h > 3$) oder komplett fehlenden ($h = 0$) Magnetfeld detektiert werden.

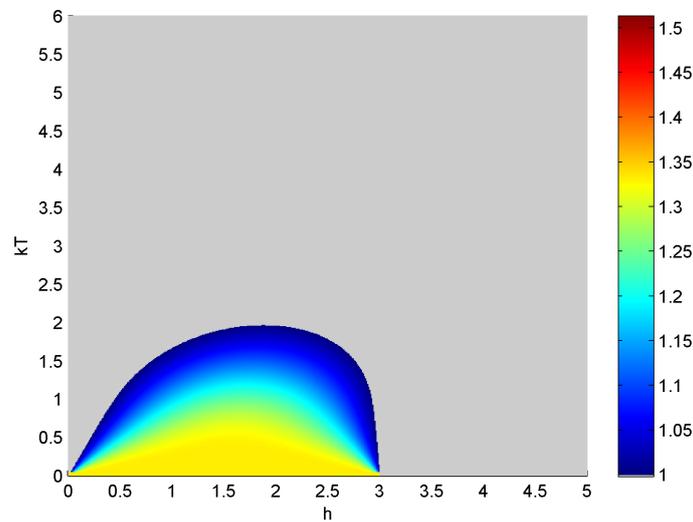


ABBILDUNG 7.1.3. CCNR-Kriterium: Die graue Fläche stellt jenen Bereich dar, bei welchem die Spurnorm der umsortierten Dichtematrix ≤ 1 ist, das Kriterium demnach keine Verschränkung detektiert. Die Spurnorm im farbigen Bereich ist entsprechend der Skala größer als 1, womit bipartite Verschränkungen nachgewiesen ist.

7.1.2.4. *Reshuffle zweier Spins:* Wie aus Abbildung 7.1.4 ersichtlich, kann mit dem Reshuffle zweier Qubits ein deutlich größerer Bereich von verschränkten Zuständen gefunden werden. Das Kriterium erkennt Verschränkung auch beim ungestörten Heisenbergmodell ($h = 0$), jedoch wird für $h > 3$ nur ein kleiner Bereich als verschränkt erkannt. Dieses Permutationskriterium ist im Gegensatz zum Realignmentkriterium keiner bipartiten Aufspaltung zuordenbar und könnte demnach auch biseparable (PPT-)Zustände detektieren, was aber hier nicht der Fall ist.

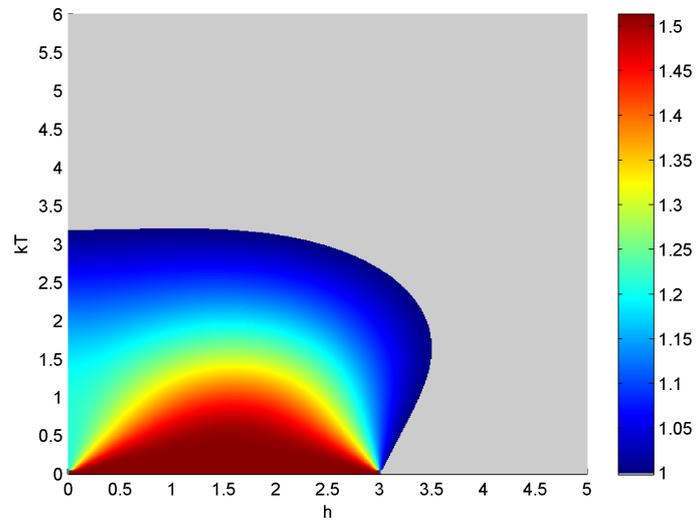


ABBILDUNG 7.1.4. Reshuffle zweier Qubits: Hier gilt die selbe Farbskalierung wie bei den übrigen Permutationskriterien (Peres-Horodecki, CCNR)

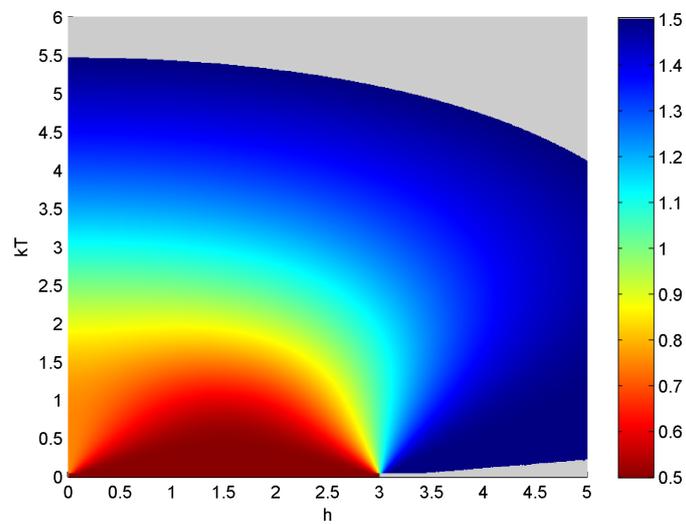


ABBILDUNG 7.1.5. Spin-Squeezing-Ungleichung 3.2.10: Die grauen Flächen markieren jenen Bereich, in welchem die Ungleichung nicht verletzt wird, also auch keine Verschränkung nachgewiesen wird.

7.1.2.5. *Spin-Squeezing-Ungleichung.* Überraschend gut zur Detektion von verschränkten Zuständen in Systemen mit Heisenbergwechselwirkung eignet sich die Spin-Squeezing-Ungleichung (3.2.10) aus Kapitel 3, Abschnitt 2.3, welche ein Minimum für die Varianz der Gesamtspinkomponenten vorgibt. In einem 3-Spin- $\frac{1}{2}$ -System gilt für alle vollseparablen Zustände:

$$(\Delta J_x)^2 + (\Delta J_y)^2 + (\Delta J_z)^2 \geq \frac{3}{2}. \quad (7.1.15)$$

In Abbildung 7.1.5 werden die Zustände dem Grad der Verletzung dieser Ungleichung nach farblich skaliert dargestellt. Dabei ist leicht zu erkennen, dass der Bereich der von diesem Kriterium detektierten verschränkten Zustände größer als bei den übrigen Kriterien ist. Zur besseren Übersicht sind die Grenztemperaturen aller verwendeten Kriterien zusammen in Abbildung 7.1.6 zu sehen. Wie aus dieser Abbildung deutlich hervorgeht, lassen sich bis zu einem Wert von $h \approx 4,70$ auch Zustände mit positiver partieller Transposition finden, welche die Spin-Squeezing-Ungleichung verletzen, womit die Existenz gebundener Verschränkung nachgewiesen ist. Da jene Zustände darüber hinaus auch biseparabel bezüglich aller Aufspaltungen sind, muss eine Form multipartiter Verschränkung vorliegen.

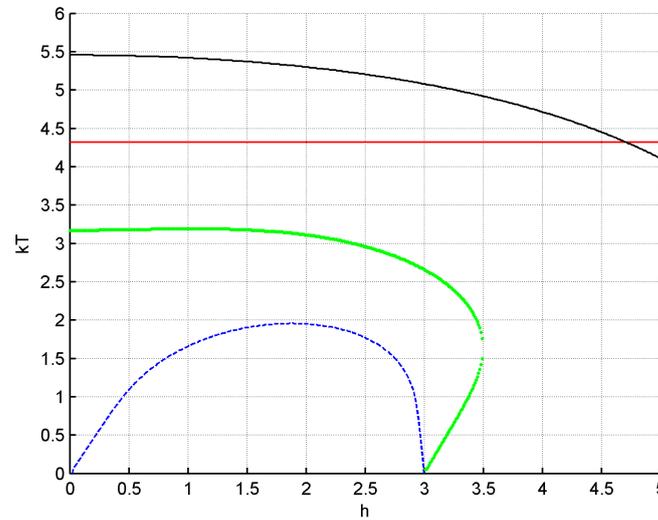


ABBILDUNG 7.1.6. Vergleich der Grenztemperaturen einzelner Kriterien: Spin-Squeezing-Ungleichung (schwarz), Peres-Horodecki (rot), CCNR-Kriterium (blau), Reshuffle (grün)

7.1.3. Zusammenfassung. Das untersuchte System weist bei $T = 0$ ein relativ einfaches Verhalten auf: Bis zu einer Magnetfeldstärke von $h = 3$ ist der Grundzustand entartet und verschränkt, alle verwendeten operativen Separabilitätskriterien werden verletzt. Darüber hinaus dominiert das Magnetfeld über die Heisenbergwechselwirkung, die Spins richten sich parallel aus und man erhält einen reinen vollseparablen Grundzustand. Die thermischen Zustände weisen jedoch unabhängig vom Magnetfeld bis zu einer Grenztemperatur von $kT_S^{PPT} \approx 4,34$ eine negative partielle Transposition auf, über dieser Temperatur sind sie biseparabel. Nur mit Hilfe der Spin-Squeezing-Ungleichung (3.2.10) ist es uns gelungen, auch PPT-verschränkte Zustände nachzuweisen. Somit konnte in diesem gewissermaßen “natürlich” vorkommenden System multipartite gebundene Verschränkung nachgewiesen werden.

7.2. 4-Spin- $\frac{1}{2}$ -Cluster

Wir betrachten jetzt ein System welches sich aus vier Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen zusammensetzt und nehmen wieder eine isotrope antiferromagnetischer Heisenbergwechselwirkung zwischen den nächsten Nachbarn an:

$$H_1 = \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + \vec{\sigma}_2 \cdot \vec{\sigma}_3 + \vec{\sigma}_3 \cdot \vec{\sigma}_4 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_4. \quad (7.2.1)$$

Anstatt einem externen Magnetfeld fügen wir noch einen Term hinzu, welcher die isotrope Heisenbergwechselwirkung zwischen den übernächsten Nachbarn beschreibt, jedoch mit einer unterschiedlichen Austauschkonstante J_2 :

$$H_2 = \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_3 + \vec{\sigma}_2 \cdot \vec{\sigma}_4. \quad (7.2.2)$$

Somit hat der Gesamthamiltonoperator die Form

$$H = J_1 H_1 + J_2 H_2. \quad (7.2.3)$$

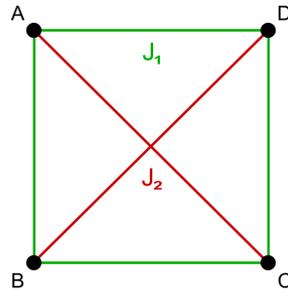


ABBILDUNG 7.2.1. 4-Spin- $\frac{1}{2}$ -System mit Heisenbergwechselwirkung

Auch für diese Wechselwirkungsterme sind Verbindungen bekannt, deren magnetische Eigenschaften sich damit modellieren lassen. Ein Beispiel ist das Polyoxovanadat-Clusteranion $[V_{12}As_8O_{40}(H_2O)]^{4-}$, bei welchem jeweils vier Vanadiumionen ein solches Spin- $\frac{1}{2}$ -Tetramer bilden. Eine aus [54] übernommene Abbildung 7.2.2 veranschaulicht den Aufbau des Clusteranions.

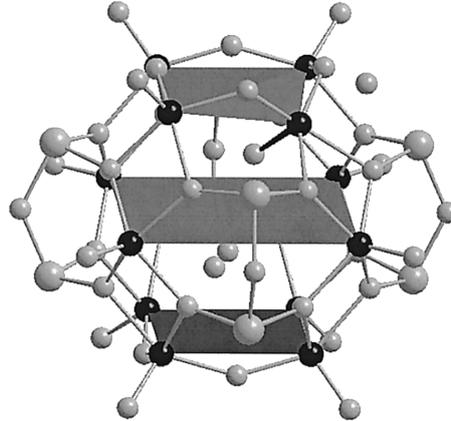


ABBILDUNG 7.2.2. Polyoxovanadat - Clusteranion $[V_{12}As_8O_{40}(H_2O)]^{4-}$: Jeweils vier der insgesamt zwölf Vanadiumionen (schwarz) bilden ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Tetramer. Diese Tetramere bestimmen die magnetischen Eigenschaften der Verbindung [54].

Dieses System wurde bereits von I. Bose und A. Tribedi in [55] auf Verschränkung hin untersucht, jedoch wurden von ihnen noch zusätzliche Terme einer Austauschwechselwirkung variabler Stärke zwischen allen vier Spins mitberücksichtigt. Dazu verwendeten sie unter anderem die magnetische Suszeptibilität des Systems ähnlich einem Verschränkungszeugen, um die Übergangstemperaturen abzuschätzen, oberhalb welcher die Verschränkung zwischen den Qubits verschwindet. Dieses Kriterium wird an entsprechender Stelle erläutert und mit den übrigen Kriterien verglichen.

7.2.1. Grundzustand. Im Gegensatz zum 3-Spin- $\frac{1}{2}$ -System ist der Grundzustand dieses Systems nur für $J_1 = J_2$ entartet. Wir unterscheiden folgende Bereiche:

- $J_1 > J_2$: Das System hat eine Grundzustandsenergie von $E_0 = -8J_1 + 2J_2$ mit dem verschränkter Grundzustand

$$|\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{12}} (|0011\rangle + |0110\rangle + |1001\rangle + |1100\rangle - 2|0101\rangle - 2|1010\rangle),$$
(7.2.4)

es handelt sich hierbei um einen Singulettzustand.

- $J_1 < J_2$: Die Grundzustandsenergie E_0 beträgt $-6J_2$, wobei der zugehörige Grundzustand biseparabel ist:

$$\begin{aligned}
|\phi_0\rangle &= \frac{1}{2} (|0011\rangle - |0110\rangle - |1001\rangle + |1100\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle_{13} - |10\rangle_{13}) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle_{24} - |10\rangle_{24}) \\
&= |\psi^-\rangle_{13} \otimes |\psi^-\rangle_{24}.
\end{aligned} \tag{7.2.5}$$

- $J_1 = J_2$: Hier tritt ein Übergang zwischen den beiden vorherigen Bereichen auf: Der Grundzustand des nun frustrierten Systems ist zweifach entartet zum Eigenwert $-6J_1 = -6J_2$. Die beiden vorher genannten Eigenvektoren bilden eine Orthonormalbasis des zugehörigen Unterraums.

7.2.2. Gibbszustand. Für die Untersuchung des Systems bei endlicher Temperatur $T > 0$ verwenden wir folgende Separabilitätskriterien:

- Die Permutationskriterien von Kapitel 3, Abschnitt 2.1: Von den dort genannten 22 unabhängigen Kriterien müssen aufgrund der Symmetrien des Hamiltonoperators - und damit auch der entsprechenden Dichteoperatoren - nur 9 untersucht werden. Diese sind in Tabelle 1 aufgelistet. Dazu zählen auch das Peres-Horodecki-Kriterium bezüglich aller drei relevanten bipartiten Aufspaltungen, nämlich $A|BCD$, $AB|CD$ und $AC|BD$, und das CCNR-Kriterium bezüglich der beiden letzten Aufspaltungen.
- Hinzu kommen noch drei weitere Reshuffle-Permutationen, nämlich zwischen einem einzelnen Qubit A und einem aus zwei oder drei Qubits zusammengesetzten Subsystem. Im ersten Fall können entweder zwei benachbarte (z.B. BC) oder zwei diagonale Qubits (BD) ein Subsystem bilden, der zweite Fall entspricht dem CCNR-Kriterium bezüglich der Aufspaltung $A|BCD$.
- Außerdem überprüfen wir die Existenz PPT symmetrischer Erweiterungen der jeweiligen Zustände auf eine zusätzliche Kopie eines der jeweiligen Subsysteme. Diesen Test führen wir wegen der relativ langen Laufzeit des dafür notwendigen semidefiniten Programms jedoch wieder nur an den Übergängen von NPT- zu PPT-Zuständen und überdies für weniger Werte von J_2 durch.
- Weiters benutzen wir wie in [55] die magnetische Suszeptibilität des Systems, die für vollseparable Zustände einen bestimmten Wert nicht unterschreiten kann und zeigen, dass diese Separabilitätsbedingung mit der zweiten Spin-Squeezing-Ungleichung, welche schon beim 3-Spin- $\frac{1}{2}$ -Cluster verwendet wurde, übereinstimmt.

- Abschließend wird noch eine Reihe von Verschränkungszeugen angewandt, die auf den Überlapp eines Zustands mit dem verschränkten Grundzustand des Systems zurückzuführen sind.

Typ	1	2
PT	$\circ \vdots$	
2PT	$\circ \vdots$ $\circ \vdots$	$\circ \vdots$ $\vdots \circ$
R	$\downarrow \vdots$	$\searrow \vdots$
R+PT	$\downarrow \circ$	$\searrow \circ$
2R	\rightleftarrows \rightleftarrows	$\downarrow \downarrow$

TABELLE 1. Auflistung aller unabhängigen Permutationskriterien der vier Qubits unter Berücksichtigung der Symmetrie des Systems

Bei den folgenden numerischen Ergebnissen wurde die Austauschkonstante J_1 auf den Wert 1 festgesetzt. J_2 wurde in Schritten von 0,02 im Intervall $[-5, 3]$ variiert, die Temperaturschritte haben eine Länge von 0,025. Eine Ausnahme stellen die PPT-symmetrischen Erweiterungen dar, deren Existenz wieder nur bei jenen PPT-Zuständen, welche einen Temperaturschritt über den NPT-Zuständen liegen, überprüft wird, wobei J_2 außerdem in viel größeren Schritten von 0,5 durchlaufen wird. Dass bei höheren Temperaturen keine weiteren Übergänge zu verschränkten Zuständen mehr stattfinden, wurde zusätzlich in Schritten von 0,1 bis zu einer Temperatur von $kT = 100$ überprüft.

7.2.3. Peres-Horodecki- und CCNR-Kriterium, sowie PPT-symmetrische Erweiterungen. Wir beginnen mit denjenigen Permutationskriterien, welche einer bestimmten bipartiten Aufspaltung zugeordnet werden können, also dem Peres-Horodecki- und dem CCNR-Kriterium. Wie auch bei den übrigen Permutationskriterien kennzeichnen die graue Flächen in den Diagrammen jenen Bereich, in welchem die Spurnorm der permutierten Dichtematrizen kleiner als $1 + \epsilon$ ist (mit $\epsilon = 10^{-14}$), d.h. in welchem innerhalb der möglichen numerischen Genauigkeit das jeweilige Separabilitätskriterium nicht verletzt wird. Eine größere Spurnorm - und somit

ein verschränkter Zustand - wird entsprechend der zugehörigen Skala farblich gekennzeichnet. Zusätzlich wenden wir den Test auf die Existenz PPT-symmetrischer Erweiterungen [18] an, allerdings nur auf diejenigen PPT-Zustände, welche an Bereiche NPT-verschränkter Zustände angrenzen.

7.2.3.1. *Untersuchung bezüglich der bipartiten Aufspaltung A|BCD.* Zuerst betrachten wir die partielle Transposition eines einzelnen Qubits, also den Typ PT in der Tabelle 1, und damit die bipartite Verschränkung zwischen ebendiesem und den restlichen drei Qubits. Das CCNR-Kriterium bezüglich derselben bipartiten Aufspaltung lässt sich durch keine der in dieser Tabelle aufgelisteten Permutationen darstellen, da durch das Zusammenfassen der drei Qubits zu einem Subsystem und der dem CCNR-Kriterium entsprechenden Reshuffle-Operation letztendlich ein Index des zweidimensionalen Subsystems mit dem des achtdimensionalen getauscht wird und so eine nicht quadratische Matrix resultiert, im Gegensatz zu den Permutationen zwischen Indizes einzelner Qubits.

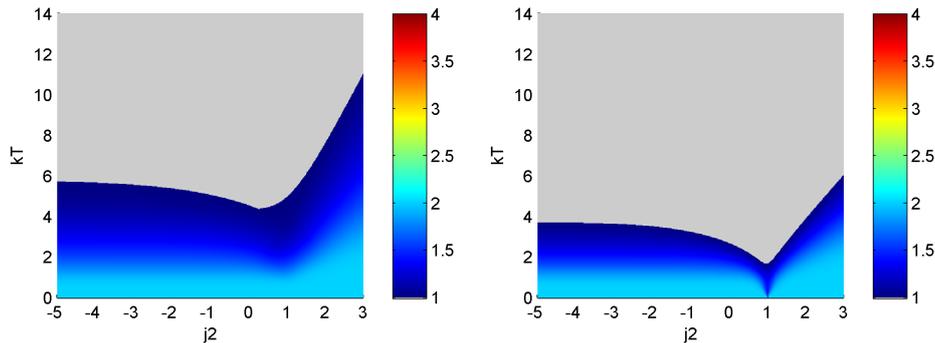


ABBILDUNG 7.2.3. bipartite Verschränkung bzgl. A|BCD:
links: Peres-Horodecki-Kriterium; *rechts:* CCNR-Kriterium;
 Die graue Fläche stellt jenen Bereich dar, bei welchem die Spurnorm der umsortierten Dichtematrix ≤ 1 ist, das Kriterium demnach keine Verschränkung detektiert. Die Spurnorm im farbigen Bereich ist entsprechend der Skala größer als 1, womit die Separabilität verletzt ist.

Es ist deutlich zu erkennen, dass alle vom CCNR-Kriterium detektierten verschränkten Zustände auch NPT-Zustände sind. Auch kann für alle darauf hin untersuchten PPT-Zustände eine PPT-symmetrische Erweiterungen gefunden werden, womit sie dieses Separabilitätskriterium nicht verletzen. Dasselbe gilt auch für die bipartite Aufspaltung in zwei Subsysteme zusammengesetzt aus jeweils 2 Qubits, wobei folgende zwei Fälle unterschieden werden können: Die Aufspaltung AB|CD und AC|BD.

7.2.3.2. *Untersuchung bezüglich der bipartiten Aufspaltung AB|CD.* In diesem Fall bilden jeweils zwei benachbarte Qubits ein Subsystem.

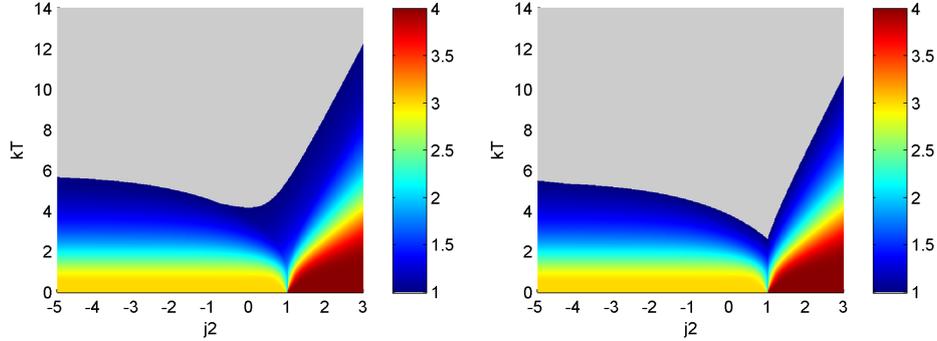


ABBILDUNG 7.2.4. bipartite Verschränkung bzgl. AB|CD:
links: Peres-Horodecki-Kriterium; rechts: CCNR-Kriterium;
Farbskalierung wie in Abbildung 7.2.3

Bemerkung: Es kann durch Nachrechnen gezeigt werden, dass eine Reshuffle-Operation zwischen zwei Subsystemen A und B, zusammengesetzt aus jeweils zwei kleineren Systemen, zwei gleichzeitigen Reshuffle-Operationen auf Ebene der kleinen Systeme zwischen jeweils einem Teilchen aus A und einem aus B entspricht:

$$\rho^A = \rho^1 \otimes \rho^2, \quad (7.2.6)$$

$$\rho^B = \rho^3 \otimes \rho^4, \quad (7.2.7)$$

$$R_{AB} \equiv R_{13} \& R_{24}. \quad (7.2.8)$$

Demzufolge ist das CCNR-Kriterium einer paarweisen Aufspaltungen ident zu einem der Permutationskriterien, welche sich aus zwei Reshuffle-Operationen zusammensetzen, entsprechend dem Typ 2R aus Tabelle 1.

7.2.3.3. *Untersuchung bezüglich der bipartiten Aufspaltung AC|BD.* Der zweite Fall, in welchem zwei gegenüberliegende Qubits ein Subsystem bilden, ist der Interessantere der beiden. Obwohl der Abbildung 7.2.5 nach das Peres-Horodecki-Kriterium einen separablen Bereich unterhalb der konstanten Grenztemperatur $T_S^{PPT} = 5,45\frac{1}{k}$ aufzuweisen scheint, wissen wir, dass dies nicht der Fall ist, was auch gezeigt werden kann:

Im Bereich $J_2 > 1$ ist der Grundzustand biseparabel bezüglich dieser Aufspaltung (7.2.5). Andererseits muss bei endlichen Temperaturen jeder Zustand unterhalb von T_S^{PPT} NPT und somit verschränkt sein, unabhängig von der Größe der Austauschkonstante J_2 . Die Argumentation hierfür kann gleich wie im vorherigen Abschnitt über das 3-Spin- $\frac{1}{2}$ -System geführt werden: Zunächst ist festzuhalten, dass die beiden Terme im Hamiltonoperator

H_2 nur innerhalb eines Subsystems wirken und daher als lokale Filteroperationen aufgefasst werden können. Somit ist nur noch zu zeigen, dass die beiden Teile des Gesamthamiltonoperators H_1 und H_2 miteinander kommutieren. Dies kann wieder leicht durch direktes Ausrechnen des Kommutators erfolgen, worauf wir an dieser Stelle aber verzichten.

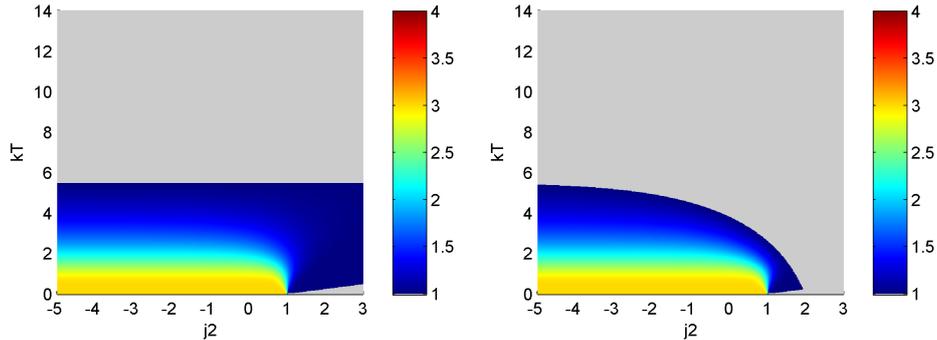


ABBILDUNG 7.2.5. bipartite Verschränkung bzgl. AC|BD:
links: Peres-Horodecki-Kriterium: Der bei niedrigen Temperaturen und $J_2 > 1$ auftretende graue und somit augenscheinlich separable Bereich ist lediglich ein Resultat begrenzter numerischer Genauigkeit und in Wirklichkeit für $T > 0$ NPT-verschränkt. *rechts*: CCNR-Kriterium

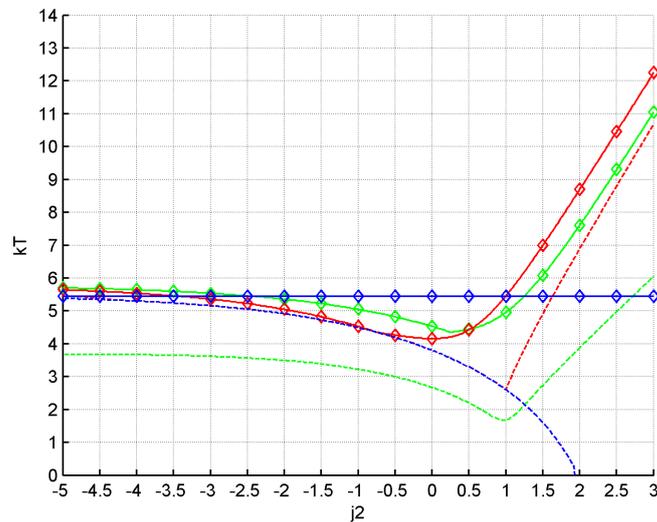


ABBILDUNG 7.2.6. Vergleich der maximalen Temperaturen bei welcher noch bipartite Verschränkung auftritt:
 A|BCD = grün, AB|CD = rot, AC|BD = blau
 Peres-Horodecki-Kriterium: *durchgehende* Linie
 CCNR-Kriterium: *gestrichelte* Linie
 PPT-symmetrische Erweiterungen: *Rauten*

7.2.3.4. *Zusammenfassung - bipartite Verschränkung.* In keiner bipartiten Aufspaltung sind das CCNR-Kriterium oder die Separabilitätsbedingung der PPT-symmetrischen Erweiterungen (um eine zusätzliche Kopie eines Subsystems) dazu in der Lage, PPT-verschränkte Zustände zu detektieren, es können also keine Zustände bipartiter gebundener Verschränkung nachgewiesen werden. Einen besseren Überblick hierfür bietet die Abbildung 7.2.6 in welcher die jeweiligen kritischen Temperaturen der Kriterien miteinander verglichen werden.

7.2.4. übrige Permutationskriterien. Die übrigen Permutationskriterien lassen sich keiner bipartiten Aufspaltung zuordnen, zeigen aber zum Teil ein ähnliches Verhalten wie die bereits genannten Kriterien. Zunächst ist hier der einzelne Reshuffle zwischen zwei entweder benachbarten oder gegenüberliegenden Qubits zu nennen, entsprechend dem Typ R (Abbildung 7.2.7).

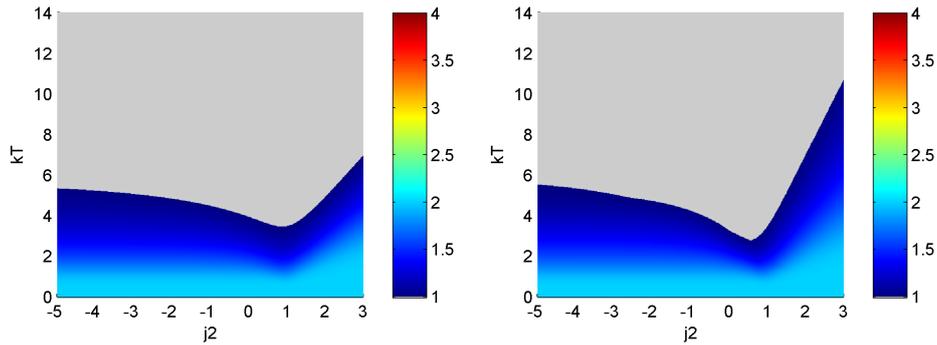


ABBILDUNG 7.2.7. Permutationskriterien vom Typ R, d.h. einzelne Reshuffle-Operation zwischen zwei Qubits
links: benachbarte Qubits; *rechts:* diagonale Qubits; Auch hier kennzeichnen die grauen Flächen Zustände deren Spurnorm nach der Permutation ≤ 1 ist, während die verschränkten Zustände entsprechend ihrer Spurnorm farblich skaliert dargestellt werden.

Weiters entspricht die Kombination der beiden oberen Reshuffle-Operationen mit der partiellen Transposition eines übrigen Qubits ebenfalls wieder zwei neuen unabhängigen Permutationen vom Typ R+PT (Abbildung 7.2.8), womit bereits alle neun unabhängigen Permutationskriterien zwischen den vier einzelnen Subsystemen genannt worden sind.

Ebenfalls denkbar ist eine Reshuffle-Operation zwischen einem aus zwei benachbarten oder gegenüberliegenden Qubits zusammengesetztem Subsystem und einem einzelnen Qubit (Abbildung 7.2.8), womit dann auch alle unabhängigen Permutationen zwischen den drei Subsystemen und in weiterer

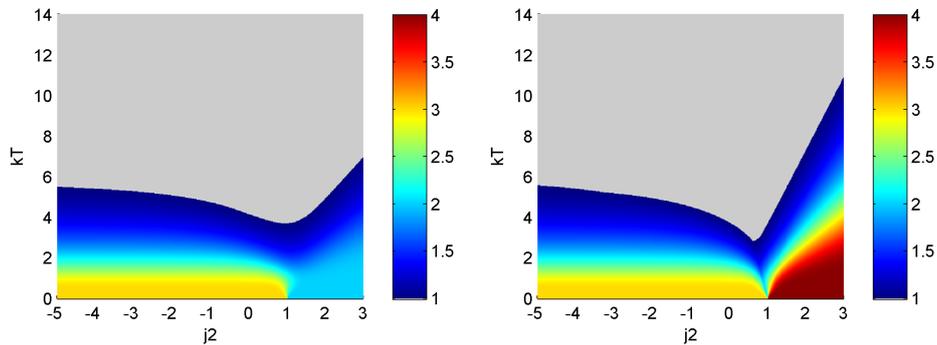


ABBILDUNG 7.2.8. Permutationskriterien vom Typ R+PT: Reshuffle plus partielle Transposition eines übrigen Qubits *links*: R zwischen benachbarten Qubits; *rechts*: zwischen diagonalen Qubits; Farbskalierung wie in Abbildung 7.2.7

Folge alle möglichen unabhängigen Permutationskriterien überhaupt behandelt wurden.

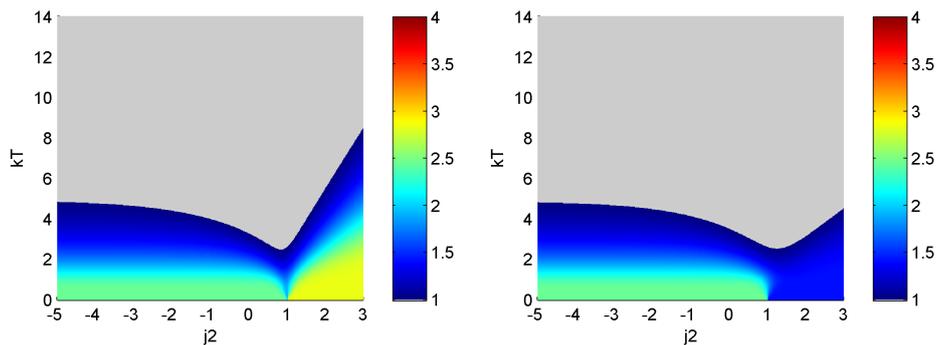


ABBILDUNG 7.2.9. Reshuffle-Operation zwischen einem einzelnen und einem Paar von Qubits: *links*: Benachbarte Qubits bilden ein Paar. *rechts*: Gegenüberliegende Qubits bilden ein Paar. Die übliche Farbskalierung wird verwendet.

Wenn wir die kritischen Temperaturen all jener Permutationskriterien, welche sich keiner bestimmten bipartiten Aufspaltung zuordnen lassen, mit dem Maximum der Grenztemperaturen des Peres-Horodecki-Kriterium über alle Aufspaltungen vergleichen, wie in 7.2.10 dargestellt, stellen wir fest, dass keines davon einen PPT-verschränkten Zustand nachweisen kann.

7.2.5. magnetische Suszeptibilität als Verschränkungszeuge. Bose und Tribedi verwendeten die magnetische Suszeptibilität, um ein ähnliches Spin- $\frac{1}{2}$ -Tetramer zu untersuchen [55]. Wie andere thermodynamische Größen eines Systems auch kann die magnetische Suszeptibilität $\bar{\chi}$ ähnlich einem

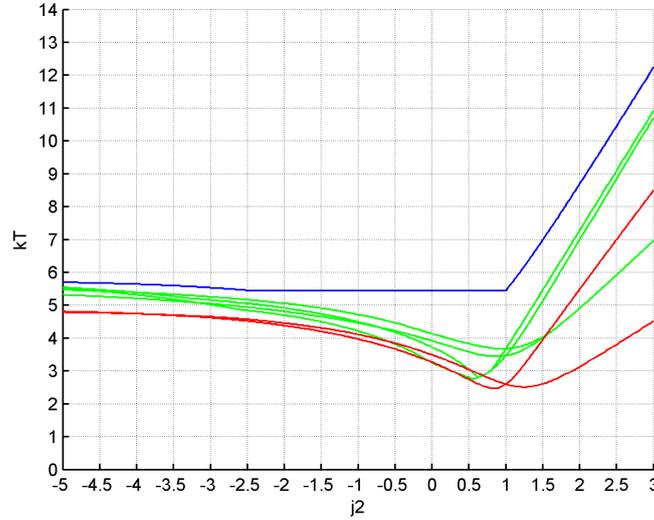


ABBILDUNG 7.2.10. Vergleich der max. Temp. unterhalb welcher folgende Kriterien Verschränkung nachweisen:
 Peres-Horodecki-Kriterium (Max. über alle Aufsp.): *blau*
 Permutationskriterien (Typ R und R+PT): *grün*
 Permutationskriterien (Reshuffle 2 Qubits - 1 Qubit): *rot*

Zeuge für Verschränkung fungieren, was von Wiesniak, Vedral und Brukner in [56] gezeigt wurde. An dieser Stelle sei auf deren Veröffentlichung verwiesen, hier wird nur eine kurze Zusammenfassung angeführt:

Die magnetische Suszeptibilität in eine Raumrichtung z ist über die Magnetisierung $M_z = \sum_{i=1}^N s_i^z$ definiert, wobei mit N die Teilchenzahl und mit \vec{s}_i der Spinvektor des i -ten Teilchens gemeint ist. Für ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen gilt $s_i^j = \frac{1}{2}\sigma_i^j$. Kommutiert der Hamiltonoperator H des Systems mit einem externen Magnetfeld H_B , also $[H, H_B = B \sum_{i=1}^N s_i^z] = 0$, was für unser System zutrifft, so gilt:

$$\chi_z = \beta \Delta^2(M_z) \quad (7.2.9)$$

$$= \beta (\langle M_z^2 \rangle - \langle M_z \rangle^2)$$

$$= \beta \left[\sum_{i,j=1}^N \langle s_i^z s_j^z \rangle - \left\langle \sum_{i=1}^N s_i^z \right\rangle^2 \right]. \quad (7.2.10)$$

Mit den Komponenten χ_x und χ_y wird gleich verfahren. Weiters kann gezeigt werden, dass jeder vollseparable Zustand ρ_{sep} folgender Schranke unterliegt:

$$\bar{\chi}_{\rho_{sep}} = \chi_x + \chi_y + \chi_z \geq \beta N l, \quad (7.2.11)$$

wobei l die Länge des Spinvektors bezeichnet, in unserem Fall also $\frac{1}{2}$. Kürzt man dieser Ungleichung den Parameter β , erhält man genau die in Kapitel

3, Abschnitt 2.3 genannte Spin-Squeezing-Ungleichung (3.2.10), welche wir schon für den 3-Spin- $\frac{1}{2}$ -Cluster verwendet haben:

$$(\Delta J_x)^2 + (\Delta J_y)^2 + (\Delta J_z)^2 \geq \frac{N}{2}. \quad (7.2.12)$$

Bemerkung: Diese Ungleichung ist, wie alle anderen Spin-Squeezing-Ungleichungen, allgemein anwendbar, aber die Identifizierung der auf der linken Seite stehenden Größe mit der magnetischen Suszeptibilität des Systems gelingt nur, wenn der Hamiltonoperator des Systems tatsächlich mit einem externen Magnetfeld in beliebiger Richtung kommutiert. In diesem Fall wäre prinzipiell eine experimentelle Durchführung des Separabilitätskriteriums durch eine direkte Messung der magnetischen Suszeptibilität möglich, wie dies in [57] auch durchgeführt wurde.

Unser System weist außerdem Isotropie auf, somit ist die magnetische Suszeptibilität in allen drei Raumrichtungen gleich:

$$\chi_x = \chi_y = \chi_z. \quad (7.2.13)$$

Daher vereinfacht sich die Ungleichung (7.2.12) in diesem Fall auf

$$\frac{3}{4} \left[2 \sum_{i < j}^N \langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle + N - \left\langle \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \right\rangle^2 \right] \geq \frac{N}{2}, \quad (7.2.14)$$

und mit den Symmetrien unseres Vierteilchensystems gilt letztendlich

$$3 \left[2 \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle + \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle - 4 \langle \sigma_1^z \rangle^2 - 1 \right] \geq 2. \quad (7.2.15)$$

Ist diese Ungleichung für einen Zustand ρ verletzt, so ist dieser verschränkt.

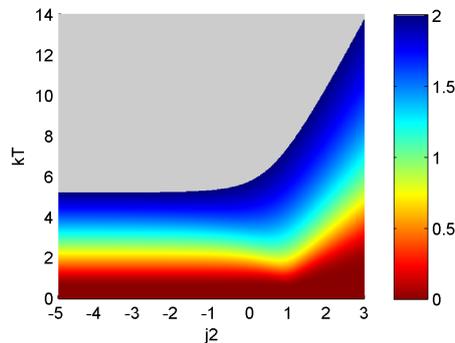


ABBILDUNG 7.2.11. magnetische Suszeptibilität / Spin-Squeezing-Ungleichung: In grauen Bereich ist der Wert der linken Seite der Ungleichung (7.2.15) größer gleich zwei, d.h. Verschränkung wird nicht detektiert.

Numerisch erhalten wir ein interessantes Ergebnis, wie man in Abbildung 7.2.11 erkennen kann. Der Bereich, in welchem die Ungleichung verletzt wird, ist dem Grad der Verletzung nach farblich skaliert. Am Temperaturnullpunkt wird die Verletzung maximal, die magnetische Suszeptibilität bzw. die Varianz der Gesamtspinkomponenten geht gegen Null. Wieder scheint dieses Kriterium äußerst stark zu sein, übertrifft es für $J_2 > -\frac{1}{2}$ sogar das Peres-Horodecki-Kriterium bezüglich aller möglichen Aufspaltungen, womit auch für dieses System gebundene Verschränkung nachgewiesen worden ist. Mittels Abbildung 7.2.14 ist ein anschaulicher Vergleich der Kriterien möglich, zuvor wollen wir aber noch ein weiteres Kriterium betrachten.

7.2.6. Grundzustand als Zeuge. Da der Grundzustand des Systems außer bei $J_1 = J_2$ nicht entartet und überdies verschränkt ist, bietet es sich an den Überlapp eines Zustands $\rho = \frac{1}{Z} \exp(-\beta H)$ mit dem Grundzustand $|\psi_0\rangle$ von H als Verschränkungszeugen zu verwenden. Dies geschieht folgendermaßen:

THEOREM 7.2.1. *Für einen beliebigen verschränkten reinen Zustand $|\psi\rangle$ sei ρ^A der reduzierte Dichteoperator bezüglich eines Subsystems A also*

$$\rho^A = \text{Tr}_B[|\psi\rangle\langle\psi|]. \quad (7.2.16)$$

Sei nun λ der größte Eigenwert von ρ^A , $\lambda = \max(\text{Spec}[\rho^A])$. Dann ist

$$W_{|\psi\rangle}^{A,B} = \lambda \mathbb{1} - |\psi\rangle\langle\psi| \quad (7.2.17)$$

ein Zeuge für die Verschränkung zwischen A und B .

REMARK. Es lässt sich außerdem zeigen, dass der Zeuge $W_{|\psi\rangle} = \tilde{\lambda} \mathbb{1} - |\psi\rangle\langle\psi|$ mit $\tilde{\lambda} = \max_{\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B}(\lambda)$, dem Maximum über alle bipartiten Aufspaltungen $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, Mehrteilchenverschränkung detektieren kann.

Wir verwenden den nicht entarteten Grundzustand des Systems auf diese Art und Weise als Zeuge und erhalten die in 7.2.12 und 7.2.13 abgebildeten Ergebnisse für die drei verschiedenen bipartiten Aufspaltungen und für den gemeinsamen Zeugen mit dem Maximalwert $\tilde{\lambda}$. Dabei werden negative Erwartungswerte farblich skaliert dargestellt, positive Erwartungswerte bleiben grau.

Vergleichen wir die Grundzustandszeugen mit dem Peres-Horodecki-Kriterium, so stellen wir fest, dass auch diese keine PPT-verschränkten Zustände entdecken können. Verdeutlicht wird dies in Abbildung 7.2.14, indem die Grenztemperaturen beider Kriterien paarweise zu allen bipartiten Aufspaltungen mit unterschiedlicher Farbe eingezeichnet werden. Weiters ist zum

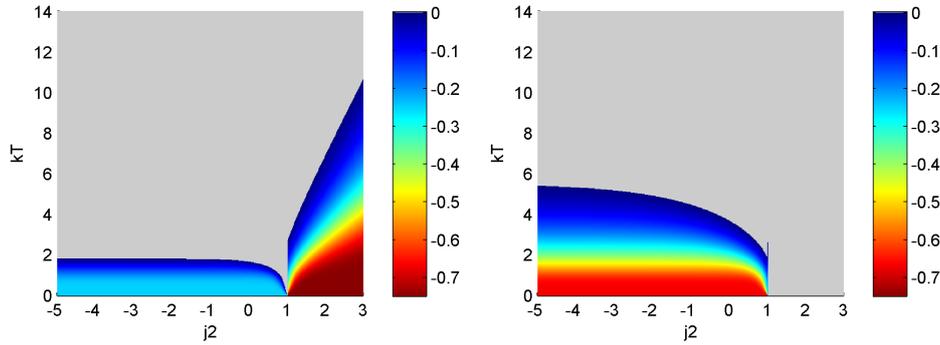


ABBILDUNG 7.2.12. Erwartungswerte der Grundzustandszeugen $W_{|\psi_0\rangle}^{A,B}$: Die Zustände des grauen Bereichs weisen positive Erwartungswerte für die Zeugen auf. Negative Erwartungswerte werden farblich skaliert dargestellt.

links: bezüglich der Aufspaltung AB|CD; *rechts:* AC|BD:

Da für $J_2 > 1$ der Grundzustand biseparabel bezüglich dieser Aufspaltung ist, kann mit dem Zeugen in diesem Bereich keine Verschränkung nachgewiesen werden.

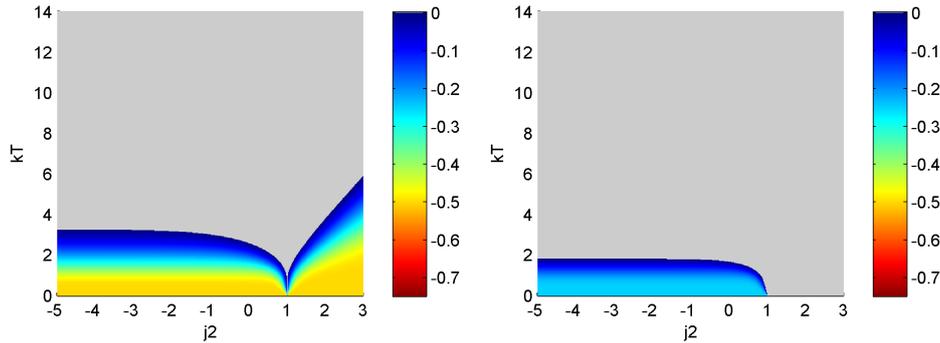


ABBILDUNG 7.2.13. Erwartungswerte der Grundzustandszeugen $W_{|\psi_0\rangle}^{A,B}$: Farbskalierung entsprechend Abbildung 7.2.12

links: Aufspaltung A|BCD; *rechts:* Zeuge mit maximalem $\tilde{\lambda}$: Der farbige Bereich ist bezüglich aller bipartiten Aufspaltungen verschränkt, außerdem ist Mehrteilchenverschränkung vorhanden.

Vergleich der Grenztemperaturverlauf der vorhin genannten Spin-Squeezing-Ungleichung abgebildet.

7.2.7. Zusammenfassung. Insgesamt lässt sich festhalten, dass dieser 4-Spin $\frac{1}{2}$ -Cluster ähnliche Verschränkungseigenschaften aufweist, wie das bereits zuvor untersuchte 3-Spin $\frac{1}{2}$ -System. Wieder lassen sich nur mit Hilfe der Spin-Squeezing-Ungleichung (3.2.10) verschränkte Zustände nachweisen, welche PPT bezüglich aller Aufspaltungen sind, vorausgesetzt es gilt

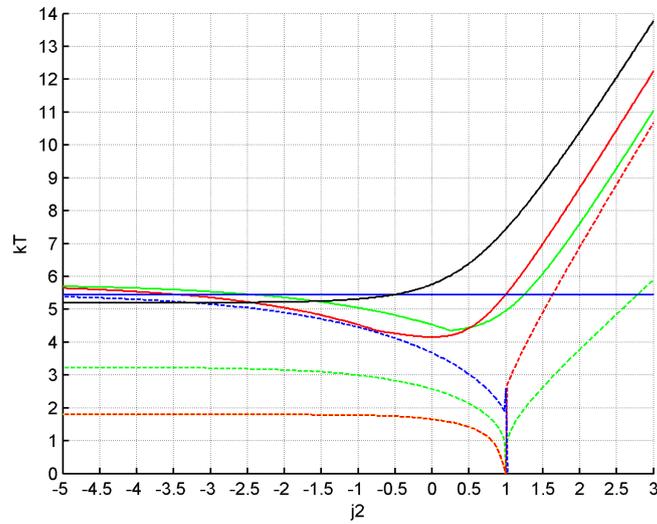


ABBILDUNG 7.2.14. Vergleich der maximalen Temperaturen bei welcher noch Verschränkung auftritt: Farbe je nach Aufspaltung: $A|BCD = \text{grün}$, $AB|CD = \text{rot}$, $AC|BD = \text{blau}$
 Peres-Horodecki-Kriterium: *durchgehende* Linie
 Grundzustandszeugen: *gestrichelte* Linie
 Spin-Squeezing-Ungleichung: *schwarze* Linie

$J_2 > -\frac{1}{2}J_1$. Auch die nun wesentlich größere Anzahl von Permutationskriterien hilft uns diesbezüglich nicht weiter. Jene Kriterien, welche sich einer bestimmten bipartiten Aufspaltung zuordnen lassen, sind auch stets schwächer als das Peres-Horodecki-Kriterium bezüglich dieser Aufspaltung, jedoch können hier die PPT(-verschränkten) Zustände nicht auf Biseparabilität hin untersucht werden. Der Nachweis von Mehrteilchenverschränkung gelingt aber dennoch mit Hilfe der Grundzustandszeugen, zumindest für den Bereich $J_2 < J_1$.

Untersuchung gebunden verschränkter Zustände

Im vorangegangenen Kapitel konnte gezeigt werden, dass das Phänomen gebundener Verschränkung nicht auf spezielle, gewissermaßen konstruierte Dichteoperatoren beschränkt ist, sondern auch in „natürlichen“ Systemen, eben jenen 3- und 4-Qubit-Clustern mit Heisenberg-Wechselwirkung zu finden ist. Nun knüpfen wir an dieser Stelle an und konzentrieren uns auf die Suche solcher gebunden verschränkter Zustände. Dazu untersuchen wir zunächst, wie sich eine Erhöhung der Teilchenzahl dieser Spinsysteme auswirkt, um eventuell Rückschlüsse auf die Verschränkungseigenschaften von Spinketten ziehen zu können. Anschließend betrachten wir bereits bekannte PPT-verschränkte Zustände aus [14], um jene Separabilitätskriterien zu testen, welche bisher keinerlei gebundene Verschränkung nachweisen konnten.

8.1. Spinketten

Bei den aus drei bzw. vier Teilchen bestehenden Spinclustern zeigte sich, dass mit Hilfe der zweiten Spin-Squeezing-Ungleichung PPT- und somit gebunden verschränkte thermische Zustände detektiert werden können. So stellt sich nun die Frage, ob PPT-verschränkte Zustände nur in kleinen Spinclustern zu finden sind, oder auch in größeren, eventuell sogar makroskopischen Systemen. Um dies zumindest abzuschätzen zu können, betrachten wir eine Spinkette mit isotroper antiferromagnetischer Heisenberg- oder XY- Wechselwirkung ausschließlich zwischen direkt benachbarten Qubits, mit periodischen Randbedingungen und mit variabler Teilchenzahl N , welche wir ausgehend von drei bis auf neun erhöhen. Die Hamiltonoperatoren haben also die Form

$$H_{\text{Heisenberg}} = \sum_{i=1}^N \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+1}, \quad (8.1.1)$$

$$H_{XY} = \sum_{i=1}^N \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y. \quad (8.1.2)$$

Zu jedem N werden nun die Übergangstemperaturen der zugehörigen thermischen Zustände bezüglich folgender Kriterien berechnet und in 8.1.1 dargestellt:

- Die Übergangstemperaturen der Spin-Squeezing-Ungleichung (3.2.10) sind in grün gehalten.
- Die Maxima der Übergangstemperaturen des Peres-Horodecki-Kriteriums über alle möglichen bipartiten Aufspaltungen sind mit roter Farbe dargestellt und liegen bei beiden Wechselwirkungen und für alle Teilchenzahlen N stets unterhalb jener der Spin-Squeezing-Ungleichung, womit gleichzeitig auch immer die Existenz gebundener Verschränkung nachgewiesen ist.
- Ganz gleich wird mit dem CCNR-Kriterium verfahren, welches hier in blau dargestellt wird. Hier zeigt sich, dass dessen Übergangstemperaturen deutlich unterhalb jener des Peres-Horodecki-Kriteriums liegen. Auch wenn die einzelnen bipartiten Aufspaltungen für sich verglichen werden, lässt sich mit dem Kriterium kein PPT-verschränkter Zustand finden.

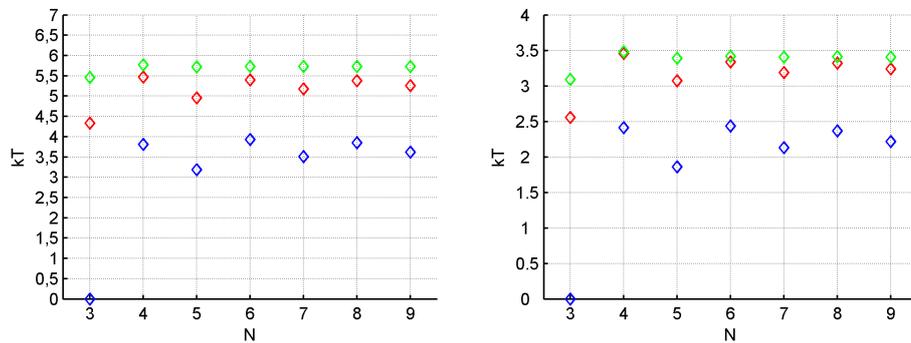


ABBILDUNG 8.1.1. Grenztemperaturen des Heisenbergmodells (*links*) und des XY-Modells (*rechts*) in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N ; Die Rauten kennzeichnen die Temperatur bis welche das jeweilige Kriterium noch Verschränkung detektiert: Peres-Horodecki - *rot*, CCNR - *blau*, Spin-Squeezing-Ungl. - *grün*

Betrachtet man die Ergebnisse in Abbildung 8.1.1 fällt außerdem folgendes auf:

- Heisenberg- und XY-Modell zeigen ein sehr ähnliches Verhalten, die Übergangstemperaturen im Heisenbergmodell sind aber auf einem etwas höheren Niveau, im Mittel sind die entsprechenden Werte um einen Faktor von etwa 1,65 größer.

- Durch die periodischen Randbedingungen tritt eine Frustration der Systeme mit ungerader Teilchenzahl auf, deren Einfluss mit zunehmendem N abnimmt, was in diesem Fall einen Anstieg der Übergangstemperaturen aller Kriterien bewirkt.
- Bei den nicht frustrierten Systemen (gerade Teilchenzahl) liegt die Übergangstemperatur dementsprechend immer höher als bei ungeradem N , allerdings nimmt diese mit zunehmender Teilchenzahl bei allen Kriterien wieder ab, nur der Übergang von vier auf sechs Qubits stellt beim CCNR-Kriterium eine Ausnahme dar.
- Somit scheinen Systeme mit gerader und mit ungerader Teilchenzahl für $N \rightarrow \infty$ gegen einen gemeinsamen Grenzwert für die jeweiligen Übergangstemperaturen zu streben, was durch die verschwindenden Effekte der Randbedingungen auch plausibel wirkt. Da bereits ab kleinen Teilchenzahlen die Grenztemperaturen für die Spin-Squeezing-Ungleichungen selbst bei frustrierten Systemen über jenen des Peres-Horodecki-Kriteriums nicht frustrierter Systeme liegen, ist es denkbar, dass gebundene Verschränkung auch in Spinketten mit $N \rightarrow \infty$ - also in makroskopischen Systemen - auftreten kann.

8.2. Horodecki-Zustände

Bei den untersuchten Spinsystemen konnten nach wie vor nur mit der Spin-Squeezing-Ungleichung PPT-verschränkte Zustände nachgewiesen werden. Deshalb wollen wir an dieser Stelle das CCNR-Kriterium und die PPT-symmetrischen Erweiterungen anhand bereits bekannter Zustände mit gebundener Verschränkung testen. In [14] konstruierte Pawel Horodecki erstmals Zustände ρ_a und ρ_b , welche zwar das Peres-Horodecki-Kriterium nicht verletzen, aber derart aufgebaut sind, dass sie trotzdem ein in der selben Veröffentlichung vorgestelltes, nicht operatives Separabilitätskriterium verletzen. Diese Zustände stellten gleichermaßen auch den ersten Beweis für die Existenz gebundener Verschränkung dar. Mit diesen Zuständen der Dimension 3×3 bzw. 2×4 wollen wir nun unsere operativen Separabilitätskriterien überprüfen.

Wir betrachten folgende zwei Familien von PPT-verschränkten Zuständen, welche sich in der Standardbasis durch folgende Dichtematrizen gegeben sind:

- in der Dimension 3×3 :

$$\rho_a = \frac{1}{8a+1} \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 & a \\ 0 & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 0 & 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 & a \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1+a}{2} & 0 & \frac{\sqrt{1-a^2}}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a & 0 \\ a & 0 & 0 & 0 & a & 0 & \frac{\sqrt{1-a^2}}{2} & 0 & \frac{1+a}{2} \end{bmatrix}, \quad (8.2.1)$$

mit $0 < a < 1$.

- in der Dimension 2×4 :

$$\rho_b = \frac{1}{7b+1} \begin{bmatrix} b & 0 & 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 & b \\ 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1+b}{2} & 0 & 0 & \frac{\sqrt{1-b^2}}{2} \\ b & 0 & 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & b & 0 & \frac{\sqrt{1-b^2}}{2} & 0 & 0 & \frac{1+b}{2} \end{bmatrix}, \quad (8.2.2)$$

mit $0 < b < 1$.

Bei der ersten Familie von sind sowohl das CCNR-Kriterium, als auch das Kriterium auf Basis der PPT-symmetrischen Erweiterungen dazu in der Lage über den ganzen Bereich $0 < a < 1$ Verschränkung nachzuweisen. Im Fall des 2×4 Systems vermag dies jedoch nur das zweitgenannte Kriterium, während das CCNR-Kriterium keinerlei Verschränkung detektiert.

Anstatt nur die Zustände selbst zu betrachten, können wir uns entsprechende Hamiltonoperatoren konstruieren, welche bei $\beta = 1$ als Gibbszustand den jeweiligen Dichteoperator erzeugen, d.h. es soll gelten:

$$\rho_{a/b} = \frac{1}{Z} e^{-(\beta=1)H_{a/b}}. \quad (8.2.3)$$

ρ und H haben das selbe Spektrum, es gilt:

$$H = \sum_i \chi_i |i\rangle \langle i|, \quad (8.2.4)$$

$$\rho = \sum_i \lambda_i |i\rangle \langle i|, \quad (8.2.5)$$

$$\sum_i \lambda_i |i\rangle \langle i| = N \exp \left(- \sum_i \chi_i |i\rangle \langle i| \right), \quad (8.2.6)$$

mit der Normierung $N = [\text{Tr}(\exp(-\sum_i \chi_i |i\rangle\langle i|))]^{-1}$. Da die $|i\rangle$ eine Orthonormalbasis bilden, können wir vereinfacht schreiben:

$$\lambda_i = \frac{e^{-\chi_i}}{\sum_i e^{-\chi_i}}, \quad (8.2.7)$$

$$\chi_i = -\ln \lambda_i - \ln \left(\sum_i e^{-\chi_i} \right). \quad (8.2.8)$$

Für dieses Gleichungssystem suchen wir iterativ eine numerische Lösung und erhalten so den gewünschten Hamiltonoperator $H_{a/b}$. Im Fall des 2×4 Systems können wir diesen in eine Produktbasis aus Paulioperatoren (zusammen mit der Identität $\sigma_0 = \mathbb{1}_2$) zerlegen, also

$$H_b = \sum_{i,j,k=0}^4 \mu_{ijk} \sigma_i^A \otimes \sigma_j^B \otimes \sigma_k^B, \quad (8.2.9)$$

und auf diese Weise die einzelnen Terme als Spinwechselwirkungen interpretieren. Die komplette Basiszerlegung eines solchen Hamiltonoperators wird an dieser Stelle nicht aufgelistet, es ist aber anzumerken, dass bestimmte Drei-Spin-Wechselwirkungsterme wie z.B. $\sigma_x^A \otimes \sigma_x^B \otimes \sigma_x^B$ und alle möglichen Kombinationen bestehend aus zwei σ_y und einem σ_x oder σ_z sehr dominant sind, andere aber überhaupt nicht vorkommen (z.B. alle Kombinationen von x, y und z). Auch scheint die Verteilung der Zwei- und Ein-Spin-Wechselwirkungsterme etwas willkürlich zu erfolgen. Somit wirken diese Hamiltonoperatoren sehr "künstlich" in der Hinsicht, dass es wohl kaum ein entsprechendes natürliches physikalisches Modell für ein derartiges System geben dürfte.

Von diesen Hamiltonoperatoren ausgehend können wir nun erneut, wie in den vorangehenden Kapiteln, thermische Zustände zu unterschiedlichen Temperaturen ableiten, wobei wir für $\beta = 1$ natürlich wieder die ursprünglichen Zustände ρ_a und ρ_b erhalten. Wir betrachten die Temperaturen bis zu welchen die einzelnen Kriterien noch Verschränkung erkennen können, und kommen zu folgenden in Darstellung 8.2.1 abgebildeten Ergebnissen:

- Auffällig ist zunächst der Grenzverlauf des Peres-Horodecki-Kriteriums, der exakt bei $\beta = 1$ liegt. Somit liegen die ursprünglichen Zustände ρ_a und ρ_b genau am Übergang zwischen den PPT- und NPT-Zuständen, es handelt sich also um sogenannte Edge-States.
- Das CCNR-Kriterium ist beim 3×3 System kaum stärker als das Peres-Horodecki-Kriterium, im zweiten Fall sogar deutlich schwächer.

- Das Semidefinite Programm zur Suche nach PPT-symmetrischen Erweiterungen eines Zustands kann insbesondere beim zweiten System noch bei vergleichsweise hohen Temperaturen Verschränkung nachweisen. Dieses Kriterium ist also entgegen den Resultaten von Kapitel 7 durchaus relevant.

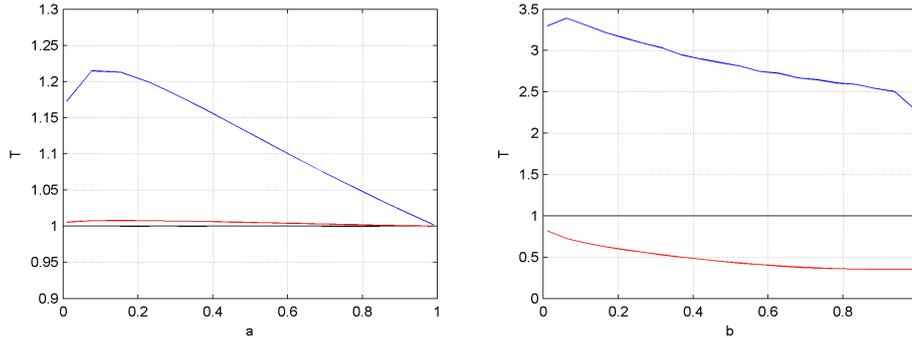


ABBILDUNG 8.2.1. Grenztemperaturen der von den Horodecki-Zuständen (8.2.1) (*links*) und (8.2.2) (*rechts*) abgeleiteten Gibbszustände: auf der x-Achse wird der Parameter a bzw. b variiert; die Linien kennzeichnen die Temperatur unterhalb welcher das jeweilige Kriterium Verschränkung erkennt: Peres-Horodecki - *schwarz*, CCNR - *rot*, PPT-symm. Erw. - *blau*

8.3. Zusammenfassung

Betrachten wir die Eigenschaften von natürlich vorkommenden Spinsystemen mit Zwei-Teilchen-Wechselwirkung - wie beispielsweise das Heisenberg- oder das XY-Modell - in Hinblick auf die Existenz gebundener Verschränkung, so fällt auf, dass unter den verwendeten operativen Separabilitätskriterien nur die Spin-Squeezing-Ungleichungen in der Lage sind PPT- und somit gebunden verschränkte thermische Zustände zu detektieren. Dadurch sind wir auch nicht in der Lage diese gebundene Verschränkung bestimmten bipartiten Aufspaltungen zuzuordnen, wir können aber außer im Fall des Drei-Qubit-Heisenbergmodells auch nicht überprüfen, ob die PPT-verschränkten Zustände gleichzeitig auch biseparabel sind. Demgegenüber lassen sich bei Systemen mit ungewöhnlichen Wechselwirkungstermen, beispielsweise mit echter Dreiteilchenwechselwirkung, wie im Fall der von Horodecki konstruierten Dichtematrizen über einen weiten Bereich auch bipartit gebunden verschränkte Zustände nachweisen, insbesondere mit Hilfe des Tests auf die Existenz PPT-symmetrischer Erweiterungen. Das vorherige Versagen dieses offensichtlich mächtigen Kriteriums im Falle der Spincluster lässt vermuten, dass nicht nur beim 3-Spin- $\frac{1}{2}$ -Heisenbergmodell Biseparabilität vorliegen könnte.

Dreiteilchenverschränkung im XY-Modell

Wir haben uns nun recht ausgiebig mit einigen kleinen, noch leicht berechenbaren Spinsystemen auseinandergesetzt. Häufig sind aber gerade die Eigenschaften makroskopischer Objekte von Interesse, welche nicht mehr direkt numerisch behandelt werden können. Für einige solcher quasi unendlich ausgedehnten Systeme existieren zumindest analytische Lösungen für reduzierte Mehrteilchenzustände. Als Beispiel hierfür wollen wir das anisotrope eindimensionale XY-Modell näher betrachten, welches von Barouch und McCoy in [46, 47, 48] mit Hilfe einer Jordan-Wigner-Transformation gelöst werden konnte. Die reduzierten Zwei-Qubit-Dichteoperatoren dieses Systems wurden bereits von Osborne und Nielsen in [58] näher untersucht, daher konzentrieren wir uns darauf, multipartite Verschränkung nachzuweisen.

9.1. Lösung des XY-Modells

Barouch und McCoy konnten die Spinkorrelationsfunktionen für zwei Teilchen einer Spinkette mit XY-Wechselwirkung ableiten. Ihr Ergebnis wird an dieser Stelle kurz zusammengefasst.

Der Hamiltonoperator des XY-Modells hat folgende Form:

$$H = \sum_{j=1}^N \left((1 + \gamma) S_j^x S_{j+1}^x + (1 - \gamma) S_j^y S_{j+1}^y - h S_j^z \right), \quad (9.1.1)$$

mit den Spinoperatoren $S_j^i = \frac{1}{2} \sigma_j^i$, $i = x, y, z$ und einem zeitlich konstanten Magnetfeld der Stärke h . Der Parameter γ bestimmt den Grad der Anisotropie des Systems, wobei wir für $\gamma = 1$ das Isingmodell erhalten. Im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ beträgt die mittlere transversale Magnetisierung pro Spin $m_z = \langle S^z \rangle$ im thermischen Gleichgewicht bei einer Temperatur von $T = \frac{1}{k_B \beta}$ gemäß [46]

$$m_z = \frac{\langle \sigma^z \rangle}{2} = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\phi (h - \cos \phi) \frac{\tanh(\frac{1}{2}\beta\Lambda(h))}{\Lambda(h)}, \quad (9.1.2)$$

mit

$$\Lambda(h) = \sqrt{\gamma^2 \sin^2 \phi + (h - \cos \phi)^2}. \quad (9.1.3)$$

Die Korrelationsfunktionen $\langle \sigma_j^i \sigma_{j+R}^i \rangle$ sind weiters in [47] gegeben durch:

$$\langle \sigma_j^x \sigma_{j+R}^x \rangle = \begin{vmatrix} G_{-1} & G_{-2} & \cdots & G_{-R} \\ G_0 & G_{-1} & \cdots & G_{-R+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{R-2} & G_{R-3} & \cdots & G_{-1} \end{vmatrix}, \quad (9.1.4)$$

$$\langle \sigma_j^y \sigma_{j+R}^y \rangle = \begin{vmatrix} G_1 & G_0 & \cdots & G_{-R+2} \\ G_2 & G_1 & \cdots & G_{-R+3} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_R & G_{R-1} & \cdots & G_1 \end{vmatrix}, \quad (9.1.5)$$

$$\langle \sigma_j^z \sigma_{j+R}^z \rangle = \langle \sigma^z \rangle^2 - G_R G_{-R}, \quad (9.1.6)$$

mit

$$G_r = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\phi \cos(\phi r) (h - \cos \phi) \frac{\tanh(\frac{1}{2}\beta\Lambda(h))}{\Lambda(h)} + \frac{\gamma}{\pi} \int_0^\pi d\phi \sin(\phi r) \sin \phi \frac{\tanh(\frac{1}{2}\beta\Lambda(h))}{\Lambda(h)}. \quad (9.1.7)$$

Die reduzierten 2-Teilchen-Dichtematrizen können nun durch diese Korrelationsfunktionen und durch die mittlere transversale Magnetisierung ausgedrückt werden:

$$\rho_{j,j+R} = \frac{1}{4} \left(\mathbb{1}_{j,j+R} + \langle \sigma^z \rangle (\sigma_j^z + \sigma_{j+R}^z) + \sum_{i=x,y,z} \langle \sigma_j^i \sigma_{j+R}^i \rangle \sigma_j^i \sigma_{j+R}^i \right). \quad (9.1.8)$$

Diese Zwei-Qubit-Subsysteme wurden von Osborne und Nielsen mit Hilfe der Concurrence untersucht, und ein Zusammenhang mit dem im System auftretenden Quantenphasenübergang bei $h = 1$ festgestellt [58]. In einer erst kürzlich erschienen Veröffentlichung [59] werden die auf ähnliche Art und Weise berechneten reduzierten Dreiteilchenzustände des Systems mit Hilfe des Peres-Horodecki-Kriteriums auf Verschränkung hin untersucht, um Rückschlüsse auf multipartite Verschränkung in diesen Subsystemen ziehen zu können. Wir werden jedoch einen anderen Weg gehen, indem wir eine Familie von Zeugen zum Nachweis echter Dreiteilchenverschränkung konstruieren, welche nur die Kenntnis über die oben genannten Zweipunktkorrelationsfunktionen voraussetzen.

9.2. Konstruktion geeigneter Zeugen

Diese Zeugen dürfen selbst keine Terme von Dreipunktkorrelationen enthalten, wir wählen dementsprechend folgende Form:

$$W_1 = -\tilde{W} + C_{\max} \quad W_2 = \tilde{W} - C_{\min}, \quad (9.2.1)$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{W} = & a_x \sigma_{j_1}^x \sigma_{j_2}^x + a_y \sigma_{j_1}^y \sigma_{j_2}^y + a_z \sigma_{j_1}^z \sigma_{j_2}^z + b_x \sigma_{j_2}^x \sigma_{j_3}^x + \dots + c_x \sigma_{j_1}^x \sigma_{j_3}^x \\ & + d_x (\sigma_{j_1}^x + \sigma_{j_2}^x + \sigma_{j_3}^x) + d_y (\sigma_{j_1}^y + \sigma_{j_2}^y + \sigma_{j_3}^y) + d_z (\sigma_{j_1}^z + \sigma_{j_2}^z + \sigma_{j_3}^z), \end{aligned}$$

und dem Maximum bzw. Minimum von \tilde{W} über alle biseparablen Zustände:

$$C_{\max} = \max_{\text{bisep.}} \langle \tilde{W} \rangle \quad C_{\min} = \min_{\text{bisep.}} \langle \tilde{W} \rangle. \quad (9.2.2)$$

Hierbei sollen sich die Koeffizienten a_i bis d_i beliebig wählen lassen, wobei sich die verschiedenen daraus resultierenden Zeugen unterschiedlich gut dazu eignen, Verschränkung in den reduzierten Zuständen nachzuweisen. Bei der Suche nach dem Maximum bzw. Minimum von $\langle \tilde{W} \rangle$ über alle biseparablen Zustände können wir uns dabei auf reine Zustände beschränken, da alle gemischten Zustände einer bestimmten biseparablen Aufspaltung als konvexe Kombination entsprechender reiner biseparabler Zustände darstellbar sind und dementsprechend eine konvexe Menge bilden. Wir betrachten zunächst $|\psi\rangle = |\phi_{j_1}^a\rangle \otimes |\phi_{j_2 j_3}^b\rangle$. Folgend werden die Abkürzungen $x_k = \langle \sigma_k^x \rangle$, $x_k x_l = \langle \sigma_k^x \sigma_l^x \rangle$ und $x_k \cdot x_l = \langle \sigma_k^x \rangle \langle \sigma_l^x \rangle$ usw. verwendet. Wegen der Biseparabilität gilt $\langle \sigma_{j_1}^i \sigma_{j_2/j_3}^i \rangle = \langle \sigma_{j_1}^i \rangle \langle \sigma_{j_2/j_3}^i \rangle$ also $x_{j_1} x_{j_2/j_3} = x_{j_1} \cdot x_{j_2/j_3}$, y und z analog. Für $\langle \tilde{W} \rangle_{|\psi\rangle = |\phi_{j_1}^a\rangle \otimes |\phi_{j_2 j_3}^b\rangle}$ erhält man demnach:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{W} \rangle &= a_x x_{j_1} \cdot x_{j_2} + a_y y_{j_1} \cdot y_{j_2} + a_z z_{j_1} \cdot z_{j_2} + b_x x_{j_2} \cdot x_{j_3} + \dots + c_x z_{j_1} \cdot z_{j_3} \\ &+ d_x (x_{j_1} + x_{j_2} + x_{j_3}) + d_y (y_{j_1} + y_{j_2} + y_{j_3}) + d_z (z_{j_1} + z_{j_2} + z_{j_3}) \\ &= \underbrace{\begin{pmatrix} x_{j_1} \\ y_{j_1} \\ z_{j_1} \end{pmatrix}}_{=1} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} a_x x_{j_2} + c_x x_{j_3} + d_x \\ a_y y_{j_2} + c_y y_{j_3} + d_y \\ a_z z_{j_2} + c_z z_{j_3} + d_z \end{pmatrix}}_{\sqrt{(a_x x_{j_2} + c_x x_{j_3} + d_x)^2 + \dots}} + b_x x_{j_2} x_{j_3} + \dots + d_x (x_{j_2} + x_{j_3}) + \dots \end{aligned}$$

Das Skalarprodukt wird maximal
bzw. minimal, wenn Vektor 1 parallel
bzw. antiparallel zu Vektor 2 steht.

$$\begin{aligned} \leq & + \underbrace{\left\| \begin{pmatrix} x_{j_1} \\ y_{j_1} \\ z_{j_1} \end{pmatrix} \right\|}_{=1} \underbrace{\left\| \begin{pmatrix} a_x x_{j_2} + c_x x_{j_3} + d_x \\ a_y y_{j_2} + c_y y_{j_3} + d_y \\ a_z z_{j_2} + c_z z_{j_3} + d_z \end{pmatrix} \right\|}_{\sqrt{(a_x x_{j_2} + c_x x_{j_3} + d_x)^2 + \dots}} \\ \geq & - \dots \\ & + b_x x_{j_2} x_{j_3} + \dots + d_x (x_{j_2} + x_{j_3}) + \dots \end{aligned} \quad (9.2.3)$$

So muss nur noch das Maximum bzw. Minimum dieses Terms über alle möglichen reinen 2-Qubit-Zustände $|\phi_{j_2 j_3}^b\rangle$ gefunden werden, was auch numerisch erfolgen kann. Da die Indizes $j_2 j_3$ nun keine spezielle Bedeutung mehr haben, nennen wir diesen allgemeinen 2-Qubit-Zustand $|\phi_{\alpha\beta}\rangle$. Wir schreiben also:

$$C_{\max}^{|\phi_{j_1}^a\rangle \otimes |\phi_{j_2 j_3}^b\rangle} = \max_{|\phi_{\alpha\beta}\rangle} \{ \|\vec{v}_{23}\| + b_x x_\alpha x_\beta + \dots + d_x(x_\alpha + x_\beta) + \dots \}, \quad (9.2.4)$$

$$C_{\min}^{|\phi_{j_1}^a\rangle \otimes |\phi_{j_2 j_3}^b\rangle} = \min_{|\phi_{\alpha\beta}\rangle} \{ -\|\vec{v}_{23}\| + b_x x_\alpha x_\beta + \dots + d_x(x_\alpha + x_\beta) + \dots \}, \quad (9.2.5)$$

$$\text{mit } \vec{v}_{23} = \begin{pmatrix} a_x x_\alpha + c_x x_\beta + d_x \\ a_y y_\alpha + c_y y_\beta + d_y \\ a_z z_\alpha + c_z z_\beta + d_z \end{pmatrix}.$$

Für die beiden anderen biseparable Aufspaltungen gilt dasselbe, es müssen nur die Koeffizienten a_i , b_i und c_i entsprechend vertauscht werden:

$$C_{\max/\min}^{|\phi_{j_2}^a\rangle \otimes |\phi_{j_1 j_3}^b\rangle} = \begin{matrix} \max \\ \min \end{matrix} \left\{ \begin{matrix} + \\ - \end{matrix} \|\vec{v}_{13}\| + c_x x_\alpha x_\beta + \dots + d_x(x_\alpha + x_\beta) + \dots \right\}, \quad (9.2.6)$$

$$C_{\max/\min}^{|\phi_{j_3}^a\rangle \otimes |\phi_{j_1 j_2}^b\rangle} = \begin{matrix} \max \\ \min \end{matrix} \left\{ \begin{matrix} + \\ - \end{matrix} \|\vec{v}_{12}\| + a_x x_\alpha x_\beta + \dots + d_x(x_\alpha + x_\beta) + \dots \right\}, \quad (9.2.7)$$

$$\text{mit } \vec{v}_{13} = \begin{pmatrix} a_x x_\alpha + b_x x_\beta + d_x \\ a_y y_\alpha + b_y y_\beta + d_y \\ a_z z_\alpha + b_z z_\beta + d_z \end{pmatrix} \text{ und } \vec{v}_{12} = \begin{pmatrix} c_x x_\alpha + b_x x_\beta + d_x \\ c_y y_\alpha + b_y y_\beta + d_y \\ c_z z_\alpha + b_z z_\beta + d_z \end{pmatrix}.$$

$C_{\max/\min} = \max/\min_{\text{bisep.}} C_{\max/\min}^{\text{bisep.}}$ ist folglich der größte/kleinste dieser sechs Extremwerte und wir erhalten die beiden oben genannten Zeugen W_1 und W_2 . Da wir die Koeffizienten a_i bis d_i beliebig wählen können, steht uns nun somit eine Vielzahl von Zeugen für echte Mehrteilchenverschränkung zu Verfügung.

9.3. Ergebnisse

Nach mehreren Versuchen mit jeweils verschiedener Wahl der Koeffizienten a_i bis d_i zeigte sich, dass zumindest für drei benachbarte Teilchen der Spinkette, also $R_1 = j_2 - j_1 = 1$, $R_2 = j_3 - j_2 = 1$ und $R_3 = j_3 - j_1 = 2$,

echte Dreiteilchenverschränkung nachgewiesen werden kann. Als hierfür gut geeignet hat sich folgende Wahl der Koeffizienten erwiesen:

$$a_x = b_x = 1 + \gamma, \quad (9.3.1)$$

$$a_y = b_y = 1 - \gamma, \quad (9.3.2)$$

$$d_z = -h, \quad (9.3.3)$$

während die restlichen Koeffizienten gleich Null gesetzt werden.

In den Abbildungen 9.3.1 und 9.3.2 sind die unserer Auswahl zugehörigen Ergebnisse abgebildet. Für verschiedene Werte der Anisotropie γ wurde der Erwartungswert der Zeugen W_1 und W_2 in Abhängigkeit von Magnetfeld und Temperatur berechnet, wobei beide dieselben Ergebnisse lieferten. Die Stärke des Magnetfelds h variiert in Schritten von 0,01 im Intervall $[0, 5]$. Bei den Temperaturschritten wurde eine Länge von 0,002 gesetzt, wobei die Temperaturskala bei $kT = 1$ endet. Die in den Abbildungen grau gehaltenen Flächen kennzeichnen jene Bereiche, in welchen die Erwartungswerte der Zeugen $-\epsilon$ übersteigen und somit das Kriterium innerhalb der numerischen Genauigkeit nicht verletzt wird. Der Wert von ϵ wurde mit 10^{-3} recht hoch angesetzt, da die Bestimmung der durch ein Näherungsverfahren gewonnenen $C_{\max/\min}^{\text{bisep.}}$ nicht sehr genau (Fehler $\approx 10^{-4}$) erfolgt. Die Erwartungswerte unterhalb von $-\epsilon$ werden farblich skaliert dargestellt.

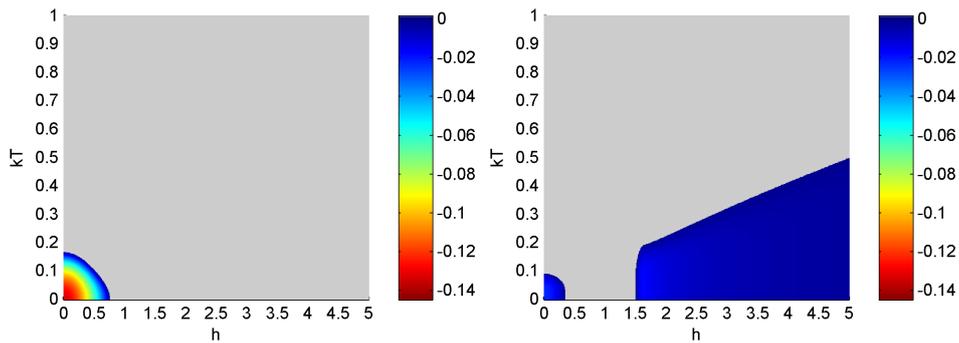


ABBILDUNG 9.3.1. Erwartungswerte der Zeugen W_1 / W_2 : *links*: $\gamma = 0$ (isotropes XY-Modell); *rechts*: $\gamma = 0,25$ (anisotropes XY-Modell); Der graue Bereich kennzeichnet jene Zustände, welche nicht-negative Erwartungswerte für die Zeugen aufweisen. Die negativen Erwartungswerte der tripartit verschränkten Zustände sind hingegen farblich skaliert dargestellt.

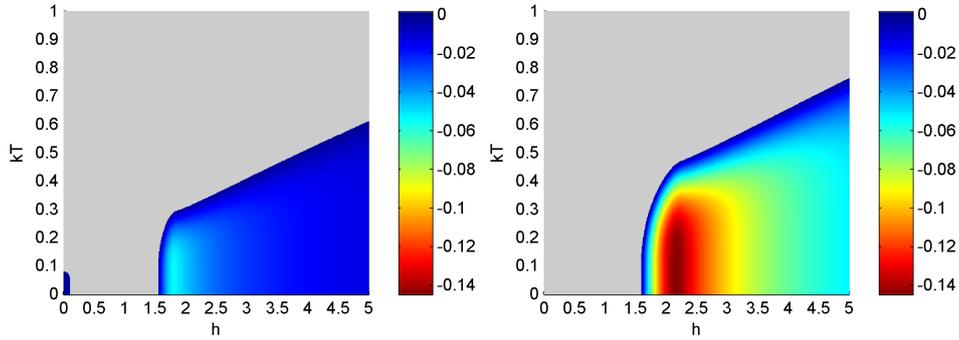


ABBILDUNG 9.3.2. Erwartungswerte der Zeugen W_1 / W_2 :
links: $\gamma = 0,5$ (anisotropes XY-Modell); *rechts*: $\gamma = 1$ (Ising-Modell); Farbskalierung wie in Abbildung 9.3.1

Es ist deutlich zu sehen, wie sich durch den Anstieg der Anisotropie des Systems der Schwerpunkt der Dreiteilchenverschränkung hin zu größeren Magnetfeldern verschiebt, wobei hier der Bereich um $h = 1$, wo ein Quantenphasenübergang stattfindet, ausgespart bleibt.

9.4. Zusammenfassung

Es gelang uns eine Familie von Verschränkungszeugen zu finden, mit welcher für Spinketten mit XY-Wechselwirkung in einem externen Magnetfeld echte multipartite Verschränkung dreier benachbarter Teilchen nachgewiesen werden kann. Leider war es uns nicht möglich damit auch Verschränkung zwischen Teilchen auf weiter entfernten Gitterplätzen zu finden. Nichtsdestotrotz erscheint der gewählte Ansatz insofern interessant, als dass zur Berechnung der Erwartungswerte dieser Zeugen die Zweipunktkorrelationsfunktionen ausreichend sind, wir die reduzierten Dreiteilchendichtematrizen also gar nicht kennen müssen, um Dreiteilchenverschränkung nachweisen zu können.

Zusammenfassung der Resultate

Betrachten wir rückblickend die Resultate dieser Diplomarbeit, so stellen wir fest, dass ausgerechnet das Einfachste der hier untersuchten Spinsysteme die wohl interessantesten Ergebnisse liefert. Für den 3-Spin- $\frac{1}{2}$ -Cluster mit Heisenbergwechselwirkung konnten wir nicht nur zeigen, dass dessen thermische Zustände völlig unabhängig von der Stärke eines externen Magnetfelds bis zu einer Grenztemperatur von $kT_S^{PPT} \approx 4,34$ negative partielle Transposition aufweisen, sondern mit Hilfe der in [53] bewiesenen Eigenschaften $U \otimes U \otimes U$ -symmetrischer Systeme auch beweisen, dass über dieser Temperatur Biseparabilität vorliegt. Da aber selbst bei höheren Temperaturen eine der Spin-Squeezing-Ungleichungen (3.2.10) verletzt wird, muss eine Form multipartititer gebundener Verschränkung vorliegen. Der anschließend untersuchte 4-Spin- $\frac{1}{2}$ -Cluster weist ähnliche Verschränkungseigenschaften auf. Dabei ist anzumerken, dass trotz der deutlich größeren Anzahl verwendeter Separabilitätskriterien - darunter auch sämtliche unabhängigen Permutationskriterien - nur die erwähnte Spin-Squeezing-Ungleichung PPT-verschränkte Zustände nachzuweisen vermag. Ob diese nun ebenfalls biseparabel sind, ließ sich nicht überprüfen.

Wenn wir nun die Teilchenzahl N der Spinsysteme - ob nun Heisenberg- oder XY-Modell - weiter erhöhen, stellen wir fest, dass sich die Grenztemperaturen der einzelnen Kriterien sowohl von frustrierten als auch von nicht frustrierten Systemen auf einen gemeinsamen Wert hinzubewegen scheinen. Wäre dies tatsächlich der Fall, dann müsste, da die Temperatur der Spin-Squeezing-Ungleichung über der des Peres-Horodecki-Kriteriums liegt, auch bei infiniten eindimensionalen Spinketten gebundene Verschränkung vorliegen.

Interessant ist auch das schlechte Abschneiden des CCNR-Kriteriums und der PPT-symmetrischen Erweiterungen, mit welchen sich bei den untersuchten Modellen überhaupt keine verschränkten PPT-Zustände finden ließen. Ein Vergleich mit anderen Systemen, basierend auf den von P. Horodecki konstruierten gebunden verschränkten Zuständen (8.2.1) und (8.2.2), zeigte aber, dass diese Kriterien im Allgemeinen durchaus gut zu gebrauchen sind.

Zum Schluss betrachteten wir noch Spinketten mit XY -Wechselwirkung in einem externen Magnetfeld. Es gelang uns, eine Familie von Verschränkungszeugen zu konstruieren, mit welcher echte multipartite Verschränkung dreier benachbarter Teilchen nachgewiesen werden kann. Leider war es uns nicht möglich, damit auch multipartite Verschränkung zwischen Teilchen auf weiter entfernten Gitterplätzen zu finden, wie es beispielsweise in [59] gelang. Trotzdem scheint unser Ansatz insofern interessant zu sein, als dass die Kenntnis der Zweipunktkorrelationsfunktionen dieses Systems ausreichend sind, um tripartite Verschränkung aufzuspüren.

ANHANG A

Singulärwert-Zerlegung

THEOREM A.0.1. *Jede Matrix $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ kann in folgender Form zerlegt werden:*

$$A = UDV^\dagger. \quad (\text{A.0.1})$$

U und V sind unitär und D stellt eine Diagonalmatrix mit (der Größe nach geordneten) positiven reellen Einträgen d_i dar. Die von Null verschiedenen Diagonalelemente von D werden Singulärwerte genannt, wobei deren Anzahl dem Rang der Matrix A entspricht.

BEWEIS. Der positive und hermitesche Operator $K = \sqrt{AA^\dagger}$ besitzt aufgrund des Spektralsatzes eine Basis, in welcher K nur Diagonaleinträge hat, also können wir schreiben:

$$K = UDU^\dagger, \quad (\text{A.0.2})$$

mit der Diagonalmatrix D und unitärem U . Weiters definieren wir uns die Matrix $W = K^{-1}A$. (Falls K singulär sein sollte, beschränken wir uns auf dessen Bildbereich.) W ist unitär, wie leicht gezeigt werden kann.

$$WW^\dagger = K^{-1}AA^\dagger K^{-1} = K^{-1}K^2K^{-1} = \mathbb{1}. \quad (\text{A.0.3})$$

Aus $A = KW = UDU^\dagger W$ folgt mittels der Definition $V^\dagger = U^\dagger W$ die Behauptung. \square

Bemerkung: Der Beweis ist konstruktiv, da die Singulärwerte den Eigenwerten der Matrix $K = \sqrt{AA^\dagger}$ bzw. den Wurzeln der Eigenwerte von AA^\dagger entsprechen, und sich U aus den zugehörigen normierten Eigenvektoren zusammensetzt. Analog dazu besitzt die Matrix $A^\dagger A$ dieselben Eigenwerte und V setzt sich aus den hierzu gehörigen Eigenvektoren zusammen.

Literaturverzeichnis

- [1] M. Planck, „Über eine Verbesserung der Spektralgleichung“, Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft 2, 202 (1900); „Zur Theorie des Gesetzes der Energieverteilung im Normalspektrum“, *ibid.* 2, 237 (1900)
- [2] A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen, *Phys. Rev.* 47, 777 (1935)
- [3] N. Bohr, *Phys. Rev.* 48, 696 (1935)
- [4] D. Bohm, *Quantum Theory* (Prentice-Hall, New York, 1951)
- [5] D. Bohm, Y. Aharonov, *Phys. Rev.* 108, 1070 (1957)
- [6] J. S. Bell, *Physics* 1, 195 (1964)
- [7] A. Aspect, P. Grangier, G. Roger, *Phys. Rev. Lett.* 49, 91 (1982)
- [8] A. Aspect, J. Dalibard, G. Roger, *Phys. Rev. Lett.* 49, 1804 (1982)
- [9] E. Schrödinger, „Die gegenwärtige Situation der Quantenmechanik“, *Die Naturwissenschaften* 23, 807 (1935)
- [10] R. F. Werner, *Phys. Rev. A* 40, 4277 (1989)
- [11] A. Otte, *Separabilität in Quantennetzwerken*, Dissertation (Univ. Stuttgart, 2001)
<http://elib.uni-stuttgart.de/opus/volltexte/2001/921/>
- [12] A. Peres, *Phys. Rev. Lett.* 77, 1413 (1996), [quant-ph/9604005v2]
- [13] M. Horodecki, P. Horodecki, R. Horodecki, *Phys. Lett. A* 223, 1 (1996), [quant-ph/9605038v2]
- [14] P. Horodecki, *Phys. Lett. A* 232, 333 (1997), [quant-ph/9703004v2]
- [15] M. Horodecki, P. Horodecki, R. Horodecki, *Phys. Rev. Lett.* 80, 5239 (1998), [quant-ph/9801069v1]
- [16] A. C. Doherty, P. A. Parrilo, F. M. Spedalieri, *Phys. Rev. Lett.* 88, 187904 (2002), [quant-ph/0112007v3]
- [17] A. C. Doherty, P. A. Parrilo, F. M. Spedalieri, *Phys. Rev. A* 69, 022308 (2004), [quant-ph/0308032v3]
- [18] <http://www.iqi.caltech.edu/documents/spedalieri/pptsetest1.m>
- [19] O. Rudolph, [quant-ph/0202121v1]
- [20] O. Rudolph, *Phys. Rev. A* 67, 032312 (2003), [quant-ph/0212047v2]
- [21] O. Rudolph, [quant-ph/0205054v1]
- [22] K. Chen und L. A. Wu, *Quantum Information and Computation*, Vol.3, No.3 (2003) 193-202, [quant-ph/0205017v5]
- [23] M. Horodecki, P. Horodecki, R. Horodecki, *Open Syst. Inf. Dyn.* 13, 103 (2006), [quant-ph/0206008v1]
- [24] A. Acin, D. Bruß, M. Lewenstein, A. Sanpera, *Phys. Rev. Lett.* 87, 040401 (2001), [quant-ph/0103025v1]
- [25] W. Dür, G. Vidal, J. I. Cirac, *Phys. Rev. A* 62, 062314 (2000), [quant-ph/0005115v2]
- [26] F. Verstraete, J. Dehaene, B. De Moor, H. Verschelde, *Phys. Rev. A* 65, 052112 (2002), [quant-ph/0109033v2]
- [27] P. Wocjan, M. Horodecki, *Open Syst. Inf. Dyn.* 12, 331 (2005), [quant-ph/0503129v2]

- [28] L. Clarisse, P. Wocjan, *Quantum Information and Computation*, Vol. 6, No. 3 (2006) 277-288, [quant-ph/0504160v2]
- [29] A. Sorensen et al., *Nature* 409, 63 (2001)
- [30] G. Tóth, C. Knapp, O. Gühne, H. J. Briegel, *Phys. Rev. Lett.* 99, 250405 (2007), [quant-ph/0702219v5]
- [31] C. H. Bennett, G. Brassard, S. Popescu, B. Schumacher, J. A. Smolin, W. K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* 76, 722 (1996), [quant-ph/9511027v2]
- [32] M. Horodecki, P. Horodecki, R. Horodecki, *Phys. Rev. Lett.* 78, 574 (1997)
- [33] W. Dür, J. I. Cirac, M. Lewenstein, D. Bruß, *Phys. Rev. A* 61, 062313 (2000), [quant-ph/9910022v1]
- [34] D. P. DiVincenzo, P. W. Shor, J. A. Smolin, B. M. Terhal, A. V. Thapliyal, *Phys. Rev. A* 61, 062312 (2000), [quant-ph/9910026v3]
- [35] P. Horodecki, M. Horodecki, R. Horodecki, *Phys. Rev. Lett.* 82 1056 (1999), [quant-ph/9806058v1]
- [36] C. H. Bennett, H. J. Bernstein, S. Popescu, B. Schumacher, *Phys. Rev. A* 53, 2046 (1996)
- [37] D. Bruß, *J. Math. Phys.* 43, 4237 (2002), [quant-ph/0110078v1]
- [38] S. Hill, W. K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* 78, 5022 (1997), [quant-ph/9703041v2]
- [39] W. K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* 80, 2245 (1998), [quant-ph/9709029v2]
- [40] M. B. Plenio, S. Virmani, *Quant. Inf. Comp.* 7, 1 (2007), [quant-ph/0504163v3]
- [41] W. Heisenberg, *Zeitschrift f. Physik* 49, 619 (1928)
- [42] H. Bethe, *Zeitschrift f. Physik* 71, 205 (1931)
- [43] E. Ising, „Beitrag zur Theorie des Ferro- und Paramagnetismus“ Dissertation, Universität Hamburg (1924)
- [44] E. Ising, *Zeitschrift f. Physik* 31, 253 (1925)
- [45] L. Onsager, *Phys. Rev.* 65, 117 (1944)
- [46] E. Barouch, B. M. McCoy, M. Dresden, *Phys. Rev. A* 2, 1075 (1970)
- [47] E. Barouch, B. M. McCoy, *Phys. Rev. A* 3, 786 (1971)
- [48] E. Barouch, B. M. McCoy, *Phys. Rev. A* 3, 2137 (1971)
- [49] O. Osenda, G. A. Raggio, *Phys. Rev. A* 72, 064102 (2005), [quant-ph/0507013v1]
- [50] D. W. Berry, M. R. Dowling, *Phys. Rev. A* 74, 062301 (2006), [quant-ph/0605176v2]
- [51] J. T. Haraldsen, T. Barnes, J. L. Musfeldt, *Phys. Rev. B* 71, 064403 (2005), [cond-mat/0408253v2]
- [52] B. Cage et al., *J. Am. Chem. Soc.* 125, 5270 (2003)
- [53] T. Eggeling, R. F. Werner, *Phys. Rev. A*, 63, 042111 (2001), [quant-ph/0010096v1]
- [54] R. Basler et al., *Inorg. Chem.* 41, 5675 (2002)
- [55] I. Bose, A. Tribedi, *Phys. Rev. A* 72, 022314 (2005), [cond-mat/0503170v3]
- [56] M. Wiesniak, V. Vedral, C. Brukner, *New J. Phys.* 7, 258 (2005), [quant-ph/0503037v3]
- [57] C. Brukner, V. Vedral, A. Zeilinger, *Phys. Rev. A* 73, 012110 (2006), [quant-ph/0410138v1]
- [58] T. J. Osborne, M. A. Nielsen, *Phys. Rev. A* 66, 032110 (2002), [quant-ph/0202162v1]
- [59] D. Patane, R. Fazio, L. Amico, *New J. Phys.* 9, 322 (2007), 0705.0386v2 [quant-ph]

Danksagung

Univ.-Prof. Dr. Hans Jürgen Briegel danke ich herzlich für die Betreuung meiner Diplomarbeit, bei der ich die Gelegenheit hatte, in seiner Gruppe an aktuellen Themen der Quanteninformationstheorie mitarbeiten zu dürfen.

Außerdem möchte ich mich bei der gesamten Gruppe für das gute Betriebsklima bedanken. Immer wieder wurden von verschiedenen Mitgliedern auch Treffen und Feiern abseits des universitären Alltags organisiert, bei denen man sich auch privat kennenlernen konnte.

Mein ganz besonderer Dank gilt aber meinem persönlichen Betreuer Dr. Otfried Gühne, der über den gesamten Zeitraum immer für mich da war und gerne bereit war mir meine Fragen zu beantworten. Auch danke ich ihm dafür, dass er immer den Fortschritt meiner Arbeit im Auge behielt und mich zur steten Weiterarbeit ermutigte. Ohne ihn hätte diese Diplomarbeit in ihrer jetzigen Form wohl nicht entstehen können.

Weiters möchte ich mich bei Dr. Géza Tóth bedanken, mit dem wir zusammen eine Veröffentlichung herausbringen konnten, zu welcher ich ein paar Resultate dieser Diplomarbeit beisteuerte.

Dank gilt natürlich auch meiner Freundin Monika, welche mich während des gesamten Entstehungsprozesses dieser Arbeit moralisch unterstützte und mir durch Korrekturlesen auf etwaige (gar nicht so seltene) Tippfehler auch aktiv half.

Natürlich vergesse ich an dieser Stelle auch nicht auf meine Eltern, welche mir erst das Studium der Physik ermöglicht haben und mir währenddessen nicht nur in finanzieller Hinsicht stets unterstützend beiseite standen.