

# Geometriai fázisfaktorok alkalmazása a kvantumszámításban

## TDK-dolgozat

### 2005

Szalay Szilárd, IV. évf. mérnök-fizikus,  
Konzulens: dr. Lévay Péter  
*Budapesti Műszaki Egyetem*

Napjaink kutatásának közkezdvelt témája a kvantumszámítógépek fizikai megvalósítása. Erre a természet több eszközt is kínál, mi csak egyet tekintünk: a geometriai fázisfaktorokat. Sajátállapotból adiabatikusan időfejlesztett kvantumrendszer során a kiindulási állapot csak egy, az időfejlődés pályájára jellemző fázisfaktort szed össze. Ennél érdekesebb az úgynevezett nem-Abeli eset, amikor a kiindulási állapot energianívója elfajult. Az adiabatikus időfejlődés ekkor is meghagyja a rendszert ezen a nívón, a kiindulási állapot azonban az e nívóhoz tartozó többdimenziós altérben az időfejlődés menetétől függő módon "elfordulhat". Ekkor a geometriai hatást egy unitér mátrixszal írhatjuk le. A megfelelő módon történő időfejlesztés hatására ez a mátrix olyan alakú lehet, ami megvalósíthat egyet a kvantuminformáció-kezelés alapműveleteiből, a q-bit kapukból.

## I. ADIABATIKUS IDŐFEJLŐDÉS ÉS GEOMETRIAI FÁZISOK

E fejezetben áttekintjük a dolgozatunk alapjául szolgáló elméleti hátteret. Az ide tartozó irodalom: bevezetéképpen [1], részletesen pedig [2].

### A. Bevezetés

Egy kvantumrendszer fejlődését leíró Schrödinger-egyenlet egzakt megoldása igen bonyolult lehet, már egészen egyszerű potenciál esetén sem található hullámfüggvény zárt alakban. Speciális esetben, – amennyiben a potenciál időfüggetlen – a feladat a rendszert leíró Hamiltoni sajátértékproblémájának megoldására "egyszerűsödik". Ez egy homogén lineáris másodrendű parciális differenciálegyenlet, tehát elképzelhetjük, hogy helyzetünk ekkor sem könnyű. Ám az adott probléma általában még csak ennyire sem kellemes. A fenténél általánosabb eset, ha a potenciál nagyon lassan változik az időben. A "nagyon lassú" adiabatikus változást jelent, a rendszer időfejlődése stacionárius állapotokon keresztül történik. Ez a lassúsági kritérium gyakran teljesül. Ez történik például akkor, amikor egy kísérleti elrendezésben változtatjuk a mágneses teret, és ennek a változásnak az időskálája nagyságrendekkel lassabb a hozzá csatolt kvantumrendszerénél. Az adiabatikus közelítés másik érdekes alkalmazási területe a kvantummechanikai soktestprobléma, ahol a potenciál, melyben az elektronok mozognak, változik az atommagok mozgásával, melyet azonban – a konkrét problémától függően – adiabatikusnak tekinthetünk a jóval gyorsabb elektronok mozgásához viszonyítva.

Lássuk, miben egyszerűbb a helyzetünk, ha adiabatikusan változik a rendszert leíró Hamiltoni! A probléma általánosításaként jelölje  $\mathbf{X} = \mathbf{X}(t)$  a Hamiltoni folytonosan és időben adiabatikusan változó paramétereit! A lehetséges paramétereket az  $\mathcal{M}$  paraméterter tartalmazza, melytől azt várjuk el, hogy lokálisan Euklideszi legyen, vagyis, hogy az adott folyamatban szóba jövő paramétereket tartalmazó  $\mathcal{U} \subset \mathcal{M}$  nyílt halmaz diffeomorfan leképezhető legyen  $\mathbf{R}^d$  nyílt halmazaira. A környezet változása egy folytonos görbét definiál  $\mathcal{M}$ -ben.

Ekkor a Hamiltoni

$$H = H(\mathbf{X}(t)) \quad (1)$$

a rendszer állapotainak  $\mathcal{H}$  Hilbert-terén ható operátor.  $\mathcal{H}$  vektorainak – jelölje őket  $|\psi(\mathbf{X}(t))\rangle \equiv |\psi(t)\rangle$  – a rendszer konfigurációs terének helyreprezentációjában a  $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{X}(t)) \equiv \psi(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle$  hullámfüggvények felelnek meg. A Hilbert-tér skalárszorzatát a következő összefüggés definiálja:

$$\langle \phi(t) | \psi(t) \rangle = \int d\mathbf{r} \overline{\phi(\mathbf{r}, \mathbf{X}(t))} \psi(\mathbf{r}, \mathbf{X}(t)) \quad (2)$$

A rendszer időfejlődését az időfüggő Schrödinger-egyenlettel írjuk le:

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (3)$$

A rendszer energiasajátállapotait a Hamilton operátor sajátértékegyenlete adja. Alkossanak ezek teljes ortonormált rendszert! A különböző paraméterekre nyilván más és más energianívókat és sajátállapotokat kapunk:

$$H(\mathbf{X}(t))|n, \mathbf{X}(t)\rangle = E_n(\mathbf{X}(t))|n, \mathbf{X}(t)\rangle \quad (4)$$

Itt azt követeljük meg, hogy a nívók és a sajátállapotok sima és egy-értékű függvényei legyenek  $\mathbf{X}$ -nek. Ekkor  $\mathbf{X}(t)$  folytonos változása mellett a sajátalterek folytonosan elfordulnak  $\mathcal{H}$ -ban.

### B. A kvantum-adiabatikus tétel

Ideje tisztáznunk, hogy mikor beszélhetünk adiabatikus közelítésről, vagyis, hogy mikor elég lassú az időfejlődés. Azt szeretnénk, hogy olyan kis energiájú legyen a paraméterek változása, hogy a rendszer végig megmaradhasson egy sajátenergiaszinten. Ahhoz tehát, hogy a közelítést alkalmazhassuk, eleve nem szabad, hogy a szomszédos nívók  $E_n(\mathbf{X})$  "nívófelületei" a vizsgált  $\mathbf{X}$  értékre összeérjenek, ugyanis egy ilyen ponton áthaladva a paraméterekkel, nem tudnánk kiküszöbölni azt, hogy a rendszer állapota bizonyos valószínűséggel át ne csússzon egy másik energiájú sajátállapotba. Ekkor a továbbiakban már a két sajátállapot szuperponált állapotába kerülhetne, amit már nem tudnánk a továbbiakhoz hasonló egyszerű módon kezelni. A fentiekén túl még azt is megköveteljük, hogy azokra a nívókra, amelyekre alkalmazni akarjuk a közelítést, teljesüljön a "gap-feltétel", vagyis a nívók a vizsgált  $\mathbf{X}$  értékre elég távol legyenek egymástól. Ez az elég távol azt jelenti, hogy a változás energiája jóval kisebb legyen a két nívó közötti gapnél:

$$E_n(\mathbf{X}(t)) - E_{n+1}(\mathbf{X}(t)) \gg \hbar \left| \frac{\langle n, \mathbf{X}(t) | \partial_t H(\mathbf{X}(t)) | n+1, \mathbf{X}(t) \rangle}{E_n(\mathbf{X}(t)) - E_{n+1}(\mathbf{X}(t))} \right| \quad (5)$$

Tulajdonképpen e feltétel fejezi ki a közelítés adiabatikus voltát.

### C. Következmény Abeli esetben

Amennyiben a fenti feltételek teljesülnek, és a rendszernek az a sajátaltere, melyből az időfejlődést indítjuk, nem degenerált, akkor a rendszer állapota, mialatt (3) fejleszti az időben, megmarad a kiindulási egydimenziós altérben a kvantum-adiabatikus tétel szerint. Ekkor az állapotvektor csak egy egységnyi abszolútértékű komplex faktorban változhat meg. A fázisfaktorral való szorzás felfogható egy  $U(1)$  mértéktranszformációnak. Mivel  $U(1)$  csoport elemei kommutálnak egymással, Abel-csoportot alkotnak, innen jön ennek az esetnek az elnevezése.

A fentiek fényében az állapotvektor bármely időpontban előállítható a következőképpen:

$$|\psi(t)\rangle = a^{(n)}(t)b^{(n)}(t)|n, \mathbf{X}(t)\rangle, \quad (6)$$

ahol az előbb említett fázisfaktort két részre bontottuk. Ezek is egységnyi abszolútértékűek, vagyis fázisfaktorok. A rendszert a

$$|\psi(0)\rangle = |n, \mathbf{X}(0)\rangle \quad (7)$$

kezdeti feltétel szerint az  $n$ -dik energiasajátállapotából indítottuk.  $a^{(n)}(t)$  a szokásos dinamikai fázisfaktor:

$$a^{(n)}(t) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \int_0^t E_n(\tau) d\tau\right), \quad (8)$$

ennek leválasztására a további számítások alapján látható praktikus indokunk van.  $b^{(n)}(t)$  kiszámításához írjuk be (6)-ot az időfejlődést leíró Schrödinger-egyenletbe: (a jobb olvashatóság kedvéért egyszerűsítjük a jelölést:  $a^{(n)}(t) \equiv a$ ,  $b^{(n)}(t) \equiv b$ ,  $H(\mathbf{X}(t)) \equiv H$ ,  $E_n(\mathbf{X}(t)) \equiv E_n$ ,  $|n, \mathbf{X}(t)\rangle \equiv |n\rangle$ , tehát elhagyjuk az időfüggés jelölését is, de nem felejtjük el, hogy gyakorlatilag minden függ az időtől.)

$$i\hbar d_t(ab|n\rangle) = Hab|n\rangle, \quad (9)$$

$$i\hbar(\dot{a}b|n\rangle + a\dot{b}|n\rangle + ab d_t|n\rangle) = abH|n\rangle, \quad (10)$$

$$i\hbar\left(\frac{-i}{\hbar}E_n b|n\rangle + \dot{b}|n\rangle + b d_t|n\rangle\right) = bE_n|n\rangle. \quad (11)$$

Szorozzuk be (11)-et, a kiindulási állapot konjugáltjának megfelelő  $\langle n|$  bra-vektorral balról! Ekkor:

$$\langle n|d_t|n\rangle = \frac{\dot{b}}{b} = d_t \log b. \quad (12)$$

Ez egy elsőrendű differenciálegyenlet  $b^{(n)}(t)$ -re. Megoldása:

$$b^{(n)}(t) = \exp\left(-\int_0^t \langle n, \mathbf{X}(\tau)|\frac{d}{d\tau}|n, \mathbf{X}(\tau)\rangle d\tau\right). \quad (13)$$

Vegyük szemügyre az exponensben szereplő integrandust! Itt két észrevétel adódik. Mivel az energiasajátállapotok normáltak:  $\langle n|n\rangle = 1$ , ekkor  $d_t(\langle n|n\rangle) = (d_t\langle n|)|n\rangle + \langle n|d_t|n\rangle = 0$ . Valamint  $(d_t\langle n|)|n\rangle = \langle n|d_t|n\rangle$  miatt  $\langle n|d_t|n\rangle = -\langle n|d_t|n\rangle$ , tehát  $\langle n|d_t|n\rangle$  exponens tisztán képzetes mennyiség, így  $b_n(t)$  valóban fázisfaktor, ahogy vártuk. Másrészt az integrandusban  $|n\rangle$  időfüggése csak impliciten,  $\mathbf{X}(t)$ -n keresztül nyilvánul meg, vagyis

$$\frac{d}{dt}|n, \mathbf{X}(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial X^\mu}|n, \mathbf{X}(t)\rangle \frac{dX^\mu}{dt}. \quad (14)$$

(A paramétertéren használjuk az Einstein-konvenciót.) Ennek segítségével az időintegrált átírhatjuk görbementi integrállá.

A továbbiakban legyen a változás ciklikus, vagyis adott  $t = T$  időpontra a paraméterek térjenek vissza kezdeti állapotukba:  $\mathbf{X}(T) = \mathbf{X}(0)$ , vagyis egy zárt  $C$  görbén visszük végig a rendszert  $\mathcal{M}$ -ben. Ekkor az időfeljődés alatt a vizsgált sajátaltér is visszatér eredeti helyére,  $(|n, \mathbf{X}(T)\rangle = |n, \mathbf{X}(0)\rangle)$  és nekünk csak a fázisfaktort kell foglalkoznunk. Ekkor:

$$b_C^{(n)} = \exp\left(-\oint_C \langle n, \mathbf{X}|\frac{\partial}{\partial X^\mu}|n, \mathbf{X}\rangle dX^\mu\right) \quad (15)$$

E fázisfaktor neve: Berry-féle fázis. Az exponensben szereplő integrál nagysága csupán  $C$  görbe alakjától függ, a változás sebességétől nem, tehát tisztán *geometriai* jelentéssel bír.

Bevezethetjük ekkor a

$$A_\mu^{(n)}(\mathbf{X}) := i\langle n, \mathbf{X}|\partial_\mu|n, \mathbf{X}\rangle \quad (16)$$

$\mathcal{M}$ -en értelmezett  $\dim\mathcal{M}$  komponensű kovariáns vektormezőt, melyet Berry-féle vektorpotenciálnak nevezünk. Ennek görbementi integrálja megadja a keresett fázist.

Nem véletlenül hívjuk (16)-ot vektorpotenciálnak, ugyanis integrálja mértékinvariáns. A sajátfüggvények csak fázisfaktor erejéig meghatározottak, ez alapján a (16) csak egy skalárfüggvény gradiense erejéig lesz meghatározott. Valóban:

$$|n, \mathbf{X}\rangle' = |n, \mathbf{X}\rangle e^{i\alpha(\mathbf{X})}, \quad (17)$$

$$A_\mu^{(n)} = ie^{-i\alpha(\mathbf{X})}\langle n, \mathbf{X}|\partial_\mu(|n, \mathbf{X}\rangle e^{i\alpha(\mathbf{X})}) = A_\mu^{(n)} - \partial_\mu\alpha(\mathbf{X}) \quad (18)$$

ahol erősen kihasználtuk a (17)  $U(1)$  mértéktranszformáció Abeli voltát, vagyis, hogy a fázisfaktorttal való szorzás a vektorpotenciállal felcserélhető.

A paramétertér dimenziószáma az adott problémától függően tetszőlegesen nagy lehet. A további számításokhoz ezért differenciálformákat fogunk használni, melyekkel a vonal és felületi integrál általánosítható tetszőleges dimenziószámú terekre. (Lásd még [1]-ben, matematikai részletességű megalapozását pedig [3]-ban.)

Vezessük be (16)-tal a

$$A^{(n)} := A_\mu^{(n)}(\mathbf{X})dX^\mu \quad (19)$$

Berry-féle egy-formát! Ennek külső deriválásával kaphatjuk a Berry-féle görbületi két-formát:

$$F^{(n)} := dA^{(n)} = \partial_\nu A_\mu^{(n)}dX^\nu \wedge dX^\mu = \frac{1}{2}(\partial_\mu A_\nu^{(n)} - \partial_\nu A_\mu^{(n)})dX^\mu \wedge dX^\nu \quad (20)$$

az antiszimmetrikus részt véve, hiszen  $dX^\mu \wedge dX^\nu$  antiszimmetrikus. Ekkor

$$F_{\mu\nu}^{(n)} = \partial_\mu A_\nu^{(n)} - \partial_\nu A_\mu^{(n)} \quad (21)$$

a kétszer kovariáns görbületi tenzor. (Az  $\mathbf{X}$ -helyfüggést a könnyebb olvashatóság kedvéért nem jelöljük.)

Ekkor a fázist, amelyet tetszőleges dimenziószámú térben a Berry-féle egy-formának egy  $C$  görbe mentén történő integrálásával kaptunk, kiszámíthatjuk a Stokes-tétel differenciálformákkal való általánosítása értelmében a görbületi két-forma  $C$  által határolt  $S$  felületen történő integrálásával:

$$b_C^{(n)} = \exp\left(i \oint_{\partial S \equiv C} A^{(n)}\right) = \exp\left(i \int_S dA^{(n)}\right) = \exp\left(i \int_S F^{(n)}\right) \quad (22)$$

Természetesen az integrál így, formákkal számolva is mértékinvariáns lesz, azonban formákkal számolva látszik az is, hogy ez általánosságban a (20) görbületi két-forma invarianciájából adódik:

$$A'^{(n)} = A^{(n)} - d\alpha(\mathbf{X}) \quad (23)$$

$$F'^{(n)} = dA'^{(n)} = dA^{(n)} - dd\alpha(\mathbf{X}) = F^{(n)} \quad (24)$$

mivel a kétszeres külső deriválás nullát ad.

#### D. Következmény nem-Abeli esetben

Amennyiben az időfejlődés alatt bejárt  $\mathbf{X}$  paraméterek esetén az energianívókra teljesül a gap-feltétel, de a kiindulási állapot energianívója a bejárt paraméterekre végig  $M$ -szeresen elfajult:

$$H(\mathbf{X}(t))|n, j, \mathbf{X}(t)\rangle = E_n(\mathbf{X}(t))|n, j, \mathbf{X}(t)\rangle, \quad j = 1, \dots, M. \quad (25)$$

Ekkor az  $n$ -dik nívóhoz tartozó sajátaltér az időfejlődés során elfordul  $\mathcal{H}$ -ban, de dimenziószáma végig  $M$  marad. Továbbá álljon fenn a kvantum-adiabatikus tétel, vagyis ekkor is megmarad a rendszer állapota ezen a nívón, de az időfejlődés során az állapotvektorunk elfordulhat e sajátaltérben. Tehát helyzetünk nehezebb, mint Abeli esetben. Ezt a hatást egy  $M \times M$ -es időfüggő unitér transzformációval írhatjuk le.  $\mathcal{U}(t) \in SU(M)$ .  $SU(M)$  nem Abelcsoport, ha  $M > 1$ , ekkor elemei nem kommutálnak egymással. Ezért nevezzük ezt az elfajult-alterű időfejlődést nem-Abelinek.

Induljunk ki az  $n$ -dik nívón lévő  $j$ -dik sajátállapotból.

$$|\psi(t)\rangle = a^{(n)}(t)|n, j, \mathbf{X}(t)\rangle \mathcal{U}^{(n)}(t) = a^{(n)}(t) \sum_k |n, k, \mathbf{X}(t)\rangle \mathcal{U}_{kj}^{(n)}(t), \quad (26)$$

ahol

$$|\psi(0)\rangle = |n, j, \mathbf{X}(0)\rangle \quad (27)$$

Itt ismét egyszerűsíti a dolgunkat, hogy (26)-ban a szokásos (8) dinamikai fázisfaktort leválasztjuk.

$\mathcal{U}(t)$  kiszámítása az Abeli esethez hasonlóan történik, írjuk be (26)-ot a Schrödinger-egyenletbe: (A jobb olvashatóság kedvéért ismét elhagyjuk az időfüggés jelölését, valamint egy tagban lévő azonos indexekre jelölés nélkül összegyűnk.)

$$i\hbar d_t(a|n, k\rangle \mathcal{U}_{kj}) = H a|n, k\rangle \mathcal{U}_{kj}, \quad (28)$$

$$i\hbar(\dot{a}|n, k\rangle \mathcal{U}_{kj} + a d_t|n, k\rangle \mathcal{U}_{kj} + a|n, k\rangle \dot{\mathcal{U}}_{kj}) = a H|n, k\rangle \mathcal{U}_{kj}, \quad (29)$$

$$i\hbar\left(\frac{-i}{\hbar} E_n |n, k\rangle \mathcal{U}_{kj} + |n, k\rangle \dot{\mathcal{U}}_{kj} + d_t|n, k\rangle \mathcal{U}_{kj}\right) = E_n |n, k\rangle \mathcal{U}_{kj}. \quad (30)$$

Szorozzuk be (30)-at, egy ugyanabban az altérben lévő tetszőleges másik  $\langle n, l \neq j|$  sajátvektorral balról!

$$\dot{\mathcal{U}}_{lj}^{(n)} = i\mathcal{A}_{lk} \mathcal{U}_{kj}^{(n)}, \quad (31)$$

ahol

$$\mathcal{A}_{lk}^{(n)} = i\langle n, l, \mathbf{X}(t)| \frac{d}{dt} |n, k, \mathbf{X}(t)\rangle. \quad (32)$$

Tehát

$$\dot{\mathcal{U}}^{(n)}(t) = i\mathcal{A}^{(n)}(t)\mathcal{U}^{(n)}(t), \quad \mathcal{U}^{(n)}(0) = I \quad (33)$$

operátor-differenciálegyenletet kaptuk. Ennek megoldása nem megy olyan simán, mint az Abeli esetben, mert  $\mathcal{A}^{(n)}(t)$  operátor általában nem kommutál különböző időargumentumra:

$$[\mathcal{A}^{(n)}(t_1), \mathcal{A}^{(n)}(t_2)] \neq 0, \quad t_1 \neq t_2 \quad (34)$$

Integráljuk (33)-t!

$$\mathcal{U}^{(n)}(t) = I + i \int_0^t \mathcal{A}^{(n)}(t_1) \mathcal{U}^{(n)}(t_1) dt_1 \quad (35)$$

Ekkor (35) jobb oldalába önmagát szukszszesszíven behelyettesíthetjük, így csak  $\mathcal{A}^{(n)}$ -től függő mennyiséget kapunk:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}^{(n)}(t) = & I + i \int_0^t dt_1 \mathcal{A}^{(n)}(t_1) + i^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \mathcal{A}^{(n)}(t_1) \mathcal{A}^{(n)}(t_2) + \dots \\ & i^p \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{p-1}} dt_p \mathcal{A}^{(n)}(t_1) \mathcal{A}^{(n)}(t_2) \dots \mathcal{A}^{(n)}(t_p) + \dots \end{aligned} \quad (36)$$

Az integrandusokban az operátorok időargumentuma ballról jobbra csökken:  $t \geq t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq t_p \geq 0$ . A  $\mathcal{T}$  időrendező szorzás bevezetésével (36) rövidebb alakba írható:

$$\mathcal{U}^{(n)}(t) = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p!} i^p \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_p} dt_p \mathcal{T}(\mathcal{A}^{(n)}(t_1) \dots \mathcal{A}^{(n)}(t_p)) = \mathcal{T} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p!} i^p \left( i \int_0^t dt_1 \mathcal{A}^{(n)}(t_1) \right)^p. \quad (37)$$

(Az integrálások sorrendje felcserélhető, csak az  $\mathcal{A}^{(n)}(t_p)$ -ké nem, és minden integrálás  $t$ -ig megy, emiatt kaptuk az  $\frac{1}{p!}$  faktort.) Ez pedig épp az exponenciális függvény hatványsora, tehát:

$$\mathcal{U}^{(n)}(t) = \mathcal{T} \left( \exp \left( i \int_0^t \mathcal{A}^{(n)}(\tau) d\tau \right) \right) \quad (38)$$

mátrix lesz (33) egyenlet általános megoldása. Ciklikus paraméterváltozást feltételezve, valamint (14) miatt ekkor

$$\mathcal{U}_{lj}^{(n)}(C) = \mathcal{P} \left( \exp \left( i \oint_C \mathcal{A}_\mu^{(n)} d\mathbf{X}^\mu \right) \right)_{lj}, \quad (39)$$

lesz a geometriai hatást leíró transzformáció ahol

$$\mathcal{A}_{\mu l j}^{(n)}(\mathbf{X}) = i \langle n, l, \mathbf{X} | \partial_\mu | n, j, \mathbf{X} \rangle \quad (40)$$

alapján bevezethetjük az  $\mathcal{A}_\mu^{(n)}$  vektorpotenciált, amely egy  $\mathcal{U} \subset \mathcal{M}$ -en értelmezett *mátrix értékű* vektorpotenciál megfelelő komponense.

Definiáljuk ezzel a

$$\mathcal{A}^{(n)} := \mathcal{A}_\mu^{(n)}(\mathbf{X}) dX^\mu \quad (41)$$

Wilczek-Zee-féle mátrix-értékű egy-formát! Milyen lesz ekkor annak a két-formának az alakja, melynek felületi integráljára pontosan azt a mátrixot kapjuk, amelyet (41)-nek a felület körüli vonalintegráljával? Megmutatható, hogy a (20) módjára definiált két-forma ezt nem tudja teljesíteni. Az előző esethez képest a nehézséget az okozza, hogy általában  $[\mathcal{A}_\mu^{(n)}, \mathcal{A}_\nu^{(n)}] \neq 0$  ha  $\mu \neq \nu$ . Bizonyítható, hogy a nem-Abeli esetben működő  $\mathcal{F}^{(n)}$  két-formát a következőképpen kaphatjuk:

$$\mathcal{F} := d\mathcal{A} - i\mathcal{A} \wedge \mathcal{A} = (\partial_\mu \mathcal{A}_\nu - i\mathcal{A}_\mu \mathcal{A}_\nu) dX^\mu \wedge dX^\nu = \frac{1}{2} (\partial_\mu \mathcal{A}_\nu - \partial_\nu \mathcal{A}_\mu - i[\mathcal{A}_\mu, \mathcal{A}_\nu]) dX^\mu \wedge dX^\nu \quad (42)$$

az antiszimmetrikus részt véve, ahol

$$\mathcal{F}_{\mu\nu}^{(n)} = \partial_\mu \mathcal{A}_\nu^{(n)} - \partial_\nu \mathcal{A}_\mu^{(n)} - i[\mathcal{A}_\mu^{(n)}, \mathcal{A}_\nu^{(n)}] \quad (43)$$

a kétszer kovariáns, mátrix értékű görbületi tenzor. (A helyfüggést és a mátrixindexeket a könnyebb olvashatóság kedvéért nem jelöljük.) Láthatjuk, hogy Abeli esetben visszakapjuk (20) és (21) alakját.

Ekkor a Stokes-tétel a (42)-ben látható módon definiált nem-Abeli egy- és két-formák vonal illetve felületi integrálja között teremt kapcsolatot:

$$\mathcal{U}^{(n)}(C) = \mathcal{P} \exp \left( i \oint_{\partial S \equiv C} \mathcal{A}^{(n)} \right) = \mathcal{P} \exp \left( i \int_S dA^{(n)} - i \mathcal{A}^{(n)} \wedge \mathcal{A}^{(n)} \right) = \mathcal{P} \exp \left( i \int_S \mathcal{F}^{(n)} \right). \quad (44)$$

Nézzük még meg e nem-Abeli esetben a Berry-féle egy-forma (41) és két-forma (42) mértéktranszformációját! Itt a Hamiltoni sajátfüggvényei az adott  $n$ -dik altérben csak egy  $M \times M$ -es unitér forgatás erejéig meghatározottak, ugyanis a degenerált nívón lévő sajátfüggvények tetszőleges lineárkombinációja is ugyanahhoz a nívóhoz tartozó sajátfüggvényt ad. A mértéktranszformáció ekkor

$$|n, k, \mathbf{X}(t)\rangle' = |n, i, \mathbf{X}(t)\rangle \mathcal{V}_{ik}^{(n)}(t), \quad (45)$$

$$\mathcal{A}'_{\mu kl}{}^{(n)} = i \mathcal{V}_{ki}^{(n)\dagger} \langle n, i, \mathbf{X} | \partial_\mu \left( |n, j, \mathbf{X}\rangle \mathcal{V}_{jl}^{(n)} \right) = \mathcal{V}_{ki}^{(n)\dagger} \mathcal{A}_{\mu ij}^{(n)} \mathcal{V}_{jl}^{(n)} + i \mathcal{V}_{ki}^{(n)\dagger} \partial_\mu \mathcal{V}_{il}^{(n)}, \quad (46)$$

$$\mathcal{A}'_\mu{}^{(n)} = \mathcal{V}^{(n)\dagger} \mathcal{A}_\mu^{(n)} \mathcal{V}^{(n)} + i \mathcal{V}^{(n)\dagger} \partial_\mu \mathcal{V}^{(n)} \quad (47)$$

a nem-Abeli vektorpotenciál mátrixaira. Így kapjuk az (41) egy-formára:

$$\mathcal{A}'^{(n)} = \mathcal{V}^{(n)\dagger} \mathcal{A}^{(n)} \mathcal{V}^{(n)} + i \mathcal{V}^{(n)\dagger} d\mathcal{V}^{(n)} \quad (48)$$

Tehát egy ilyen egy-forma mértéktranszformációja egészen szokatlan formát ölt. Viszont az integrálok egyenlőségének megteremtése miatt (42) módjára definiált kétforma egyszerűen kovariánsan transzformálódik:

$$\mathcal{F}'^{(n)} = d\mathcal{A}'^{(n)} - i \mathcal{A}'^{(n)} \wedge \mathcal{A}'^{(n)} = \dots = \mathcal{V}^{(n)\dagger} \left( d\mathcal{A}^{(n)} - i \mathcal{A}^{(n)} \wedge \mathcal{A}^{(n)} \right) \mathcal{V}^{(n)} = \mathcal{V}^{(n)\dagger} \mathcal{F}^{(n)} \mathcal{V}^{(n)} \quad (49)$$

tehát az exponenciális függvény hatványsora, valamint  $\mathcal{V}^{(n)}$  unitér tulajdonsága miatt:

$$\mathcal{U}'^{(n)} = \mathcal{P} \exp \left( i \int_S \mathcal{F}'^{(n)} \right) = \mathcal{P} \exp \left( i \int_S \mathcal{V}^{(n)\dagger} \mathcal{F}^{(n)} \mathcal{V}^{(n)} \right) = \mathcal{P} \exp \left( \mathcal{V}^{(n)\dagger} \left( i \int_S \mathcal{F}^{(n)} \right) \mathcal{V}^{(n)} \right) = \mathcal{V}^{(n)\dagger} \mathcal{U}^{(n)} \mathcal{V}^{(n)} \quad (50)$$

(Az integrandusban szereplő két-forma elforgatottjának felületi integrálja nyilván az eredeti integrál elforgatottja. Tartsuk szem előtt, hogy a  $\mathcal{V}^{(n)}$  elforgatás  $\mathcal{H}$   $E_n$  energiájú alterében történik, az integrálás pedig egy  $\mathcal{M}$ -ben lévő görbe mentén!)

## II. KVANTUMSZÁMÍTÁS ÉS GEOMETRIAI FÁZISOK

### A. Bevezetés

A kvantuminformációelmélet keretében az információ fogalmának egy merőben új megközelítésével találkozhatunk.

A klasszikus információelméletben az információt bináris értékek kódolják. Erre utal a klasszikus információ alapegységének, a bitnek neve is: az angol "binary digit" kifejezés rövidítése. Egy bit az az információmennyiség, amihez akkor jutunk, ha megtudjuk, hogy két független, egymást kizáró, és azonos valószínűségű esemény közül melyik következett be.

A klasszikus információt klasszikus számítógépek kezelik, előttem is itt van egy, amin épp e dolgot írom. A klasszikus számítógép belsejében egy bitnyi információt tárolhat például egy vezeték, amin két jól elkülöníthető feszültség szint lehetséges, egy memóriacella félvezetőkristálya, amelyben két jól elkülöníthető mennyiségben lehetnek elektronok, egy kis terület egy ferromágneses korongon, amelynek mágneszettsége szintén két jól elkülöníthető értéket vehet fel, és még sorolhatnám. Első körben felmerülhet a kérdés: nem lehetne-e sokkal több információt tárolni a fenti módoknál? Vegyük például a memóriacellát: a mai technikai feltételek mellett a miniaturizálás magas fokot ért el, de még így is sok-tízezer elektron van abban a cellában, amelyiken mi csak egy bitnyi – nagyon kevés – információt akarunk raktározni. Ez elég pazarló megoldásnak tűnik, de legalább így nagyon könnyen kezelhető az információ. Viszont elvileg akár egyetlen elektron ottléte, vagy ott-nem-léte is megadná nekünk az egy bit információt. Csak egy baj van az iménti állítással: ilyen kis mennyiségnél már közbeszólnak a kvantumjelenségek. Egy elektron jelenléte egy helyen ugyanis a kvantummechanika törvényei szerint csak bizonyos valószínűséggel adható meg. Tehát ha eme egy elektront befogadni képes memóriacellánkban bekapcsolunk egy potenciált, amivel "odacsalogathatunk" egy elektront, akkor az elektron ottlétének valószínűségét úgy kaphatjuk, hogy – az adott potenciált tartalmazó – Schrödinger-egyenlet megoldásaként kapott állapotfüggvény abszolútérték-négyzetét kiintegráljuk a memóriacella

térfogatára. Az állapotfüggvény egy egészséges potenciál esetén legalább exponenciálisan tűnik el a végtelenben, de ennél erősebb levágás is lehetséges, viszont ekkor sem csökken egzaktul nullára, így akármilyen erős potenciált kapcsolunk be, soha nem lesz az elektron megtalálási valószínűsége a cellában 1. Tehát így nem tudunk egy klasszikus bitet tárolni, csupán annak törtrészét, ami a klasszikus információelmélettel nem kezelhető. Ráadásul ha a rendszert leíró Hamiltoni diszkrét spektruma megengedi, akkor az elektron állapota az egyes energiaállapotok lineáris kombinációja lesz, melyek nem kell, hogy egyformán legyenek lokalizáltak a cellára. Ekkor a kvantummechanika mérési axiómája szerint méréskor az állapot az egyik komponensbe fog beugrani a megfelelő lineárkombinációs együttható négyzetének valószínűségével. Így még kevesebb köze lesz a tárolt információnak a klasszikus egy-bithez. Ehhez jön még az a probléma, hogy az információ kinyerésére természetesen csak egy mérést végezhetünk, mivel ez beavatkozást jelent a rendszerbe, és így elveszik az állapot.

Mielőtt továbbmennénk, kívánczok egy rövid kitérőt tennünk: a fentiek fényében hogyan működhet egyáltalán a klasszikus számítógép? Természetesen ez a rendszer is engedelmeskedik a kvantummechanikának. Van azonban egy lényegi különbség, nevezetesen, hogy sok elektront használ, és mégis csak az érdekli, hogy nagyon sok vagy nagyon kevés elektron van-e a cellában. Emiatt nem lesz érzékeny arra, hogy egy-egy elektron csak bizonyos – bár elég nagy – valószínűséggel tartózkodik a cellában, mivel igen kicsi lehet a valószínűsége annak, hogy hosszabb ideig egyszerre olyan kevés legyen az elektronok megtalálási valószínűsége, ami hibát okozna az információtárolásban. (Kvantummechanikai szempontból tulajdonképpen ez történik akkor, ha véletlenül meghibásodik egy memóriachip.)

Láttuk tehát, hogy kvantumrendszerek információtartalmának kezeléséhez nem elegendő a klasszikus információelmélet. Ezért került kidolgozásra a kvantuminformációelmélet, mely már alapjaiban illeszkedik a kvantumrendszerek sajátosságos jelenségeihez.

A kvantuminformáció alapegysége a qubit. (Quantum bit.) Egy kvantumbitnyi információ előáll két ortonormált kvantumállapot tetszőleges lineárkombinációjából:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad \alpha, \beta \in \mathbf{C} \quad (51)$$

A  $|0\rangle$  és  $|1\rangle$  állapotokat hívjuk információs, vagy számítási bázisnak. Ezt sokféle fizikai rendszeren ábrázolhatjuk, legegyszerűbb példa egy feles spinű részecske, pl. elektron spinsajátállapotai. Egy ilyen (51) állapot végtelen mennyiségű információt tartalmaz, ugyanis a két lineárkombinációs együttható két komplex szám, vagyis négy valós paraméter, és köztük csak két megkötést teszünk: a qubitnek normálnak kell lenni, illetve egy közös fázisfaktor irreleváns az információtárolás szempontjából.

Tehát azt gondolhatnánk, hogy tobzódunk az információmennyiségben, és zavarhatna minket, hogy makroszkópikus esetben hová lesz ez a rengeteg információ, ha nem tudnánk, hogy mikor a kvantuminformációt egy méréssel klasszikus információvá transzformáljuk, akkor a rendszer beugrik  $|\alpha|^2$  valószínűséggel  $|0\rangle$ , és  $|\beta|^2 = 1 - |\alpha|^2$  valószínűséggel  $|1\rangle$  állapotba. Vagyis a kvantumrendszerben rejtőző információmennyiség végtelen, de kinyerni nem lehet ilyen egyszerűen, ugyanis ismételtlen egy mérési lehetőségünk van csupán, és ebből nem tudunk valószínűséget megállapítani. Tehát noha az információtároláshoz elegendő egy elektron, de ahhoz, hogy kiolvassuk, nagyon sok azonos állapotú elektronon kell mérést végeznünk. Minél többön, annál nagyobb pontossággal ismerhetjük meg az  $|\alpha|^2$  értékét. (Lépten-nyomon belebotlunk a kvantummechanika valószínűségi jellegébe. Az ilyenfajta információkezelés klasszikus szemmel nézve merőben szokatlan. Viszont az ilyen valószínűségi mennyiségek hibáját kézben lehet tartani.)

A qubiteket kezelő műveleteket, a "kvantum logikai kapukat" a qubiteken ható unitér transzformációk valósítják meg. A kvantumszámítógép ilyen műveletek sorozatának fizikai realizációja. Ez informatikai kifejezéssel élve "bedrótozott" rendszer, a kvantumalgoritmus maga a hardware.

Egy kvantuminformációelméleti tétel értelmében a qubit kvantumkapukkal nem másolható, ezért az egész kvantumszámítási eljárást már az elejétől sok elektronon kell párhuzamosan végezni, amiken végül mérhetünk. Ezeknek azonos kezdeti állapotokban kell lenni, de ezt még a számítási folyamat előtt beállíthatjuk. A kvantumalgoritmusok feladata, hogy a számításokat olyan formában végezze el, hogy a kimeneten jól mérhető legyen a fontos információhoz tartozó állapot, vagyis a megfelelő valószínűségi amplitúdó elegendően nagy legyen a többihez képest.

Egyelőre azt látjuk, hogy mind a klasszikus, mind a kvantuminformáció kezeléséhez sok részecskére van szükségünk. Miben rejlik mégis a kvantumszámítás óriási ereje? Egy klasszikusan megfoghatatlan kvantumjelenségben, az összefonódott állapotokban. Két állapotvektor, – esetünkben két qubit, – összefonódott állapotba hozható egyszerű kvantumszámítási műveletekkel. Az ilyen részecskék összefonódott állapotukat egymástól eltávolítva is megőrzik, és ennek köszönhetően például az egyik részecskének méréskor lezajló "beugrása" egy állapotba *azonnal* maga után vonja a másik részecske beugrását is. (EPR gondolat kísérlet.) Ez a fénysebességnél gyorsabb korrelációterjedés, mely klasszikusan elképzelhetetlen, a kvantumosan viselkedő részecskék azon sajátosságának következménye, hogy állapotaik végtelenül kiterjedtek a térben. Az összefonódottság jelensége lehetővé teszi például a kvantumállapot teleportálását, – a kauzalitás megsértése nélkül, – illetve azt is, hogy egy többqubites számítás során egy lépésben sok művelet valósuljon meg. Ez utóbbi állítás súlyát jól illusztrálja az, amit példaként meg szoktak ilyenkor említeni, hogy kvantumszámítógéppel a prímszámfaktorizáció polinomidőben végezhető.

A téma rendkívül érdekes és szerteágazó, bővebben lásd [4]-ben.

E beteketés után idő hiányában már csupán a további feladat megértéséhez szükséges minimális anyagot tárgyaljuk.

## B. Kvantum-logikai kapuk

A kvantumszámítási algoritmusok építőkövei a kvantumkapuk, amiket a (51) qubiteken ható unitér operátorokkal írhatunk le. Lássunk két példát:

*Hadamard-kapu:* a Hadamard-transzformációt megvalósító kapu, mely egy tiszta állapotot szuperponált állapotba visz:

$$|0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \quad (52)$$

$$|1\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle), \quad (53)$$

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (54)$$

*Fázistoló kapu:* adott  $\gamma$ -szögű fázistolást valósít meg az egyik bázisállapoton:

$$|0\rangle \rightarrow |0\rangle, \quad (55)$$

$$|1\rangle \rightarrow e^{i\gamma}|1\rangle, \quad (56)$$

$$\Gamma(\gamma) = \begin{pmatrix} 1 & \cdot \\ \cdot & e^{i\gamma} \end{pmatrix} \quad (57)$$

Egy kvantuminformációelméleti tétel szerint a fenti két kapuval minden egyqubites kvantumlogikai művelet előállítható.

N-qubitre alkalmazva külön-külön az egyqubites műveleteket a kiindulási  $|00\dots 0\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \dots \otimes |0\rangle$  állapotot tetszőleges  $|\psi_1\psi_2\dots\psi_N\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle$  állapotba vihetjük, ahol az egyes  $|\psi_i\rangle$  állapotok  $|0\rangle$  és  $|1\rangle$  tetszőleges lineárkombinációját jelentik. Egyqubites kapukkal így csak szeparálható állapotokba vihetjük a qubitjeinket, ami csak egy korlátozott halmaza az N-qubit állapotoknak. Vagyis ekkor csak egymástól függetlenül kezeljük a qubiteket, nem nyílik lehetőségünk a kvantum-összefonódás nyújtotta előnyökre.

Tehát kell egy transzformáció, amely kevert állapotba visz két qubitet. (Ezeket az állapotokat nem lehet egyqubit-állapotok tenzorszorzataként tekinteni.) Az ezt megvalósító egyik kapu például a *kontrollált fázistolókapu*: Az első qubit függvényében végez el egy egyqubites fázistolást a második qubiten.

$$|00\rangle \rightarrow |00\rangle, \quad (58)$$

$$|01\rangle \rightarrow |01\rangle, \quad (59)$$

$$|10\rangle \rightarrow |10\rangle, \quad (60)$$

$$|11\rangle \rightarrow e^{i\gamma}|11\rangle, \quad (61)$$

$$B(\gamma) = \begin{pmatrix} 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & e^{i\gamma} \end{pmatrix} \quad (62)$$

Egy másik kvantuminformációelméleti tétel szerint az egyqubites Hadamard kapu, és kontrollált fázistoló kapu felhasználásával bármely kvantumlogikai algoritmus felépíthető.

## C. Holonomikus kvantumszámítás

A kvantumszámítógép jól kidolgozott elméleti konstrukció, a gyakorlati megvalósítás előtti legfőbb akadály, hogy a műveletek számának növelésével a rendszer koherenciájának fenntartása a környezet hatásaival szemben egyre nehezebb. Vagyis a műveletek számával a számítás hibája megnő. Ennek kiküszöbölésére sokféle módszer született, legkézenfekvőbb volt a redundáns információátároláson alapuló klasszikus hibakorrektions módszerek átültetése a kvantumszámítógépre. A geometriai hatásokon alapuló kvantumszámítás nagy előnye, hogy magából a konstrukcióból adódóan rendkívül hibátűrő.

Ahhoz, hogy egy  $N$ -qubites kvantumszámítást nem-Abeli holonómiával megvalósítsunk, szükségünk van egy  $2^N$ -szeresen elfajult sajátaltérrel rendelkező fizikai rendszerre, amiben elhelyezkednek a qubitek. Mi a továbbiakban



csupán egyetlenqubites műveletet szeretnénk megvalósítani. Az erre kínálkozó *valós* fizikai rendszert fogjuk a következő fejezetben vizsgálni.

Részletesen lásd a témával foglalkozó [5], [6] munkákban.

### III. GEOMETRIAI HATÁSON ALAPULÓ EGY-QUBITES KVANTUMKAPUT MEGVALÓSÍTÓ RENDSZER

Az e fejezetben tárgyalt rendszer szépsége abban rejlik, hogy formára egyszerű, nem csak matematikai mű-modell, hanem a természetben megvalósuló jelenség, és ráadásul egzaktul kiszámolható. Valóságos ajándék a természettől. A szituáció:  $\frac{3}{2}$ -spinű részecske adiabatikusan változó kvadrupól elektromos térben. Az ilyen rendszerek nívóin úgynevezett Kramers-degeneranciák lépnek fel: a nívók kétszeresen elfajultak lesznek, ilyen altér pont alkalmas lesz egy qubit befogadására, vagyis a rendszer állapota egy ilyen nívón egy qubitet reprezentál.

Ízelítő az ilyen jelenséget vizsgáló kísérleti cikkekből: [11], [12], [13]. A számításoknál használt matematikai módszerekhez irodalom [7], [8], [9] és [10].

#### A. A Hamiltoni előkészítése

Az előző fejezet végén található programot megvalósítandó, tekintsük a következő Hamiltonit:

$$H = \mathbf{S} \mathbf{Q} \mathbf{S} = \sum_{i,j=1}^3 Q_{ij} S_i S_j \quad (63)$$

ahol  $\mathbf{S}$  a jól ismert spin-operátor,  $Q$  pedig a kvadratikus potenciált leíró  $3 \times 3$ -as valós elemű mátrix.  $Q := Q(t)$ , vagyis a kvadrupól-tenzor elemei lesznek a Hamiltoni időfüggő paraméterei, és megköveteljük, hogy változása mellett a kvantum-adiabatikus tétel feltételei teljesüljenek! A kölcsönhatás többi tagját időben konstansnak tekintjük, melyek azonosan tolják el a rendszer nívóit.  $Q$  szimmetrikus, nulla-nyomú, valamint kiróható a kvadrupóltér erősségére a  $\langle Q, Q \rangle \equiv \|Q\|^2 = 1$  normálási feltétel, ahol  $\langle A, B \rangle = \frac{3}{2} \text{Tr}(A^T B)$ . (A  $\frac{3}{2}$  konstansnak csupán a továbbiakban látható kényelmi oka van.) A kilencelemű  $Q$  tenzornak így 4 független komponense lesz. Ezek állíthatók kívülről egy megfelelő kísérleti elrendezéssel.

Továbbiakban legyen a spin nagysága  $\frac{3}{2}$ . Ekkor a rendszer állapotait tartalmazó Hilbert tér:  $\mathcal{H} = \mathbf{C}^4$ . Használjunk mátrix reprezentációt, a spin  $z$ -komponensének sajátálapotainak bázisában, ekkor  $H$   $4 \times 4$ -es komplex elemű hermitikus és nullanyomú mátrix. (A nullanyomúság későbbiekben könnyen látható lesz, a hermiticitás  $\mathbf{S}$  hermiticitásából eleve adott.) Fejtsük ki a Hamiltonit  $Q$  szimmetriájának és nyom-nélküliségének figyelembevételével:

$$H = \sum_{i,j=1}^3 Q_{ij} S_i S_j = Q_{11} S_1^2 + Q_{22} S_2^2 - (Q_{11} + Q_{22}) S_3^2 + Q_{12} \{S_1, S_2\} + Q_{13} \{S_1, S_3\} + Q_{23} \{S_2, S_3\}. \quad (64)$$

A mátrix felírásához ( $\hbar = 1$  egységrendszerben) a

$$[S_3, S^2] = 0, \quad (65)$$

$$[S_j, S_k] = i \varepsilon_{jkl} S_l, \quad (66)$$

$$S^2 |s, n\rangle = s(s+1) |s, n\rangle, \quad (67)$$

$$S_3 |s, n\rangle = n |s, n\rangle, \quad (68)$$

$$S_{\pm} = S_1 \pm i S_2, \quad (69)$$

$$S_{\pm} |s, n\rangle = \sqrt{s(s+1) - n(n \pm 1)} |s, n\rangle \quad (70)$$

kifejezések segítségével előállíthatjuk a spinoperátorok mátrixait, (lásd az Appendixben,) melyekkel a Hamiltoni mátrixa:

$$H = \sqrt{3} \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{3}}{2}(Q_{11} + Q_{22}) & Q_{13} - iQ_{23} & \frac{1}{2}(Q_{11} - Q_{22}) - iQ_{12} & 0 \\ Q_{13} + iQ_{23} & \frac{\sqrt{3}}{2}(Q_{11} + Q_{22}) & 0 & \frac{1}{2}(Q_{11} - Q_{22}) - iQ_{12} \\ \frac{1}{2}(Q_{11} - Q_{22}) + iQ_{12} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}(Q_{11} + Q_{22}) & -Q_{13} + iQ_{23} \\ 0 & \frac{1}{2}(Q_{11} - Q_{22}) + iQ_{12} & -Q_{13} - iQ_{23} & -\frac{\sqrt{3}}{2}(Q_{11} + Q_{22}) \end{pmatrix}. \quad (71)$$

Eddig a  $Q_{ij}$  időfüggő paraméterekre vonatkozó megszorításokból a normafeltételt nem használtuk ki, így a Hamiltonink öt független paraméterrel keverhető ki. (71) alakjára ránézve kívánczik a következő előállítás:

$$H(Q) = H(\mathbf{X}) = \sum_{\mu=0}^4 X^\mu T_\mu \quad (72)$$

ami egy (64)-nél előnyösebb felírás. Az  $X^\mu$ -k a  $Q \in \mathbf{R}$  paraméterek valós lineárkombinációiból áll,  $T_\mu$  pedig a megfelelő mátrix:

$$X^0 := \frac{\sqrt{3}}{2}(Q_{11} - Q_{22}), \quad T_0 := \frac{1}{\sqrt{3}}(S_1^2 - S_2^2) = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 \\ 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot & \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdot & I \\ I & \cdot \end{pmatrix}, \quad (73a)$$

$$X^1 := \sqrt{3}Q_{13}, \quad T_1 := \frac{1}{\sqrt{3}}\{S_1, S_3\} = \begin{pmatrix} \cdot & 1 & \cdot & \cdot \\ 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 \\ \cdot & \cdot & -1 & \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & \cdot \\ \cdot & -\sigma_1 \end{pmatrix}, \quad (73b)$$

$$X^2 := \sqrt{3}Q_{23}, \quad T_2 := \frac{1}{\sqrt{3}}\{S_2, S_3\} = \begin{pmatrix} \cdot & -i & \cdot & \cdot \\ i & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & i \\ \cdot & \cdot & -i & \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_2 & \cdot \\ \cdot & -\sigma_2 \end{pmatrix}, \quad (73c)$$

$$X^3 := -\frac{3}{2}(Q_{11} + Q_{22}), \quad T_3 := \frac{1}{\sqrt{3}}(S_3^2 - \frac{1}{3}S^2) = \begin{pmatrix} 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & -1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & -1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_3 & \cdot \\ \cdot & -\sigma_3 \end{pmatrix}, \quad (73d)$$

$$X^4 := \sqrt{3}Q_{12}, \quad T_4 := \frac{1}{\sqrt{3}}\{S_1, S_2\} = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & -i & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & -i \\ i & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & i & \cdot & \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdot & -iI \\ iI & \cdot \end{pmatrix}, \quad (73e)$$

$T_\mu \in SU(4)$  és önadjungált nullanyomú mátrixok. A konstans faktorok megfelelő megválasztása – további kényelmi szempontokon túl – arra nézve történt, hogy a  $Q$ -ra vonatkozó normálási feltétel a  $X^\mu$  együtthatókból képzett vektor normálási feltételébe menjen át. Valóban:

$$|\mathbf{X}|^2 = 3(Q_{12}^2 + Q_{23}^2 + Q_{13}^2 + Q_{11}^2 + Q_{22}^2 + Q_{11}Q_{11}) = \frac{3}{2}\text{Tr}Q^2 = \langle Q, Q \rangle = 1 \quad (74)$$

ahol kihasználtuk  $Q$  szimmetriáját.

Tehát a (72) formájú Hamiltoni paramétere egy  $\mathbf{X} = \mathbf{X}(t)$  ötkomponensű, időfüggő, normált vektor. Az ilyenek  $S^4$ -en helyezkednek el, mely az ötdimenzióba beágyazható négydimenziós "egységömbfelület". Tehát  $\mathcal{M} \equiv S^4$ .

A  $T_\mu$  mátrixok tehát  $2 \times 2$ -es blokkokból állnak, könnyen felfedezhetőek bennük a jól ismert  $\sigma_\mu$  ( $\mu = 1..3$ ) Pauli-mátrixok. Ez magában rejt egy lehetőséget: ugyanis a kvaterniókat ( $q \in \mathbf{H}$ ,  $q = 1q^0 + iq^1 + jq^2 + kq^3$ ) reprezentálhatjuk  $2 \times 2$ -es komplexelemű mátrixokkal például oly módon, hogy  $1 = I$ ,  $\mathbf{i} = -i\sigma_1$ ,  $\mathbf{j} = -i\sigma_2$ ,  $\mathbf{k} = -i\sigma_3$  lesznek a kvaternionikus egységek reprezentánsai. ( $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$  a kvaternionikus képzetes egységek,  $\mathbf{i}^2 = \mathbf{j}^2 = \mathbf{k}^2 = -1$ , valamint fennállnak:  $\mathbf{ij} = \mathbf{k}$ ,  $\mathbf{ji} = -\mathbf{k}$  összefüggések,  $\mathbf{ijk}$  ciklikus permutációira. A kvaterniókkal való műveletek definícióit, valamint egyszerűbb összefüggéseket lásd az appendixben.) Amennyiben  $T_\mu$  mátrixokat megfelelő alakra hozzuk egy bázistranszformációval, akkor  $M(4, \mathbf{C})$  (négyes négyes komplex-elemű mátrixok) helyett  $M(2, \mathbf{H})$  mátrixokat használhatunk. Az ezzel a lépéssel járó fáradság a későbbiekben jócskán megtérül, ugyanis a további számolásokat a kvaternionikus reprezentáció jóval könnyebbé és elegánsabbá teszi. Tehát következő lépésként transzformáljuk egy  $U$  unitér transzformációval az egyszerű spinsajátállapot-bázisunkat egy alkalmasabbra, melyben a  $T_\mu$  mátrixok alakja  $2 \times 2$ -es blokkokból áll:

$$\tilde{T}_\mu = U^\dagger T_\mu U, \quad U = \begin{pmatrix} I & iI \\ iI & I \end{pmatrix}, \quad U^\dagger = U^{-1} \quad (75)$$

Ekkor a báziselemek a következő módon transzformálódnak:

$$|\tilde{\phi}_i\rangle = U^\dagger |\phi_i\rangle \quad (76)$$

Ekkor a  $\tilde{T}_\mu$  mátrixok a következők lesznek:

$$\tilde{T}_0 = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 \\ 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot & \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdot & I \\ I & \cdot \end{pmatrix}, \quad \Gamma_0 = \begin{pmatrix} \cdot & 1 \\ 1 & \cdot \end{pmatrix}, \quad (77a)$$

$$\tilde{T}_1 = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & i \\ \cdot & \cdot & i & \cdot \\ \cdot & -i & \cdot & \cdot \\ -i & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdot & i\sigma_1 \\ -i\sigma_1 & \cdot \end{pmatrix}, \quad \Gamma_1 = \begin{pmatrix} \cdot & -\mathbf{i} \\ \mathbf{i} & \cdot \end{pmatrix}, \quad (77b)$$

$$\tilde{T}_2 = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & 1 \\ \cdot & \cdot & -1 & \cdot \\ \cdot & -1 & \cdot & \cdot \\ 1 & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdot & i\sigma_2 \\ -i\sigma_2 & \cdot \end{pmatrix}, \quad \Gamma_2 = \begin{pmatrix} \cdot & -\mathbf{j} \\ \mathbf{j} & \cdot \end{pmatrix}, \quad (77c)$$

$$\tilde{T}_3 = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & i & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & -i \\ -i & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & i & \cdot & \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdot & i\sigma_3 \\ -i\sigma_3 & \cdot \end{pmatrix}, \quad \Gamma_3 = \begin{pmatrix} \cdot & -\mathbf{k} \\ \mathbf{k} & \cdot \end{pmatrix}, \quad (77d)$$

$$\tilde{T}_4 = \begin{pmatrix} 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & -1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & \cdot \\ \cdot & -I \end{pmatrix}, \quad \Gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & \cdot \\ \cdot & -1 \end{pmatrix}, \quad (77e)$$

Az unitér transzformáció ismert tulajdonságai miatt  $\tilde{T}_\mu$ -k is megőrzik  $T_\mu$ -k jellegzetességeit: a nyomot, determinánst, önadjungáltságot, és még az unitaritást is. Az áttérés a  $\Gamma_\mu$  mátrixokra már kissé bonyolítja a helyzetet. Ezek  $\Gamma_\mu \in Sp(2)$ , kvaternió-önadjungált nullanyomú és  $-1$ -determinánsú mátrixok. A továbbiakban a  $\Gamma_\mu$  mátrixokat használjuk. (Megjegyezzük, hogy előjeltől eltekintve  $\Gamma_\mu$   $\mu = 1 \dots 4$  a relativisztikus kvantumelektrodinamikából ismert Dirac-féle mátrixok, valamint előjelük a korábbi definíciókból következett, és más választással akár előjelhelyesen is megkaphattuk volna őket. A további számítások lényegi különbség nélkül végigvihetők lennének az előjelhelyes Dirac-mátrixokkal is, a mi előjelválasztásunknak csupán konvencionális okai vannak.)

A  $\sigma_\mu$ ,  $\mu = 0..3$  Pauli mátrixok (ahol  $\sigma_0 = I$ ) közismerten teljesítik a *Clifford-algebrára* jellemző antikommutációs relációkat:

$$\{\sigma_\mu, \sigma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}I. \quad (78)$$

Ennek segítségével könnyen megmutatható, hogy  $T_\mu$  mátrixok is tudják a Clifford-algebra tulajdonságot, és az unitér transzformáció könnyen láthatóan ezt is megőrzi:

$$\{\tilde{T}_\mu, \tilde{T}_\nu\} = U^\dagger T_\mu U U^\dagger T_\nu U + U^\dagger T_\nu U U^\dagger T_\mu U = U^\dagger \{T_\mu, T_\nu\} U = 2\delta_{\mu\nu}I, \quad (79)$$

így  $\tilde{T}_\mu$  és  $\Gamma_\mu$  mátrixokra is teljesül:

$$\{\Gamma_\mu, \Gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}I \quad (80)$$

(Amennyiben a felírt egyenletből egyértelműen kiderül, nem jelöljük külön, hogy  $I \in M(2, \mathbf{C})$ ,  $I \in M(4, \mathbf{C})$ , vagy  $I \in M(2, \mathbf{H})$  egységmátrix.)

A teljesség kedvéért még lássuk a bázist, amelyben  $\Gamma_\mu$  mátrixokat felírtuk: A  $T_\mu$  blokkalakját a spin  $z$ -komponensek sajátállapotaiból képzett blokkbázissal írhatjuk:

$$|\phi_1^b\rangle = \begin{pmatrix} I \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi_2^b\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ I \end{pmatrix} \quad (81)$$

Mivel az ezt  $\tilde{T}_\mu$ -be transzformáló  $U$  mátrix is blokkalakú, így  $\tilde{T}_\mu$  bázisa is ilyen szép alakba kerül: (az eredeti spin  $z$ -bázisban felírva)

$$|\tilde{\phi}_1^b\rangle = \begin{pmatrix} I \\ -i \end{pmatrix}, \quad |\tilde{\phi}_2^b\rangle = \begin{pmatrix} -i \\ I \end{pmatrix} \quad (82)$$

Ekkor a  $\Gamma_\mu$  mátrixok bázisa a következő két kvaternióelemű vektor lesz:

$$|\phi_1^q\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ -\mathbf{i} \end{pmatrix}, \quad |\phi_2^q\rangle = \begin{pmatrix} -\mathbf{i} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (83)$$

Ekkor Hamiltonink alakja a következő lesz: (mostantól alkalmazzuk az Einstein-konvenciót  $\mathcal{M}$  paramétertér vektorainál, az indexek 0-tól 4-ig futnak.)

$$H(\mathbf{X}) = X^\mu \Gamma_\mu \quad (84)$$

(Az  $X^\mu$  paraméterek, melyek a  $\Gamma_\mu$  mátrixokat lineárkombinálják, természetesen nem változnak; a bázistranszformáció  $\mathcal{H}$ -ban történt, nem a paraméterek  $\mathcal{M}$  terén!)

Hamiltonink kiírva a következő kívánatos formát ölti:

$$H(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} X^4 & X^0 - \mathbf{i}X^1 - \mathbf{j}X^2 - \mathbf{k}X^3 \\ X^0 + \mathbf{i}X^1 + \mathbf{j}X^2 + \mathbf{k}X^3 & -X^4 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} X^4 & \bar{q} \\ q & -X^4 \end{pmatrix}. \quad (85)$$

ahol  $q \in \mathbf{H}$ , és  $X^\mu X_\mu = 1$  miatt

$$|q|^2 = 1 - (X^4)^2. \quad (86)$$

### B. A Hamiltoni vizsgálata

A rendszer állapotait tartalmazó Hilbert tér ekkor  $\mathcal{H} \equiv \mathbf{H}^2$ . A paraméterek tere  $\mathcal{M} \equiv S^4$ . A Hamiltoni sajátértékproblémáját megoldhatnánk hagyományos módon, de itt egy jóval tanulságosabb és elegánsabb megoldás kínálkozik, a sajátértékek ugyanis rögtön meghatározhatóak. Mivel:

$$H(\mathbf{X})^2 = X^\mu \Gamma_\mu X^\nu \Gamma_\nu = \frac{1}{2} \{\Gamma_\mu, \Gamma_\nu\} X^\mu X^\nu = I \quad (87)$$

(Ez a Hamiltoninak nyilván általános tulajdonsága, független a korábbiakban végzett transzformációktól.) Ekkor az energiasajátértékek:  $E_+ = 1$ ,  $E_- = -1$  lesznek. Fontos látnunk, hogy két kvaternionikus dimenzió megfelel négy komplexnek. Itt a két kvaternionikus sajátaltér nemdegenerált. De visszatérve a komplex reprezentációba, egy egydimenziós kvaternionikus altér kétdimenziós komplex altérnek felel meg, és ezekhez ugyanaz a sajátérték tartozik. Tehát komplex esetben két kétszeresen degenerált alterünk lesz, (Kramers-degenerancia) ami az egy-qubites kvantumszámítási műveletekhez szükséges.

További megjegyzésre ad okot, hogy  $E_\pm$  csak  $\mathbf{X}$  nagyságától függ, ami esetünkben egységnyi. Tulajdonképpen a  $Q$ -ra és ezáltal  $\mathbf{X}$ -re adott normafeltétel egységnyivé teszi a kölcsönhatás energiáját. Így látszik, hogy a  $\|Q\|^2$  előállítására adott definíció jól használható. (Tanulságos ugyanis a mi problémánk megoldásához hasonló módon végigszámolni a paralell problémát, a "spin mágneses térben" esetét, ahol a  $\langle Q, Q \rangle \equiv \|Q\|^2 = 1$  a  $\langle \mathbf{B}, \mathbf{B} \rangle \equiv \|\mathbf{B}\|^2 = 1$  feltételbe megy át, ami csak azt mondja, hogy legyen a mágneses tér egységnyi.) Ennek tanulsága, hogy az  $E_+$  és  $E_-$  energianívfelületek távolsága bármely  $\mathbf{X} \in \mathcal{M}$  paraméterértékre azonos lesz, és a kvadrupóltér növelésével nő. Tehát elvileg akármilyen gyorsan változó paraméterek esetén, a kvadrupóltér megfelelő mértékű növelésével teljesíthető az (5) feltétel, így az időfejlődés adiabatikusnak tekinthető. (A gyakorlati szempontoknál közbeszól a laboratóriumban maximálisan előállítható kvadrupóltér nagysága. Ilyenkor konkrét számolásokkal kell ellenőrizni a tétel alkalmazhatóságát az adott időfejlődésre, illetőleg a lehetőségekhez mérten megválasztani az időfejlődés sebességének felső korlátját.)

A sajátvektorokat könnyen meghatározhatjuk, ha egy tetszőleges vektort levetítünk a sajátalterekbe, majd lenormáljuk. Célunk, hogy a projekciókat  $H$ -felhasználásával keverjük ki. Ezt könnyen megtehetjük, hiszen csak két alterünk van, és erre adódik két egyenlet: (spektrálfelbontás és teljesség)

$$\sum_n E_n P^{(n)} = H, \quad (88)$$

$$\sum_n P^{(n)} = I \quad (89)$$

Tehát:

$$P^{(\pm)}(\mathbf{X}) = \frac{1}{2}(I \pm H(\mathbf{X})) \quad (90)$$

(A  $P^{(\pm)}$  projekciók tulajdonságai:  $P^{(\pm)}P^{(\pm)} = P^{(\pm)}$ ,  $P^{(+)}P^{(-)} = 0$ , és  $HP^{(\pm)} = \pm P^{(\pm)}$ .)

Az eredeti,  $\Gamma_\mu$  mátrixok (73)-ban felírt alakjához kapott  $|\phi_1^q\rangle$ ,  $|\phi_2^q\rangle$  bázisunkban ekkor  $P_\pm$  alakja:

$$P^{(\pm)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \pm X^4 & \pm \bar{q} \\ \pm q & 1 \mp X^4 \end{pmatrix}. \quad (91)$$

A sajátvektorok képzéséhez vetítsünk egy tetszőleges vektort  $P_\pm$ -projektorokkal a két sajátaltérbe. Használjuk erre a célra a mindkét báziselemünket!

$$|u(\mathbf{X}), \pm\rangle := N_u^{(\pm)} P^{(\pm)}(\mathbf{X}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm X^4)}} \begin{pmatrix} 1 \pm X^4 \\ \pm q \end{pmatrix}, \quad (92a)$$

$$|v(\mathbf{X}), \pm\rangle := N_v^{(\pm)} P^{(\pm)}(\mathbf{X}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2(1 \mp X^4)}} \begin{pmatrix} \pm \bar{q} \\ 1 \mp X^4 \end{pmatrix}, \quad (92b)$$

ahol a normálási tényezők a (86) felhasználásával egyszerűen számolhatók. (A fenti jelölésben  $|u(\mathbf{X}), +\rangle$  és  $|v(\mathbf{X}), +\rangle$  az  $E_+$ ,  $|u(\mathbf{X}), -\rangle$  és  $|v(\mathbf{X}), -\rangle$  pedig az  $E_-$  sajátértékhez tartozó sajátvektor kétféle előállítására.)

Itt látszik, hogy a Hamiltoni sajátalterei  $\mathcal{H}$ -ban elfordulnak az  $\mathbf{X}(t)$  paraméterek változásának megfelelően, ahogy azt vártuk. Másrészt azt is látjuk, hogy a sajátvektorok (92) előállítása nem reguláris minden  $\mathbf{X} \in \mathcal{M} \equiv S^4$  esetén. Valóban,  $|u(\mathbf{X}), -\rangle$  és  $|v(\mathbf{X}), +\rangle$  nem értelmezhető az  $\mathbf{X}_N = (0, 0, 0, 0, 1)$  pontban, ami  $S^4$  négydimenziós gömbfelület "északi sarkpontja", ugyanígy  $|u(\mathbf{X}), -\rangle$  és  $|v(\mathbf{X}), +\rangle$  az  $\mathbf{X}_S = (0, 0, 0, 0, -1)$  pontban, ami pedig a "déli sark". Ez várható is volt annak tudatában, hogy amikor a sajátvektorokat előállítottuk, akkor  $S^4$  sarkpontjain  $H(\mathbf{X})$  épp diagonális, így sajátvektorai pont a bázisvektorok irányába esnek, ezért  $P_\pm(\mathbf{X})$  az egyik bázisvektort pont egy rá merőleges altérbe akarta vetíteni, ami természetesen nullvektort ad. (Ez a kétféle előállítás akkor is adódik, ha a szokásos mátrix sajátérték/sajátvektormeghatározási módszert használjuk, ott is szétválnak az esetek egy  $X^4$ -re vonatkozó feltétel szerint, csak abban az esetben ennek oka nem látható ilyen szépen.)

Tehát kétféle  $\mathbf{X}$ -től függő  $H$ -sajátérték-bázis adható meg  $\mathcal{H}$ -ban, vagyis a  $\mathcal{A}(\mathbf{X})$  mátrixokat kétféle mértékben írhatjuk fel. Megmutatjuk, hogy a

$$|v(\mathbf{X}), \pm\rangle = |u(\mathbf{X}), \pm\rangle (\pm V(\mathbf{X})) \quad (93)$$

mértéktranszformációt az alábbi  $V(\mathbf{X}) \in \mathbf{H}$ ,  $|V| = 1$  valósítja meg:

$$V(\mathbf{X}) = \frac{\bar{q}}{|q|} \quad (94)$$

(Kvaternió mértéktranszformáció, mellyel a kvaternióértékű vektorpotenciált transzformálhatjuk. Az egységnyi normájú kvaterniók csoportja izomorf  $SU(2)$ -vel, melynek elemei  $2 \times 2$ -es mértéktranszformáció mátrixok, melyekkel a  $2 \times 2$ -es mátrix-érékű vektorpotenciált mértéktranszformálhatnánk. A probléma ugyanaz, mint amit beláttunk (48)-ban.) Tehát:

$$|u(\mathbf{X}), \pm\rangle (\pm V(\mathbf{X})) = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm X^4)}} \begin{pmatrix} (1 \pm X^4) \frac{\pm \bar{q}}{|q|} \\ \pm q \frac{\pm \bar{q}}{|q|} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm \bar{q} \frac{\sqrt{1 \pm X^4}}{\sqrt{1 - (X^4)^2}} \\ \frac{\sqrt{1 - (X^4)^2}}{\sqrt{1 \pm X^4}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2(1 \mp X^4)}} \begin{pmatrix} \pm \bar{q} \\ 1 \mp X^4 \end{pmatrix} = |v(\mathbf{X}), \pm\rangle. \quad (95)$$

Megjegyezzük, hogy (94) mértéktranszformáció csak ott van értelmezve, ahol a egyik mértékben felírt sajátvektor sem szinguláris. Vagyis mindenhol, kivéve az északi és déli pólust.

### C. A kvaternió-egy-forma kiszámítása

Immáron semmi sem akadályozhat meg minket abban, hogy kiszámítsuk a  $\mathcal{A}^{(\pm)}$  kvaternióértékű (nem-Abeli) helyfüggő egy-formákat! Először nézzük  $u$ -mértékben:

$$\langle u(\mathbf{X}), \pm | = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm X^4)}} (1 \pm X^4 \pm \bar{q}), \quad (96)$$

$$\begin{aligned} d|u(\mathbf{X}), \pm\rangle &= \frac{d}{dX^\mu} \left( \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm X^4)}} \begin{pmatrix} 1 \pm X^4 \\ \pm q \end{pmatrix} \right) dX^\mu = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\frac{d}{dX^4} \sqrt{1 \pm X^4} dX^4}{\sqrt{1 \pm X^4}} \pm q \frac{d}{dX^4} \frac{1}{\sqrt{1 \pm X^4}} dX^4 \right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\pm dX^4}{2\sqrt{1 \pm X^4}} \pm q \frac{1}{2} \frac{\pm dX^4}{\sqrt{1 \pm X^4}} \right) = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm X^4)}} \left( \pm \frac{dX^4}{2} \pm dq - \frac{qdX^4}{2(1 \pm X^4)} \right), \end{aligned} \quad (97)$$

ahol  $dq = dX^0 + \mathbf{i}dX^1 + \mathbf{j}dX^2 + \mathbf{k}dX^3$ -t jelenti. Ekkor

$$\begin{aligned} \langle u(\mathbf{X}), \pm |d|u(\mathbf{X}), \pm \rangle &= \frac{1}{2(1 \pm X^4)} \left( \pm(1 \pm X^4) \frac{dX^4}{2} + \bar{q}dq \mp \frac{\bar{q}q}{1 \pm X^4} \frac{dX^4}{2} \right) = \\ &= \frac{1}{2(1 \pm X^4)} (\bar{q}dq + X^4 dX^4) \end{aligned} \quad (98)$$

Ehelyütt kihasználjuk, hogy  $X^\mu X_\mu = 1$  miatt  $d(X^\mu X_\mu) = X^0 dX^0 + \dots + X^4 dX^4 = 0$ , és, hogy  $\bar{q}dq = \Re(\bar{q}dq) + \Im(\bar{q}dq)$ , és  $\Re(\bar{q}dq) = X^0 dX^0 + \dots + X^3 dX^3$ . Ekkor:

$$\mathcal{A}_u^{(\pm)} = i \frac{\Im(\bar{q}dq)}{2(1 \pm X^4)}, \quad (99)$$

és hasonló módon kapható a  $v$ -s mértékben:

$$\mathcal{A}_v^{(\pm)} = i \frac{\Im(qd\bar{q})}{2(1 \mp X^4)}, \quad (100)$$

(A fenti jelölés kissé pongyola, mivel  $i$  a komplex képzetes egység, ami itt kvaterniókat szoroz. A fenti két egyenlőség tulajdonképpen akkor áll fenn, ha a benne szereplő kvaternióknak az előző alfejezetben bevezetett  $U(2)$ -es ábrázolását tekintjük!) E kvaternióértékű vektorpotenciálok közül  $S^4$ -en a déli pólust kivéve jó lesz az  $\mathcal{A}_u^{(+)}$  és  $\mathcal{A}_v^{(-)}$ , az északi pólust kivéve pedig az  $\mathcal{A}_u^{(-)}$  és  $\mathcal{A}_v^{(+)}$ . Ekkor a bázisvektorok közötti (93) kvaternió-mértéktranszformációval a kvaternió egy-forma mértéktranszformációjára a

$$\mathcal{A}_v^{(\pm)} = \bar{V} \mathcal{A}_u^{(\pm)} V + i \bar{V} dV \quad (101)$$

összefüggés lesz érvényben. (48)

#### D. A Berry-féle kvaternió kiszámítása

A  $\mathcal{U}^{(\pm)}$  Berry-kvaternió kiszámításához a

$$|\pm, \mathbf{X}(0)\rangle \mathcal{U}^{(\pm)}(C) = |\pm, \mathbf{X}(0)\rangle \mathcal{P} \exp \left( i \oint_C \mathcal{A}^{(\pm)} \right) \quad (102)$$

formula helyett egy könnyebben kezelhető fogunk készíteni. Osszuk fel a  $0 \dots T$  intervallumot  $N$  darab  $\varepsilon = \frac{T}{N}$  hosszúságú részre! Legyen ekkor  $|\mathbf{X}_a\rangle \equiv |\pm, \mathbf{X}(a\varepsilon)\rangle$ . Ciklikus paraméterváltozás esetén nyilván  $|\mathbf{X}_N\rangle \equiv |\mathbf{X}_0\rangle$ . Ekkor  $\varepsilon \rightarrow 0$  határesetben  $|\mathbf{X}_{a+1}\rangle = (1 + d)|\mathbf{X}_a\rangle$ , valamint az "időben szomszédos" sajátvektorok skalárszorzata:  $\langle \mathbf{X}_{a+1} | \mathbf{X}_a \rangle = 1 + i\mathcal{A} = e^{i\mathcal{A}(\mathbf{X}_a)}$  szintén határátmenetben. A megfelelő sajátvektorra vetítő projekciót ekkor a következőképpen jelöljük:  $P(\mathbf{X}_a) = |\mathbf{X}_a\rangle \langle \mathbf{X}_a|$

Ekkor a keresett (102) kifejezéssel ekvivalens a következő:

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{P} \prod_{a=0}^N P(\mathbf{X}_a) |\mathbf{X}_0\rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} P(\mathbf{X}_N) P(\mathbf{X}_{N-1}) \dots P(\mathbf{X}_0) |\mathbf{X}_0\rangle = \\ \lim_{N \rightarrow \infty} |\mathbf{X}_N\rangle \mathcal{P} \prod_{a=0}^N e^{i\mathcal{A}(\mathbf{X}_a)} &= |\mathbf{X}_0\rangle \mathcal{P} \exp \left( \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{a=0}^N i\mathcal{A}(\mathbf{X}_a) \right) = |\mathbf{X}_0\rangle \mathcal{P} \exp \left( i \oint_C \mathcal{A} \right). \end{aligned} \quad (103)$$

Ez tulajdonképpen azt jelenti, hogy az időfejlődés során létrejövő változást az időben változó sajátaltérre történő folyamatos vetítgetések egymásutáni hatásaként interpretáljuk. Tehát eredményünket összefoglalva:

$$|\pm, \mathbf{X}(0)\rangle \mathcal{U}^{(\pm)}(C) = \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{P} \prod_{a=0}^N P^{(\pm)}(\mathbf{X}_a) |\mathbf{X}_0\rangle. \quad (104)$$

E fenti formula alkalmazásához ismernünk kell a  $P^{(\pm)}(t) \equiv P^{(\pm)}(\mathbf{X}(t))$  projektorok időfejlődését. (90) miatt ez meg fog egyezni a teljes rendszer időfejlődésével:

$$P^{(\pm)}(t) = \frac{1}{2} (I \pm H(t)) = \frac{1}{2} (U(t)U^\dagger(t) \pm U(t)H(0)U^\dagger(t)) = U(t)P^{(\pm)}(0)U^\dagger(t). \quad (105)$$

A Hamiltonit diagonalizálják a normált sajátvektoraiból (92a), (92b) képzett  $U \in Sp(2)$  (kvaternióelemű kétdimenziós  $U^\dagger = U^{-1}$  és itt  $\det U = 1$ ) transzformációs mátrixok:

$$U_N(\mathbf{X}) = [u_+ | v_-] = \frac{1}{\sqrt{2(1+X^4)}} \begin{pmatrix} 1+X^4 & -\bar{q} \\ q & 1+X^4 \end{pmatrix}, \quad (106a)$$

$$U_S(\mathbf{X}) = [v_+ | u_-] = \frac{1}{\sqrt{2(1-X^4)}} \begin{pmatrix} \bar{q} & 1-X^4 \\ 1-X^4 & -q \end{pmatrix}, \quad (106b)$$

ahol  $U_N(\mathbf{X})$  szinguláris a déli sarkon,  $U_S(\mathbf{X})$  pedig az északin. Közöttük (93) alapján a következő mértéktranszformáció teremt kapcsolatot:

$$U_N(\mathbf{X}) \begin{pmatrix} V & \cdot \\ \cdot & -\bar{V} \end{pmatrix} = U_S(\mathbf{X}) \quad (107)$$

Amiatt, hogy a Hamiltoni pont az északi sarkon diagonális, fennáll az az érdekes eset, hogy a fenti transzformációk a megfelelő  $\mathbf{X}$  helyargumentumú Hamiltonit tulajdonképpen az  $\mathbf{X}_N$  északi sarkra transzformálják:

$$U^\dagger(\mathbf{X})H(\mathbf{X})U(\mathbf{X}) = H(\mathbf{X}_N). \quad (108)$$

Ekkor  $U^\dagger(\mathbf{X})$  pont ennek ellenkezőjét teszi:

$$H(\mathbf{X}) = U(\mathbf{X})H(\mathbf{X}_N)U^\dagger(\mathbf{X}), \quad (109)$$

vagyis az északi sarkon lévő Hamiltonit az adott  $\mathbf{X}$  helyre transzformálja. Ez a hatás jellemezhető az  $S^4$ -en ható  $R \in SO(5)$  forgatással, amely:

$$R: \mathbf{X}_N \rightarrow \mathbf{X} \quad (110)$$

az északi sarkra mutató vektort még a paramétertérben elforgatja. Bizonyítható ekkor, hogy az előbb kapott  $U$  diagonalizáló mátrix  $SO(5)$ -nek egy  $Sp(2)$  ábrázolása. Ekkor a megfelelő mátrixot már az általa megvalósított  $R$  forgatással jellemezzük:

$$H(R\mathbf{X}_N) = U(R)H(\mathbf{X}_N)U^\dagger(R), \quad (111)$$

erre hatva tetszőleges unitér forgatással, elmondhatjuk általánosságban is, hogy a Hamiltoninak van  $SO(5)$  szimmetriája:

$$H(R\mathbf{X}) = U(R)H(\mathbf{X})U^\dagger(R), \quad (112)$$

ahol  $U^\dagger(R)$  az  $R$  reprezentációja a Hilbert-térben.

Azt látjuk tehát, hogy az  $U(\mathbf{X}(t))$  diagonalizáló transzformáció által reprezentált  $R^{-1}(t): \mathbf{X}(t) \rightarrow \mathbf{X}_N$  az időfejlődés során az  $S^4$  gömböt mindig úgy forgatja, hogy a bejárt  $\mathbf{X}(t)$  görbe aktuális pontja kerüljön északra, vagyis minden időben:

$$H(t) = U(t)H(0)U^\dagger(t), \quad (113)$$

lesz az időfejlesztés, amennyiben a görbét az északi sarkról indítjuk.

Az iméntiek tanulsága, hogy ha az időfejlődés során  $S^4$ -ben befutott pályát  $SO(5)$ -szimmetrikusnak választjuk, akkor könnyű dolgunk van, mert egy ilyen görbét leírhatunk egy megfelelő  $SO(5)$ -csoportbeli forgatással, és a Hamiltoni  $SO(5)$ -szimmetriája miatt ez átvihető a diagonalizáló és ezáltal az időfejlesztő operátorra. Arra kell csak figyelni, hogy a görbe az északi sarkról induljon. A továbbiakban azért emlékezzünk rá, hogy ezzel elég változatos, de mégis csak nagyon speciális görbéket tekintettünk, valójában a lehetséges időfejlődések tárháza elképzелhetetlenül hatalmasabb, gondoljunk csak el, hányféle útvonalon járhatnánk be akár a Föld felszínét, és az még csak  $S^2$ .

Következő lépésünk tehát  $SO(5)$  olyan egyparaméteres alcsoportjainak keresése, amelyre:

$$H(t) = U(R(t))H(0)U^\dagger(R(t)), \quad H(T) = H(0), \quad (114)$$

ahol  $H(0)$  diagonális. Belátható, hogy egy általános  $R \in SO(5)$  forgatás  $Sp(2)$ -reprezentációja előáll:

$$U = e^{-i\alpha_{\mu\nu}S_{\mu\nu}}, \quad (115)$$

$$S_{\mu\nu} = \frac{1}{4i}[\Gamma_\mu, \Gamma_\nu] \quad (116)$$

$$\alpha \in M(5, \mathbf{R}), \quad \alpha_{\mu\nu} = -\alpha_{\nu\mu} \quad (117)$$

alakban, mivel a fenti  $S_{\mu\nu} \in Sp(2)$  mátrixok a (77)-beli  $\Gamma$ -mátrixok tulajdonságai miatt kielégítik az ötdimenziós forgáscsoport Lie-algebrájának kommutációs relációit,

$$[S_{\mu\nu}, S_{\rho\sigma}] = \frac{i}{4}(\delta_{\mu\rho}S_{\nu\sigma} + \delta_{\nu\sigma}S_{\mu\rho} - \delta_{\mu\sigma}S_{\nu\rho} - \delta_{\nu\rho}S_{\mu\sigma}), \quad (118)$$

ezáltal tényleg ők a Lie-csoport e reprezentációjának generátorai. (A  $S_{\mu\nu}$  a megfelelő  $(\mu\nu)$ -síkbán való forgatást generálja.)

A pályát nekünk egy egyparaméteres (idővel történő) forgatás fogja kirajzolni:  $\alpha := \alpha(t)$  és

$$\alpha_{\mu\nu}(t) := \omega t \frac{1}{2} \cdot const \quad (119)$$

$$\omega T = 2\pi \quad (120)$$

választással tesszük szemléletessé. Ekkor írjuk  $U$ -t a következő alakba:

$$U(t) = e^{-i\alpha_{\mu\nu}(t)S_{\mu\nu}} = e^{\frac{\omega t}{2}Z} = \cos\left(\frac{\omega t}{2}\right)I + \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right)Z, \quad (121)$$

ahol az utolsó, roppant hasznos egyenlőség fennállásához az kell, hogy a forgatásból kapott mátrixra az általánosan nem teljesülő  $Z^2 = -I$  reláció álljon fenn, ekkor az exponenciális függvény hatványsorának szétírásánál  $Z$  kiemelhető. Így jól látszik, hogy  $U(0) = I$ , valamint,  $U(T) = -I$ , és az ilyen időfejlődésre a Hamiltoni is ciklikus lesz:  $H(T) = U(T)H(0)U^\dagger(T) = H(0)$ , ahogy azt szeretnénk. Tehát a megfelelő időfejlődésnek elégséges feltétele a  $Z^2 = -I$ . A további számítások során már csak ilyen eseteket nézünk. Ezzel a lépéssel tehát tovább specializáltuk az időfejlődés pályáját. (A megoldás általánosítására, illetve annak belátására, hogy  $Z^2 = -I$  egyben szükséges feltétel-é, további megfontolások tárgyát képezné, melyekre sajnos e dolgozatban nem jutott idő.) A későbbiekhez még az is kell, hogy  $Z$  kvaternió-unitér legyen. Ezek által pedig  $Z$  anti-Hermitikus lesz.

Most, hogy az (121) időfejllesztést a  $Z^2 = -I$  esetre általánosan tudjuk, számoljuk ki (104)-alapján a geometriai hatást leíró kvaterniót! Kedvező helyzetben vagyunk, mivel a végtelen szummát zárt alakban kapjuk meg az időfejllesztés formájának köszönhetően: (A levezetés mindkét altérben működik, így nem jelöljük külön a projekciónál,  $P^{(\pm)}(t) \equiv P(t)$ , valamint jelölje:  $P(0) \equiv P$ .)

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{P} \prod_{a=0}^N P(\mathbf{X}_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} P(T)P\left(\frac{N-1}{N}T\right)P\left(\frac{N-2}{N}T\right)\dots P\left(\frac{1}{N}T\right)P(0) = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} e^{\frac{\omega}{2}TZ} P e^{-\frac{\omega}{2}TZ} e^{\frac{\omega}{2}\frac{N-1}{N}TZ} P e^{-\frac{\omega}{2}\frac{N-1}{N}TZ} \dots e^{\frac{\omega}{2}\frac{1}{N}TZ} P e^{-\frac{\omega}{2}\frac{1}{N}TZ} P = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} e^{\frac{\omega}{2}TZ} \left(P e^{-\frac{\omega}{2}\frac{T}{N}Z} P\right)^N = e^{\frac{\omega}{2}TZ} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(e^{-\frac{\omega}{2}\frac{T}{N}PZP} P\right)^N = e^{\frac{\omega}{2}TZ} e^{-\frac{\omega}{2}TPZP} P \end{aligned} \quad (122)$$

az exponenciális függvény hatványsora, valamint a projekciók ismert tulajdonságai miatt.  $\omega T = 2\pi$  miatt ekkor összefoglalva:

$$|\pm, \mathbf{X}(0)\rangle U^{(\pm)}(C) = \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{P} \prod_{a=0}^N P^{(\pm)}(t_a) |\pm, \mathbf{X}(0)\rangle = e^{\pi Z} e^{-\pi P^{(\pm)}(0)ZP^{(\pm)}(0)} P^{(\pm)}(0) |\pm, \mathbf{X}(0)\rangle. \quad (123)$$

Ekkor egyrészt  $e^{\pi Z} = -I$ , másrészt a második exponens kiszámításához pedig felhasználjuk a következő összefüggést:  $(PZP)^2 = -(PZP)^\dagger(PZP)P = -|PZP|^2P$ , ha  $Z$  anti-Hermitikus, és  $P$  kvaternió-Hermitikus 1-rangú projekció. [10] ( $|\cdot|$  a kvaternionikus operátornorma,  $A \in M(n, \mathbf{H})$ :  $|A| = \sqrt{\langle A|A \rangle} = \sqrt{\text{Tr}(A^\dagger A)}$ .) Ekkor:

$$\begin{aligned} e^{-\pi PZP} P &= P - \frac{\pi}{1!} PZP + \frac{\pi^2}{2!} (PZP)^2 - \frac{\pi^3}{3!} (PZP)^3 + \frac{\pi^4}{4!} (PZP)^4 - \frac{\pi^5}{5!} (PZP)^5 + \frac{\pi^6}{6!} (PZP)^6 - \dots = \\ &= \left(1 + \frac{\pi^2}{2!} (PZP)^2 + \frac{\pi^4}{4!} (PZP)^4 + \frac{\pi^6}{6!} (PZP)^6 + \dots\right) P - \left(\frac{\pi}{1!} + \frac{\pi^3}{3!} (PZP)^2 + \frac{\pi^5}{5!} (PZP)^4 + \dots\right) PZP = \\ &= \left(1 - \frac{\pi^2}{2!} |PZP|^2 + \frac{\pi^4}{4!} |PZP|^4 - \frac{\pi^6}{6!} |PZP|^6 + \dots\right) P - \left(\frac{\pi}{1!} - \frac{\pi^3}{3!} |PZP|^2 + \frac{\pi^5}{5!} |PZP|^4 - \dots\right) PZP = \\ &= \cos(\pi |PZP|) P - \sin(\pi |PZP|) \frac{PZP}{|PZP|}. \end{aligned} \quad (124)$$



Ekkor összefoglalva:

$$|\pm, \mathbf{X}(0)\rangle \mathcal{U}^{(\pm)}(C) = \left( -\cos(\pi|P^{(\pm)} Z P^{(\pm)}|) P^{(\pm)} + \sin(\pi|P^{(\pm)} Z P^{(\pm)}|) \frac{P^{(\pm)} Z P^{(\pm)}}{|P^{(\pm)} Z P^{(\pm)}|} \right) |\pm, \mathbf{X}(0)\rangle \quad (125)$$

lesz a keresett geometriai hatás, amely leírja, hogy a megfelelő altérben levő állapot hogyan változott meg, mialatt a rendszert a  $Z$ -mátrix által leírt egyszerű körpályán változó paraméterértékeken vittük körbe.

Tekintsünk most egy konkrét görbét! Az általam végigszámolt görbék közül íme egy, melynek hatása a legérdekesebb:

$$\alpha(t) := \frac{\omega t}{2} \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & r & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ -r & \cdot & \cdot & \cdot & -p \\ \cdot & \cdot & \cdot & p & \cdot \end{pmatrix}, \quad (126)$$

$$p, r \in \mathbf{R}, \quad p^2 + r^2 = 1, \quad (127)$$

ahol az utóbbi feltétel annak felel meg, hogy a "forgatás irányvektora" legyen egységnyi, a forgatás nagyságát az  $\omega t$  tényező határozza meg.

Újabb színesítő kitérőként megjegyezzük, hogy a fenti  $\alpha$ -mátrix az ötdimenziós térben egyszerre két síkban forgat: a (03) és (34) koordinátasíkokban, így összesen egy ferde síkban történő forgatást valósít meg. A "ferdeség" mértékét a  $p$  és  $r$  együttthatók viszonya határozza meg. Szélsőséges helyzetben például  $r = 1$  esetén a forgatás síkja nyilván belesimul a (03) koordinátasíkba.

Ekkor felírva a forgatást:

$$U(t) = e^{-i\alpha_{\mu\nu}(t)S_{\mu\nu}} = e^{\frac{\omega t}{2}Z}, \quad Z = \Gamma_3(r\Gamma_0 + p\Gamma_4), \quad (128)$$

ahol  $\Gamma_\mu$ -k Clifford-algebrája miatt a következő jól használható egyenlőségek könnyítették munkánkat:

$$\Gamma_\mu \Gamma_\nu = -\Gamma_\nu \Gamma_\mu, \quad (129)$$

$$[\Gamma_\mu, \Gamma_\nu] = 2\Gamma_\mu \Gamma_\nu, \quad (130)$$

mivel itt csak  $\mu \neq \nu$  fordulhat elő. Valamint

$$Z^2 = r^2 \Gamma_3 \Gamma_0 \Gamma_3 \Gamma_0 + p^2 \Gamma_3 \Gamma_4 \Gamma_3 \Gamma_4 + rp(\Gamma_3 \Gamma_0 \Gamma_3 \Gamma_4 + \Gamma_3 \Gamma_4 \Gamma_3 \Gamma_0) = -I \quad (131)$$

könnyen belátható, mivel  $\Gamma_\mu^2 = I$  és (129) megfelelő alkalmazásaival az első két tag összege (127) miatt  $-I$ , a zárójel tartalma pedig eltűnik. (Ez alapján gyárthatunk ellenpéldát: a  $Z^2 = -I$  feltétel nem teljesül, ha  $Z$ -nek (128)-hoz hasonló előállításában nem emelhető ki a két  $\Gamma$ -t tartalmazó tagokból egy közös  $\Gamma_\mu$ . Ekkor a fenti egyenletben a zárójel értéke nem nulla.)

Tehát (131) következményeképpen használhatjuk a (125) formulát. Ehhez kiszámoljuk a következőket: Mivel  $t = 0$ -ban a Hamiltoni diagonális, ezért a projektorok:

$$P^{(+)}(0) = \begin{pmatrix} 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \quad P^{(-)}(0) = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 \end{pmatrix} \quad (132)$$

Ezekkel

$$Z = \begin{pmatrix} -r & p \\ p & r \end{pmatrix} \mathbf{k}, \quad (133)$$

$$P^{(+)}(0) Z P^{(+)}(0) = \begin{pmatrix} -r & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{pmatrix} \mathbf{k}, \quad \left( P^{(+)}(0) Z P^{(+)}(0) \right)^2 = \begin{pmatrix} -r^2 & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad (134)$$

$$P^{(-)}(0) Z P^{(-)}(0) = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot \\ \cdot & r \end{pmatrix} \mathbf{k}, \quad \left( P^{(-)}(0) Z P^{(-)}(0) \right)^2 = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot \\ \cdot & -r^2 \end{pmatrix}, \quad (135)$$

$$|P^{(+)}(0) Z P^{(+)}(0)| = r \quad (136)$$

Ekkor (125) vektoregyenlet megoldásával például a  $E_+$  energiájú altéren működő Berry-féle kvaternió:

$$\mathcal{U}^{(+)}(C) = -\cos(\pi r) - \sin(\pi r)\mathbf{k} \quad (137)$$

Most visszaírva a kvaterniót  $2 \times 2$  komplex mátrixokkal, megkapjuk a Berry-mátrixot, amely az eredeti  $\mathbf{C}^4$  Hilbert-terünk megfelelő kétdimenziós sajátalterében az időfejlődés hatását írja le:

$$\mathcal{U}^{(+)}(C) = \begin{pmatrix} -\cos(\pi r) + i \sin(\pi r) & \cdot \\ \cdot & -\cos(\pi r) - i \sin(\pi r) \end{pmatrix} = e^{i\pi(r+1)} \begin{pmatrix} 1 & \cdot \\ \cdot & e^{-i2\pi r} \end{pmatrix}, \quad (138)$$

ami egy fázistoló kapu egy prefaktortól eltekintve. A lehetséges fázistolás  $2\pi r$ , ahol  $-1 \leq r \leq 1$  a (127) feltétellel összhangban.

A téma e ponton korán sincs lezárva, csupán félbehagyva. Ennyire futotta időnkéből. Bizonyos részletszámításokkal a kép kerekébbé tehető, valamint további lehetőségek tág tere nyílik meg előttünk.

#### IV. TOVÁBBIÁK

A közvetlen továbbfejlesztési lehetőségek között első helyen szerepel olyan létező fizikai problémát leíró Hamiltoni megtalálása, mely négyyszeresen degenerált altérrel rendelkezik, s így lehetőséget nyújt két-qubites kvantumkapu megvalósítására. Az ezen megvalósítható kvantumkapuk kiszámítása további probléma. Másik irányt jelent a paraméterterbeli görbék bonyolultabb formáinak alkalmazása. Valamint vizsgálat tárgyává kellene tenni, hogy módszerünkkel általánosan milyen kvantumlogikai kapuk valósíthatóak meg.

#### Köszönet

Köszönet illeti témavezetőmet, amiért bevezetett erre a rendkívül érdekes és szép területre.

#### APPENDIX A: KVATERNIÓK

A  $q \in \mathbf{H}$  kvaterniók alakja:

$$q = q^0 + \mathbf{i}q^1 + \mathbf{j}q^2 + \mathbf{k}q^3, \quad q^0, \dots, q^3 \in \mathbf{R}, \quad (A1)$$

ahol  $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$  a kvaternionikus képzetes egységek, melyekre:

$$\mathbf{i}^2 = \mathbf{j}^2 = \mathbf{k}^2 = -1, \quad (A2a)$$

$$\mathbf{ij} = \mathbf{k}, \quad (A2b)$$

$$\mathbf{ji} = -\mathbf{k}, \quad (A2c)$$

és az utóbbi két egyenlet  $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$  ciklikus permutációira mind fennáll.

A kvaterniók egy lehetséges ábrázolása  $U(2)$  mátrixokon történik, ahol a kvaternionikus egységeknek megfelelnek sorban:  $I, i\sigma_3, i\sigma_2, i\sigma_1$ . ( $\sigma_i$  a Pauli mátrixok.) Ezek tudják a fenti definiáló relációkat. Hasonlóan jó választás az  $I, -i\sigma_1, -i\sigma_2, -i\sigma_3$  is.

A kvaterniókon értelmezett összeadás teljesen jól viselkedik,  $\forall p, q, r \in \mathbf{H}$ :

$$p + q = (p^0 + q^0) + \mathbf{i}(p^1 + q^1) + \mathbf{j}(p^2 + q^2) + \mathbf{k}(p^3 + q^3), \quad (A3)$$

$$(p + q) + r = p + (q + r), \quad (A4)$$

$$p + q = q + p, \quad (A5)$$

vagyis asszociatív és kommutatív, a valós számok megfelelő tulajdonságai miatt.

Az összeaddással definiálhatjuk a nullkvaterniót:  $\forall p \in \mathbf{H}$

$$q_{null} + p = p, \quad (A6)$$

amit továbbiakban 0-val jelölünk, és alakja:  $0 + \mathbf{i}0 + \mathbf{j}0 + \mathbf{k}0$ .

A kvaterniókon értelmezett szorzás azonban (A2) relációk miatt nem lesz kommutatív:  $\forall p, q \in \mathbf{H}$ :

$$pq \neq qp, \quad (\text{A7})$$

$$(pq)r = p(qr). \quad (\text{A8})$$

Ezzel definiáljuk a kvaternionikus egységelemet:

$$q_i a p = p, \quad (\text{A9})$$

amit továbbiakban 1-gyel jelölünk, és alakja:  $1 + \mathbf{i}0 + \mathbf{j}0 + \mathbf{k}0$ .

Ezzel minden kvaternió kommutál.

Egy  $q$  kvaternió inverze (a szorzásra)  $q^{-1}$  ha

$$qq^{-1} = 1, \quad (\text{A10})$$

(a jobb és balinverz megegyezik.)

Minden kvaternió kommutál az inverzével, ha az létezik.

A kvaternionikus konjugálás művelete definíció szerint:

$$\bar{q} = q^0 - \mathbf{i}q^1 - \mathbf{j}q^2 - \mathbf{k}q^3 \quad (\text{A11})$$

Bármely kvaternió kommutál a konjugáltjával.

Kvaternió konjugálásának az  $U(2)$ -mátrixábrázolásnál az adjungálás művelete felel meg.

Ekkor egy kvaternió abszolútérték-négyzete:

$$|q|^2 = \bar{q}q = q\bar{q} = (q^0)^2 + (q^1)^2 + (q^2)^2 + (q^3)^2, \quad (\text{A12})$$

$$|q| \in \mathbf{R}^+. \quad (\text{A13})$$

ahogy annak lennie is kell.

Bizonyítható a következő tulajdonság:

$$\overline{(qp)} = \bar{p}\bar{q}. \quad (\text{A14})$$

A fentiek alapján a mátrixábrázolás felhasználásával is látható:

$$q^{-1} = \bar{q} \frac{1}{|q|^2} \quad (\text{A15})$$

Az  $|q| = 1$  "egységkvaterniók" csoportja izomorf  $SU(2)$ -vel.

Egy kvaternió felírható egy tisztán valós és egy tisztán képzetes rész összegeként:

$$q = \frac{1}{2}(q + \bar{q}) + \frac{1}{2}(q - \bar{q}) = \Re q + \Im q, \quad \Re q = q^0, \quad \Im q = \mathbf{i}q^1 + \mathbf{j}q^2 + \mathbf{k}q^3. \quad (\text{A16})$$

Látható, hogy az itt használt "képzetes rész opreátor" ( $\Im$ ) nem teljesen úgy működik, mint a komplex számok esetén. Bármely kvaternió kommutál egy tisztán valós kvaternióval.

Tekinthetjük  $\mathbf{H}^n$  elemeit, melyek kvaternióelemű számennesek. Mivel a kvaterniószorzás nem kommutatív, ezért megszabjuk, hogy egy  $u \in \mathbf{H}^n$  számennest egy  $a \in \mathbf{H}$  elemmel szigorúan csak egyik oldalról szorozhatunk. (Bevett szokás szerint jobbról.) Ekkor  $\mathbf{H}^n$  jobb-modul lesz  $\mathbf{H}$  felett. (Nem vektortér, mivel  $\mathbf{H}$  nem test, csupán divízió-gyűrű.)  $\mathbf{H}^n$ -en bevezethetünk egy skalárszorzatot a következőképpen:

$$\langle u|v \rangle = \sum_{\alpha=1}^n \bar{u}^\alpha v^\alpha. \quad (\text{A17})$$

Ez második tagjában lineáris, első tagjában konjugált lineáris: (A jobbszorzás konvencióját figyelembe kell venni!)

$$\langle ua|v \rangle = \sum_{\alpha=1}^n \bar{u} a_\alpha v_\alpha = \bar{a} \langle u|v \rangle, \quad (\text{A18a})$$

$$\langle u|va \rangle = \sum_{\alpha=1}^n \bar{u}_\alpha (va)_\alpha = \langle u|v \rangle a. \quad (\text{A18b})$$

A fenti skalárszorzással definiálható norma  $\mathbf{H}^n$ -en:

$$\|u\|^2 := \langle u|u \rangle \in \mathbf{R} \quad (\text{A19})$$

APPENDIX B: A SPINOPERÁTOROK MÁTRIXAI,  $s = \frac{3}{2}$ 

(Spinsajátállapotbázisban)

$$S_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & -1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & -3 \end{pmatrix}, \quad (\text{B1})$$

$$S_+ = \begin{pmatrix} \cdot & \sqrt{3} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 2 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \sqrt{3} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \quad (\text{B2})$$

$$S_- = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \sqrt{3} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 2 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \sqrt{3} & \cdot \end{pmatrix}, \quad (\text{B3})$$

$$S_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cdot & \sqrt{3} & \cdot & \cdot \\ \sqrt{3} & \cdot & 2 & \cdot \\ \cdot & 2 & \cdot & \sqrt{3} \\ \cdot & \cdot & \sqrt{3} & \cdot \end{pmatrix}, \quad (\text{B4})$$

$$S_2 = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} \cdot & -\sqrt{3} & \cdot & \cdot \\ \sqrt{3} & \cdot & -2 & \cdot \\ \cdot & 2 & \cdot & -\sqrt{3} \\ \cdot & \cdot & \sqrt{3} & \cdot \end{pmatrix}, \quad (\text{B5})$$

$$S^2 = \frac{15}{4} \begin{pmatrix} 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{B6})$$

$$S_3^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 9 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 9 \end{pmatrix}, \quad (\text{B7})$$

$$S_1^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 3 & \cdot & 2\sqrt{3} & \cdot \\ \cdot & 7 & \cdot & 2\sqrt{3} \\ 2\sqrt{3} & \cdot & 7 & \cdot \\ \cdot & 2\sqrt{3} & \cdot & 3 \end{pmatrix}, \quad (\text{B8})$$

$$S_2^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 3 & \cdot & -2\sqrt{3} & \cdot \\ \cdot & 7 & \cdot & -2\sqrt{3} \\ -2\sqrt{3} & \cdot & 7 & \cdot \\ \cdot & -2\sqrt{3} & \cdot & 3 \end{pmatrix}, \quad (\text{B9})$$

$$S_1 S_2 = \frac{i}{4} \begin{pmatrix} 3 & \cdot & -2\sqrt{3} & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot & -2\sqrt{3} \\ 2\sqrt{3} & \cdot & -1 & \cdot \\ \cdot & 2\sqrt{3} & \cdot & -3 \end{pmatrix}, \quad (\text{B10})$$

$$S_2 S_1 = \frac{i}{4} \begin{pmatrix} -3 & \cdot & -2\sqrt{3} & \cdot \\ \cdot & -1 & \cdot & -2\sqrt{3} \\ 2\sqrt{3} & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & 2\sqrt{3} & \cdot & 3 \end{pmatrix}, \quad (\text{B11})$$

$$S_1 S_3 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \cdot & \sqrt{3} & \cdot & \cdot \\ 3\sqrt{3} & \cdot & -2 & \cdot \\ \cdot & 2 & \cdot & -3\sqrt{3} \\ \cdot & \cdot & -\sqrt{3} & \cdot \end{pmatrix}, \quad (\text{B12})$$

$$S_3 S_1 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \cdot & 3\sqrt{3} & \cdot & \cdot \\ \sqrt{3} & \cdot & 2 & \cdot \\ \cdot & -2 & \cdot & -\sqrt{3} \\ \cdot & \cdot & -3\sqrt{3} & \cdot \end{pmatrix}, \quad (\text{B13})$$

$$S_2 S_3 = \frac{i}{4} \begin{pmatrix} \cdot & -\sqrt{3} & \cdot & \cdot \\ 3\sqrt{3} & \cdot & 2 & \cdot \\ \cdot & 2 & \cdot & 3\sqrt{3} \\ \cdot & \cdot & -\sqrt{3} & \cdot \end{pmatrix}, \quad (\text{B14})$$

$$S_3 S_2 = \frac{i}{4} \begin{pmatrix} \cdot & -3\sqrt{3} & \cdot & \cdot \\ \sqrt{3} & \cdot & -2 & \cdot \\ \cdot & -2 & \cdot & \sqrt{3} \\ \cdot & \cdot & -3\sqrt{3} & \cdot \end{pmatrix}, \quad (\text{B15})$$

$$\{S_1, S_2\} = \sqrt{3} \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & -i & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & -i \\ i & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & i & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \quad (\text{B16})$$

$$\{S_1, S_3\} = \sqrt{3} \begin{pmatrix} \cdot & 1 & \cdot & \cdot \\ 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 \\ \cdot & \cdot & -1 & \cdot \end{pmatrix}, \quad (\text{B17})$$

$$\{S_2, S_3\} = \sqrt{3} \begin{pmatrix} \cdot & -i & \cdot & \cdot \\ i & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & i \\ \cdot & \cdot & -i & \cdot \end{pmatrix}. \quad (\text{B18})$$

- 
- [1] Apagyi Barnabás, Lévy Péter: Válogatott fejezetek a kvantummechanikából, V. fejezet, Műegyetemi Kiadó (Budapest 2000). És ennek egy meg nem jelent kiegészítése.
  - [2] A. Bohm, A. Mostafazadeh, H. Koizumi, Q. Niu, J. Zwanziger: *The Geometric Phase in Quantum Systems*, Springer (Berlin 2003).
  - [3] Szőkefalvi-Nagy Gyula, Gehér László, Nagy Péter: *Differenciálgeometria*, Műszaki Könyvkiadó (Budapest 1979).
  - [4] M. A. Nielsen, I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press (2000).
  - [5] M. Ericsson: *Geometric and Topological Phases with Applications to Quantum Computation*, Acta Universitatis Upsalien-sis, (Uppsala 2002).
  - [6] A. Ekert, M. Ericsson, P. Hayden, H. Inamori, J. A. Jones, D. Oi, V. Vedral: *Geometric Quantum Computation*, arXiv:quant-ph/0004015v1 (2000).
  - [7] P. Lévy: The geometry of entanglement: metrics, connections and the geometric phase, *J. Phys.* **A37** 1821-1841 (2004).
  - [8] P. Lévy: Quaternionic gauge fields and the geometric phase, *J. Math. Phys.* **32**(9) 2347-2357 (1991).
  - [9] P. Lévy: Geometrical descriptions of  $SU(2)$  Berry phases, *Phys. Rev.* **A41** 5. 2837-2840 (1990).
  - [10] J. E. Avron, L. Sadun, J. Segert, B. Simon: Chern Numbers, Quaternions, and Berry's Phases in Fermi Systems, *Commun. Math. Phys.* 124, 595-627 (1989).
  - [11] A. Zee: Non-Abelian gauge structure in nuclear quadrupole resonance, *Phys. Rev.* **A38** 1. 1-6 (1988).
  - [12] B. A. Bernevig, S. Zhang: Holonomic quantum computing based on the Stark effect, *Phys. Rev.* **B71** 035303 (2005),
  - [13] J. W. Zwanziger, M. Koenig, A. Pines: Non-Abelian effects in a quadrupole system rotating around two axes, *Phys. Rev.* **A42** 5. 3107-3110 (1990).