

Geometriai fázisfaktorok a kvantumszámításban

Szalay Szilárd
konzulens: Dr. Lévay Péter

2007. június 5.

Kivonat

Napjaink kutatásának közkezdvelt témája a kvantumszámítógépek fizikai megvalósítása. Egy kvantumrendszer időfeljödése során fellépő topológiai és geometriai hatások – a holonómiák – kiválóan alkalmasak arra, hogy általuk a rendszer állapotán kvantumszámítási műveleteket hajtsunk végre. E dolgozatban áttekintjük a szükséges elméleti hátteret, továbbá bemutatunk néhány ezzel kapcsolatos számítást: fázistoló kaput valósítunk meg kvantumholonómia segítségével, valamint kevertállapotú két-fermion rendszeren fellépő holonómiák számítására teszünk előkészületeket.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
2. A holonómia	4
2.1. Egy példa: Foucault ingája	4
2.2. A topológiai struktúrák	6
2.2.1. Nyaláb	6
2.2.2. Konnekcio és holonómia	9
3. Kvantummechanikai áttekintés	11
3.1. Axiomatikus elméletek a fizikában	11
3.2. A Kvantummechanika axiómái	12
3.2.1. Állapot	12
3.2.2. Dinamikai változók	12
3.2.3. Összetett rendszerek	13
3.2.4. Mérés	16
3.2.5. Időfejlődés	18
4. Kvantumszámítógépek	21
4.1. Az információ tárolása	21
4.2. A q-bit	22
4.3. Kvantum-kapuk	23
4.4. Holonomikus kvantumszámítógép	24
5. Tiszta állapotok holonómiája	25
5.1. Berry-fázis	25
5.1.1. Adiabaticus közelítés	25
5.1.2. Következmények Abeli esetben	26
5.1.3. Következmények nem-Abeli esetben	29
5.2. Nem-Abeli Berry-fázis alkalmazása: 1-qubit kapu	33
5.2.1. A Hamiltoni	33
5.2.2. A Hamiltoni vizsgálata	34
5.2.3. A görbületi egy-forma kiszámítása	36
5.2.4. A Berry-fázis kiszámítása	37
5.3. Aharonov-Anandan fázis	43
5.3.1. A ciklikus evolúció	43
5.3.2. Következmények	45
5.3.3. Paralell-transzport	47
5.3.4. Fubini-Study metrika	47

TARTALOMJEGYZÉK	2
5.3.5. Általánosítás	48
6. Kevert állapotok holonómiája	50
6.1. A Hilbert-Schmidt nyaláb	50
6.2. Konnekción	51
6.3. Számítások két-fermion-rendszerre	53
7. Összefoglalás, további tervek	55

1. fejezet

Bevezetés

Az elméleti fizikai kutatások célja jóval mélyebb, mint a mérési adatok közötti összefüggések megállapítása. Bízhatunk benne, hogy egy-egy természeti alaptörvény megsejtésével a mérési eredményekre való előrejelzésnél, vagy az eredmények felhasználásának lehetőségénél valami sokkal értékesebb ismeret jut birtokunkba. Ez az, ami a törvények matematikai struktúrájának vizsgálatát is motiválja. Ennek során pedig rendkívül hasznos a topológia keretében kifejlesztett eszköztár nem csak a kvantummechanika, általános relativitáselmélet alaptörvényei, hanem a klasszikus, hamiltoni mechanika tanulmányozásakor is.

E dolgozatban a holonomikus kvantumszámítógép konstrukcióját szeretnénk egy kissé körbejárni. A kvantumszámítógép kvantummechanikai alap-számítások egy izgalmas gyakorlati alkalmazása, mely sokféleképpen valósítható meg. A holonómiák segítségülhívásával a környezeti dekoherenciákra kevésbé érzékeny, robusztus megvalósítást kapunk. Ennek érdekében először bevezetjük a holonómiákat nyalábokon, áttekintünk kvantummechanikai alapfogalmakat, különös figyelemmel a kevert állapotokra, hogy a továbbiakban mind egyrészecske állapotok, mind kétrészecske kevert állapotok holonómiáit vehessük szemügyre.

2. fejezet

A holonómia

E dolgozat elméleti alapját az (an)holonómia fogalma adja. Ez egy geometriai jelenség, mely során egy rendszer paramétereit ciklikusan változtatva a hozzájuk csatolt változók nem térnek vissza eredeti állapotukba. Az eredeti állapottól való eltérés – a holonómia-transzformáció – függ a paraméterekkel bejárt görbe alakjától, így a változás hatása nem integrálható. A természetben számos jelenség mögött megbújó geometriai gyökerű struktúráról van szó, melynek vizsgálata mély összefüggéseket tárhat fel, új jelenségekre mutathat rá, és alternatív nézőpontot szolgáltatathat más nézőpontból már megértett jelenségek tárgyalásánál.

2.1. Egy példa: Foucault ingája

Mindenki által ismert Foucault híres ingakísérlete, mellyel a Föld forgása mutatható ki csillagászati eszközök nélkül, pusztán az egyenesen forgó vonatkoztatási rendszerben fellépő tehetetlenségi erők hatására hagyatkozva. Egy inerciarendszerben az inga lengési síkja változatlan maradna, a forgó Földön a ϕ szélességi körön viszont a Föld ω szögsebességvektora függőleges irányú vetületének nagyságával, vagyis $\omega_1 = \omega \sin \phi$ szögsebességgel fordul el. Felírható eszerint az egy nap alatti elfordulás:

$$\Delta\varphi = 2\pi \sin \phi \quad (2.1)$$

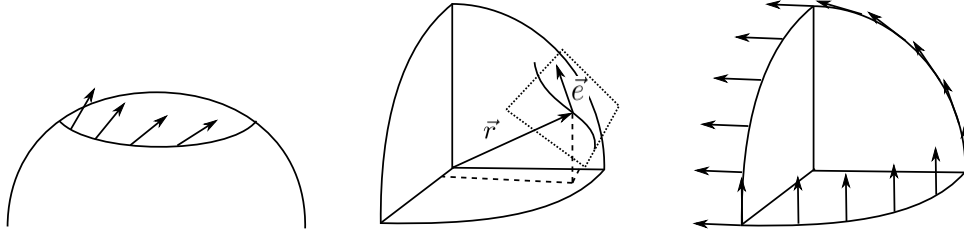
mely az északi póluson egy teljes, 2π -s elfordulást, Magyarországon $\phi = \pi/4$ -gyel becsülve $\sqrt{2}\pi$ -s elfordulást ad eredményül, míg az egyenlítőn nem észlelünk változást.

Az ingakísérlet szokásos tárgyalása a tehetetlenségi erők nézőpontjából történik. Mi most vegyük szemügyre a jelenség geometriáját! Nézzünk úgy a problémára, mintha egy gömb felületén akarnánk párhuzamosan eltolni az inga lengési síkját reprezentáló vektort! Motiváljon ebben az, hogy így a tehetetlenségi mozgást tulajdonképpen a párhuzamos eltolással azonosítjuk, a fellépő tehetetlenségi erőknek geometriai interpretációt adunk. Ez az alapgondolat később nagyon termékenynek bizonyult Einstein általános relativitáselméletében.

Vezessünk be néhány jelölést! (2.1 ábra) A Föld legyen egy egységnyi sugarú gömb, a középpontjából a felszínére mutató vektor legyen \vec{r} , és egy erre merőleges egységvektor legyen \vec{e} .

A gömbön vegyünk egy zárt görbét, melyet t -vel parametrizálunk: $\vec{r}(t)$, és $\vec{r}(0) = \vec{r}(T)$. Ekkor fenn kell állnia az egész görbén:

$$\vec{r}(t) \cdot \vec{e}(t) = 0 \quad (2.2)$$



2.1. ábra. A Foucault inga síkjának változása, görbementi párhuzamos eltolás és egy konkrét út után fellépő változás.

A párhuzamos eltolás szabálya ebben az esetben nagyon szemléletes lesz: az \vec{e} vektor lokálisan nem fordulhat el \vec{r} körül, vagyis:

$$\omega \cdot \vec{r} = 0 \quad (2.3)$$

ahol ω vektor az \vec{e} pillanatnyi forgástengely irányába mutató szögsebessége: $d\vec{e} = \omega \times \vec{e}$. (Az időfüggést nem jelöltük.) Célunk a fenti (2.3) szabály felírása a görbe segítségével. Ehhez írjuk fel ω vektort a görbe kíséző-triéderében:

$$\omega = a\vec{r} + b d\vec{r} + c(\vec{r} \times d\vec{r}) \quad (2.4)$$

ahol $a = 0$ fejezi ki a párhuzamos eltolás feltételét. Ekkor

$$d\vec{e} = b(d\vec{r} \times \vec{e}) + c(\vec{r} \times d\vec{r}) \times \vec{e} = b(d\vec{r} \times \vec{e}) - c(\vec{e} \cdot d\vec{r})\vec{r} \quad (2.5)$$

a kétszeres vektoriális szorzat kifejtése és (2.2) miatt. Belátható, hogy $d\vec{r} = \omega \times \vec{r}$, ebbe ω -t beírva a $(1 - c)d\vec{r} = b(d\vec{r} \times \vec{r})$ vektoregyenletet kapjuk, melynek egyedüli megoldása $b = 0$, $c = 1$. Tehát

$$\omega = \vec{r} \times d\vec{r}, \quad (2.6)$$

és (2.5) a következő alakot ölti:

$$d\vec{e} = -(\vec{e} \cdot d\vec{r})\vec{r}. \quad (2.7)$$

Ekkor kihasználva (2.3) időderiválásából adódó $\vec{r} \cdot d\vec{e} = -\vec{e} \cdot d\vec{r}$ egyenletet, végül a következő alakban kapjuk meg a párhuzamos eltolás feltételét:

$$(\mathbb{I} - \vec{r} \circ \vec{r})d\vec{e} = 0, \quad (2.8)$$

ami szemléletesen mutatja, hogy \vec{e} megváltozásának nem lehet a mindenkori \vec{r} -re merőleges komponense.

Egy általános zárt görbe mentén haladva egy vektorral úgy, hogy közben – lokálisan – betartjuk a párhuzamos eltolás szabályát, a kezdőpontba visszaérve végül – globálisan – tapasztalni fogunk egy elfordulást a kiindulási irányhoz képest. Ennek nagysága függ a bejárt görbétől. A Foucault inga nagyon speciális görbéket jár be: szélességi köröket. A lengési síkja eközben paralell-transzlált, ellentétben az ingát körülvevő szoba tengelyeivel, ezért tapasztaljuk a folyamatos elfordulását.

2.2. A topológiai struktúrák

Ebben a fejezetben rövid áttekintést adunk a felhasznált topológiai struktúrákról, melyek között csupán a nyalábokra adunk bővebb bevezetést. Nem célunk a részletek precíz tisztázása, csupán a későbbiek alapjául szolgáló fogalmakat szeretnénk bemutatni részint területi korlátok miatt, részint azért, mert a téma szerteágazó, és további tanulmányozást kíván.

A kvantumrendszerek geometriai vonatkozásairól szóló áttekintő munka [1]. A nyalábok, a rajtuk megadható konnekciók és holonómiák részletes bevezetését lásd [3]-ban. A nyalábot differenciálható sokaságokkal fogjuk bevezetni. A fizikában elsősorban ilyen nyalábok kerülnek szóba, de lehetőség van általánosabb topologikus terekkel való bevezetésre is, lásd [2]-ben.

2.2.1. Nyaláb

Általánosan a nyaláb egy olyan topologikus tér, amely lokálisan két topologikus tér descartes-szorzataként tekinthető. Ez a fizika számára egy nagyon hasznos tulajdonság. A következőkben differenciálható sokaságokkal vezetjük be a nyaláb fogalmát: $\mathcal{E}, \mathcal{M}, \mathcal{F}$ differenciálható sokaságok neve legyen sorban nyalábtér, alaptér és szál. A nyaláb definíciója ekkor:

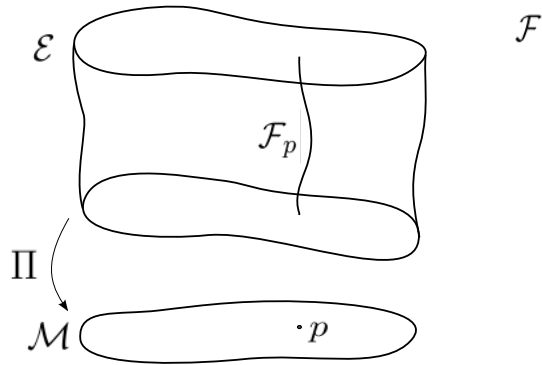
1. Legyen Π egy szürjektív leképezés:

$$\Pi : \mathcal{E} \longrightarrow \mathcal{M}, \quad (2.9)$$

melyet a nyaláb projekciójának nevezünk. (2.2 ábra) Az $p \in \mathcal{M}$ -pont feletti száznak nevezzük azokat a pontokat \mathcal{E} -ben, melyeket Π ugyanarra az \mathcal{M} -beli pontra képez le:

$$\mathcal{F}_p = \Pi^{-1}(p). \quad (2.10)$$

Az egyes pontok feletti szálak homeomorfak \mathcal{F} térrel.



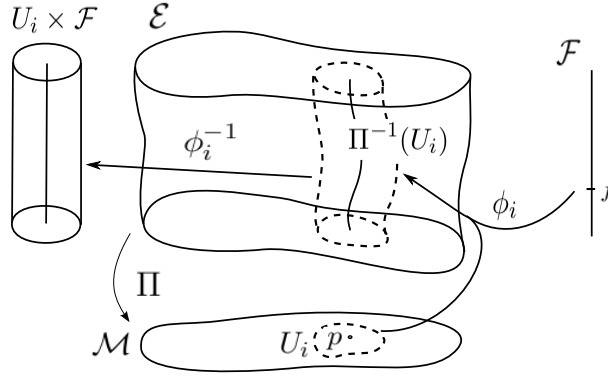
2.2. ábra. Nyaláb

2. Létezik egy \mathcal{F} -en ható G Lie-csoport, melyet struktúracsoportnak nevezünk.
3. \mathcal{M} egy nyílt lefedése $\{U_i\}$, ekkor léteznek a következő diffeomorfizmusok:

$$\phi_i : U_i \times \mathcal{F} \longrightarrow \Pi^{-1}(U_i) \quad (2.11)$$

$$\Pi(\phi_i(p, f)) = p \quad (2.12)$$

melyet helyi trivializációnak neveznek, mivel inverze $\Pi^{-1}(U_i)$ -t $U_i \times \mathcal{F}$ direktzor-
zattérre képezi. (Lásd a 2.3 ábrán.) Ezáltal a nyalábtér lokálisan diffeomorf lesz az
alaptér és a szál direktzorzatával. Fontos, hogy a fenti leképezések nem egyértelműen
léteznek: egy nyaláb gyakran többféleképpen is trivializálható.



2.3. ábra. A nyaláb trivializációi

4. Bevezetjük adott $p \in \mathcal{M}$ pontra $\phi_{i,p}(f) = \phi_i(p, f)$ diffeomorfizmust, mely

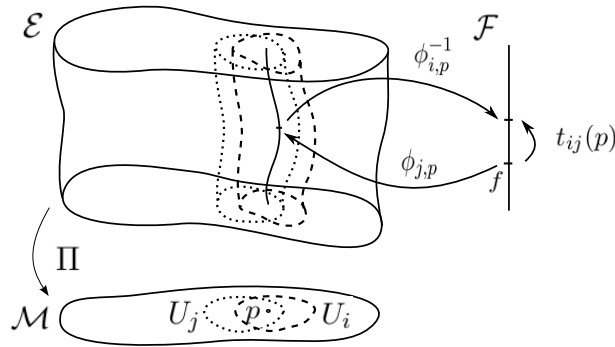
$$\phi_{i,p} : \mathcal{F} \longrightarrow \mathcal{F}_p. \quad (2.13)$$

Ekkor átfedő $U_i, U_j \subset \mathcal{M}$ esetén ϕ_i^{-1} és ϕ_j^{-1} egy $u \in \mathcal{E}$ ponthoz, melyre $\Pi(u) = p \in U_i \cap U_j$, nem feltétlenül ugyanazt az \mathcal{F} -beli pontot rendeli. Ekkor $\phi_i^{-1}(u) = (p, f_i)$ és $\phi_j^{-1}(u) = (p, f_j)$. A kettő kapcsolatának leírásához képezzük:

$$t_{ij}(p) = \phi_{i,p}^{-1} \phi_{j,p} : \mathcal{F} \longrightarrow \mathcal{F}. \quad (2.14)$$

Ezeket a $t_{ij}(p)$ leképezéseket áttérési függvényeknek nevezzük. Működésüket a 2.4 ábra szemlélteti. Az áttérési függvények halmaza izomorf kell legyen G -vel, vagyis $t_{ij} : U_i \cap U_j \rightarrow G$. Tehát az áttérési függvények transzformációkat valósítanak meg a szálon. Ekkor kapcsolatba hozhatjuk a ϕ_i^{-1} és ϕ_j^{-1} leképezések hatását: $f_i = t_{ij}(p)f_j$, vagyis:

$$\phi_j(p, f) = \phi_i(p, t_{ij}(p)f). \quad (2.15)$$



2.4. ábra. Az áttérési függvények

Az áttérési függvényekre fenn kell állnia a következő feltételeknek:

$$t_{ii}(p) = \mathbb{I} \quad (\forall p \in U_i) \quad (2.16)$$

$$t_{ij}(p) = t_{ji}(p)^{-1} \quad (\forall p \in U_i \cap U_j) \quad (2.17)$$

$$t_{ij}(p)t_{jk}(p) = t_{ik}(p) \quad (\forall p \in U_i \cap U_j \cap U_k) \quad (2.18)$$

ahol \mathbb{I} az identitás \mathcal{F} -en. Amennyiben $t_{ij}(p) = \mathbb{I}$ az összes olyan i, j, p -re, ahol $p \in U_i \cap U_j$, akkor a nyalábot triviális nyalábnak nevezzük. Egy triviális nyaláb előáll $\mathcal{E} = \mathcal{M} \times \mathcal{F}$ alakban.

Ahhoz, hogy a fent definiált $(\mathcal{E}, \Pi, \mathcal{M}, \mathcal{F}, G)$ struktúrát nyalábnak nevezzük, szükséges, hogy a definíció független legyen az $\{U_i\}$ lefedés megválasztásától. Egy konkrét $\{U_i\}$ lefedéshez tartozó definíció egy koordinátanyaláb definíciója. A nyaláb a koordinátanyalábok egy ekvivalenciaosztálya, ahol az ekvivalenciarelációt a következőképpen definiáljuk: $(\mathcal{E}, \Pi, \mathcal{M}, \mathcal{F}, G, \{U_i\}, \{\phi_i\})$ és $(\mathcal{E}, \Pi, \mathcal{M}, \mathcal{F}, G, \{U_j\}, \{\phi_j\})$ koordinátanyalábok ekvivalensek akkor és csak akkor, ha $(\mathcal{E}, \Pi, \mathcal{M}, \mathcal{F}, G, \{U_j\} \cup \{U_i\}, \{\phi_i\} \cup \{\phi_j\})$ is koordinátanyaláb.

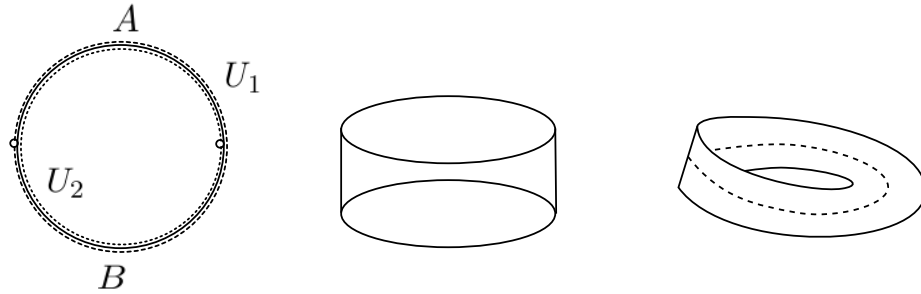
A nyaláb egy lokális szelésének nevezzük a

$$s : \mathcal{U} \subset \mathcal{M} \longrightarrow \mathcal{E} \quad (2.19)$$

$$p \longmapsto s(p) \in \mathcal{F}_p \quad (2.20)$$

sima leképezéseket, vagyis $\Pi s = \mathbb{I}_{\mathcal{M}}$. Amennyiben értelmezési tartománya az egész \mathcal{M} alaptér, akkor globális szelésnek, vagy egyszerűen szelésnek nevezzük. Nem minden nyalábnak létezik globális szelése. A szelések tulajdonképpen az alaptér beágyazásai a nyaládba.

Tekintsünk egy példát nyalábra! (2.5 ábra) Legyen az alaptér $\mathcal{M} = S^1$ kör, a szál pedig $\mathcal{F} = [1, -1] \subset \mathbb{R}$ zárt intervallum. Az alaptér nyílt lefedése álljon a következő két halmazból: $U_1 = (0, \pi)$, $U_2 = (-\pi, \pi)$, melyeknek metszetei $A = (0, \pi)$, és $B = (\pi, 2\pi)$.



2.5. ábra. S^1 , és két lehetséges S^1 feletti nyaláb.

Legyen ekkor a fedőhalmazokhoz tartozó ϕ_1, ϕ_2 az alábbi módon megadva A felett:

$$\phi_1^{-1}(u) = (\Theta, t), \quad \phi_2^{-1}(u) = (\Theta, t). \quad (2.21)$$

$(\Theta \in A, t \in \mathcal{F})$ Az áttérési függvény A felett identikus:

$$t_{12}(\Theta)t = t \quad (2.22)$$

Két lehetőségünk van ϕ_i leképezések megadására B felett:

$$1 : \quad \phi_1^{-1}(u) = (\Theta, t), \quad \phi_2^{-1}(u) = (\Theta, t) \quad (2.23)$$

$$2 : \quad \phi_1^{-1}(u) = (\Theta, t), \quad \phi_2^{-1}(u) = (\Theta, -t) \quad (2.24)$$

Az első esetben $t_{12}(\Theta) = \mathbb{I}$ lesz B felett is, ekkor a nyaláb egy hengerpalást. Ez tehát egy triviális nyaláb, struktúracsoportja az egyelemű csoport, $G = \{e\}$. A második esetben

$$t_{12}(\Theta)t = -t \quad \Theta \in B. \quad (2.25)$$

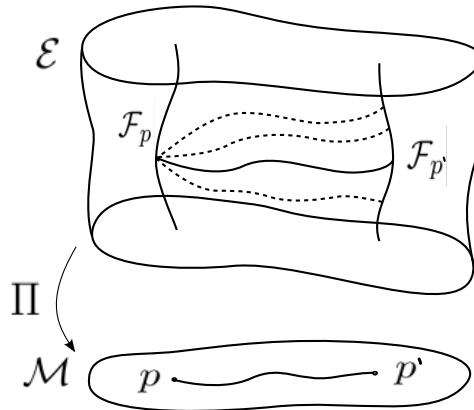
Ekkor az úgynevezett Möbius-szalagot kapjuk. Az A feletti áttérési függvény identikus, a B feletti áttérési függvényt kétszer egymás után alkalmazva szintén az identitást kapjuk, így a Möbius-szalag struktúracsoportja $G = \{e, g\} \cong \mathbb{Z}_2$ kételemű csoport. Ez tehát nem triviális nyaláb: nem állítható elő az alaptér és a szál direktszorzataként, noha ezt lokálisan – külön-külön A és B felett – megtehetjük.

Az érintőnyaláb esetében a nyalábtér az \mathcal{M} alaptér összes érintővektorának halmaza. A Π projekció az érintővektorokhoz az \mathcal{M} -beli kezdőpontjukat rendeli. Ekkor az alaptér adott pontja feletti szál $\mathcal{F}_p = T_p\mathcal{M}$ az adott pontbeli érintőtérrel azonos, mely egy lineáris tér. Egy reprezentáns \mathcal{F} érintőteret választva a differenciálható sokaságok szép tulajdonságainak köszönhetően létezik, de nem egyértelműen $\mathcal{F}_p \rightarrow \mathcal{F}$ diffeomorfizmus. A lehetséges $\mathcal{F}_p \rightarrow \mathcal{F}$ diffeomorfizmusok az \mathcal{F} lineáris transzformációival különbözhetnek egymástól, így az érintőnyaláb struktúracsoportja az érintőtéren ható teljes lineáris csoport. Az érintőnyaláb szelései ekkor az alaptér feletti vektormezőik. A Foucault-inga egy példa az érintőnyalábra: az alaptér az \mathcal{S}^2 földfelszín, a szál \mathbb{R}^2 érintőtér, a struktúra-csoport az ezen ható általános lineáris transzformációk: $GL(2, \mathbb{R})$.

A kvantumrendszerek leírásánál megjelenő nyalábokkal foglalkozunk a két utolsó fejezetben.

2.2.2. Konnekción és holonómia

A nyalábban sok görbe van, amit Π ugyanarra az alaptérbeli görbére képez le. Ahhoz, hogy egy alaptérbeli görbét valamilyen egyértelmű módon „kiemeljünk” a nyalábra, szükségünk van rá, hogy meg tudjuk különböztetni a „vertikális” és „horizontális”, vagyis a szál-irányú, és az arra merőleges irányokat a nyalábban.



2.6. ábra. Horizontális (folytonos vonal) és nem horizontális (szaggatott vonal) görbék.

Konnekciónak nevezzük azt a szabályt, aminek segítségével megadhatjuk, hogy hogyan hasad fel a nyaláb horizontális és vertikális irányokra. Általánosan, koordinátafüggetlenül a konnekción megadása egy A konnekción egy-forma megadását jelenti a nyalábban, amellyel egy h vektor horizontális ha:

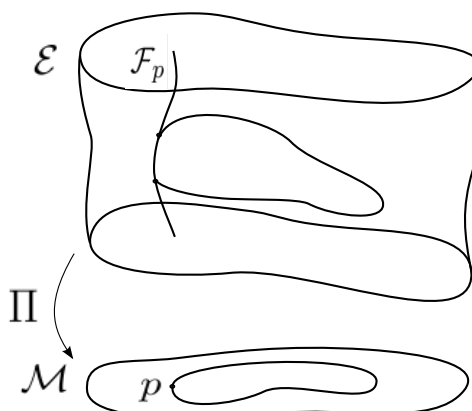
$$A(h) = 0 \quad (2.26)$$

Ekkor az alaptérbeli görbe horizontális kiemeltjének nevezünk egy görbét a nyalábon, ami minden pontjában vízszintes irányú. Ilyen görbe a szál minden pontjához egyértelműen létezik.

Ha egy érintő-nyalábot tekintünk, mint a Foucault-inga példájában, akkor a konnekciónak a párhuzamos eltolást jelenti: a horizontális görbe olyan, melynek nincs nyalábirányú komponense, vagyis lokálisan nincs változás az érintőtérben.

Az egyrészecske-kvantumrendszerek Hilbert-tereiben a szemléletes relatív fázis fog konnekciónak definiálni, míg kevert állapotoknál a Hilbert-Schmidt nyalábon Uhlmann által felírt konnekciónak ad erre lehetőséget. Ezeket az utolsó két fejezetben mutatjuk be.

Amennyiben van egy konnekción a nyalábon, akkor megadható egy alaptérbeli görbe horizontális kiemeltje. Ha a nyaláb nem triviális struktúrájú, – vagyis nem írható fel globálisan descartes-szorzat alakban, – akkor az alaptér egy zárt görbéjének horizontális kiemeltje a nyalábon általában nem lesz zárt görbe. (2.7 ábra)



2.7. ábra. Zárt görbe és horizontális kiemeltje.

Az eltérés a szálon a kezdő és a végpont között a görbe alakjától függő transzformáció. Ezek csoportot alkotnak, melyet a nyaláb holonómia-csoportjának nevezünk, mely információt hordoz a nyaláb szerkezetéről.

A Foucault-inga példájában az érintőtérben az inga síkja elfordul. Általános görbék esetén ezt az elfordulást $SO(2)$ adja, mint e nyaláb holonómia-csoportja. Speciálisan szélességi körökön való paralell-transzlálás során is megkapjuk az összes lehetséges $0..2\pi$ szöggel való elfordulást (2.1) értelmében.

3. fejezet

Kvantummechanikai áttekintés

3.1. Axiomatikus elméletek a fizikában

A fizikai valóság bizonyos összefüggő jelenségeköréit fizikai elméletekkel írjuk le. Amikor egy ilyen elméletet megfogalmazunk, egyszersmind döntünk annak érvényességi köréről, valamint ezzel együtt a valóság modelljéül felhasznált matematikai objektumokról. Azt mondjuk például, hogy egy háromdimenziós térbeli tömegpontokra fennállnak a newtoni mechanika alaptörvényei, továbbá ebből szép közvetlen tapasztalati összefüggéseket vezetünk le: Kepler törvényeit. Amennyiben ezt az elméletet a bolygómozgás leírására kívánjuk használni, érvényességi köre kis energiákra terjed csak ki: sebességük a fény sebességéhez képest kicsi. Ennek köszönhetően viszont azt nyerjük, hogy a matematikai objektumaink egyszerűek: háromdimenziós euklideszi tér, és viszonylag egyszerű felépítésű dinamikai egyenletek. Az elmélet érvényességi körének kiterjesztéséhez már jóval bonyolultabb matematikai eszközök kellene: Einstein gravitációelmélete, az általános relativitás elmélet felhasználja a riemann geometria, valamint a tenzor-analízis eszköztárát. A dinamikai egyenlet, – az Einstein-egyenlet – is bonyolultabb: egy kétindexes tenzoregyenlet. Fontos, hogy a tágabb érvényességi körű elmélet határesetként magában foglalja a szűkebb érvényességi körű elméletet.

A fenti példa a fizikai elméletek axiómáinak szerepét kívánja kissé megvilágítani. A fizikai elméletek axiómái rögzítik a fizikai jelenségeket modellező matematikai objektumokat, lehetővé téve ezzel azt, hogy matematikailag, a valóságtól elvonatkoztatva gondolkodjunk a valóságról, de látni kell, hogy az elmélet érvényességi köre magukat az axiómákat is korlátozza. Vagyis egy fizikai elmélet axiómarendszere jóval lazább, mint egy matematikaié, ezt figyelembe kell venni, amikor az elmélet határterületeire vonatkozó következtetéseket szeretnénk levonni. Nem sérthetetlen matematikai posztulátumokat fektetünk le, csupán megállapítunk egy irányadó tárgyalásmódot, melyet alkalmasságán, és némely esetben – a nehezen megfogható, ám annál meggyőzőbb – esztétikumon túl mélyebb indok nem igazol. Ez a látszólagos „lazaság” nem fogyatékosága a fizikának, egyszerűen máshogyan működik, lévén egészen más, mint a matematika. A kettőt nem szabad összemosni, annak ellenére sem, hogy a fizika történetének tanulsága szerint a természet leírására a matematika alkalmas; látnunk kell, hogy a legutóbbi állítás koránsem magától értetődő. Fizikán túli területekre kelene kalandozni ahhoz, hogy legalább valamelyest szemügyre vehessük a matematika és a fizika kapcsolatát.

3.2. A Kvantummechanika axiómái

A fentiek fényében tekintsük most át a kvantummechanika axiómáit! (Bővebben lásd [6]-ban.) Mint minden axiomatikus elméletnél, itt is vannak fogalmak, melyeket nem tudunk az elmélet keretein belül definiálni, mivel éppen az ő segítségével fogalmazzuk meg az axiómákat. Ilyen fogalmak: az állapot, a dinamikai változó, vagy a mérés.

3.2.1. Állapot

Anélkül tehát, hogy tudnánk, önmagában mi az az állapot, rögzítjük a kvantummechanika első axiómájaként, hogy *a fizikai rendszer állapotait a rendszerhez tartozó komplex szeparábilis Hilbert-tér sugarai reprezentálják.*

A komplex számtest feletti vektorteret az interferencia jelensége motiválta: ennek szép leírása komplex számok összegének abszolútérték-négyzetével történhet. Egy topologikus tér szeparábilis, ha létezik benne halmaz, mely megszámlálható elemszámú, és sűrű, vagyis lezártja a teljes tér. Egy Hilbert-tér nyilván topologikus tér, mivel rajta a belső szorzat által indukált norma metrikát definiál, mely segítségével meghatározottá válnak a nyílt gömbök, vagyis egy standard topológia. Így az, hogy egy Hilbert tér szeparábilis, azt jelenti, hogy létezik benne egy megszámlálható bázis, melyre nézve vektorai kifejtethetők, ekkor a kifejtési együtthatók sorozata négyzetesen összegezhető.

$$|\varphi_i\rangle \in \mathcal{H}, \quad i \in I, \quad (3.1)$$

$$\forall |\Phi\rangle \in \mathcal{H}: \quad |\Phi\rangle = \sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i | \Phi \rangle = \sum_i c_i |\varphi_i\rangle, \quad c \in \ell^2. \quad (3.2)$$

Az egymástól konstans szorzóban különböző vektorok egydimenziós altérket határoznak meg, melyeket a Hilbert-tér sugarainak nevezzük.

$$[\phi] = \{\varphi \in \mathcal{H} : \varphi = a\phi, a \in \mathbb{C}, a \neq 0\}. \quad (3.3)$$

A kvantummechanika később tárgyalandó dinamikai egyenleteinek linearitása miatt egy állapottal annak konstansszorososa – a mérésekre nézve – vele egyenértékű állapotot valósít meg, így a Hilbert tér sugarai válnak relevánssá az állapot leírásában. A fenti megállapítás következményeként az állapotok tereinek nemtriviális topológiai tulajdonságai adódnak.

3.2.2. Dinamikai változók

A kvantummechanika matematikai tárgyalása a klasszikus, hamiltoni mechanikában gyökeres. Ez a dinamikai változókra – mint időfüggő mennyiségekre – egyenleteket fogalmaz meg bizonyos paraméterek mellett, mint például a tömeg. A kvantummechanika második axiómája a dinamikai változókról szól. Ezt azért kívánjuk hangsúlyozni, mert gyakran tévesen általános „fizikai mennyiségekre” fogalmazzák meg, melyek közé beleérthető a tömeg vagy az idő is.

A rendszer dinamikai változóinak az állapotok Hilbert-terén ható önadjungált operátorok felelnek meg.

$$A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad A = A^\dagger. \quad (3.4)$$

A diszkrét spektrumú operátorok sajátértékeivel a természetben megfigyelt kvantumos viselkedés válik matematikailag kezelhetővé. Egy önadjungált operátor sajátértékei valósak,

– ahogy ez elvárható a mért fizikai mennyiségektől, – sajátvektorrendszere ortogonális és sűrű a Hilbert-térben:

$$A|\varphi_i\rangle = \lambda_i|\varphi_i\rangle, \quad (3.5)$$

$$\lambda_i \in \mathcal{R}, \quad \langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}, \quad \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| = \mathbb{I}. \quad (3.6)$$

Egy normált állapotot a dinamikai változó normált sajátállapotainak bázisán kifejtve, a kifejtési együtthatók abszolútérték-négyzetét interpretáljuk az adott sajátállapot kimérésének valószínűségével:

$$p_A^\Phi(i) = |\langle\Phi|\varphi_i\rangle|^2. \quad (3.7)$$

Tehát a mérés várható értékét, mely nyilván a lehetséges kimenetek a valószínűségekkel súlyozott összege, az operátor „kvantummechanikai” várható értéke adja:

$$\langle A \rangle_\Phi = \langle\Phi|A\Phi\rangle = \langle\Phi|\sum_i \lambda_i|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\Phi\rangle = \sum_i \lambda_i p_A^\Phi(i). \quad (3.8)$$

A normáltság előfeltétele a valószínűségi tárgyalásmódnak. Egy önadjungált operátor sajátállapotai a lehetséges különböző, egymást kizáró mérési eredmények teljes esemény-rendszerét alkotják, ahol így a valószínűségek összege 1:

$$\sum_i p_A^\Phi(i) = \sum_i \langle\Phi|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\Phi\rangle = \|\Phi\|^2 := 1 \quad (3.9)$$

A később tárgyalandó, mérésre vonatkozó axiómában rögzítjük azt, hogy a sztochasztikus viselkedést nem hiányos ismereteink következményének, hanem a természet egy alapvető, lényegi tulajdonságának tekintjük.

3.2.3. Összetett rendszerek

Az összetett rendszerek tárgyalása nem triviális, a kvantummechanika megrázó furcsaságai ebből adódnak. Ezzel foglalkozik a harmadik axióma: *Az összetett rendszert a részrendszerek Hilbert-tereinek tenzorszorzatterével írjuk le.* A tenzorszorzat matematikai konstrukciója teszi lehetővé a részrendszerek kölcsönhatásának reprezentálását, így „az egész több lesz, mint a részek összege.”

Nézzük meg, hogy hogyan kaphatjuk meg az egyik részrendszer dinamikai változójának várható értékét általánosan! Legyen $\{|\varphi_i\rangle\}_{i \in I}$ teljes ortonormált bázis \mathcal{H}_1 -en, és $\{|\psi_j\rangle\}_{j \in J}$ teljes ortonormált bázis \mathcal{H}_2 -n.

$$|\Phi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2, \quad |\Phi\rangle = \sum_{ij} W_{ij} |\varphi_i\rangle \otimes |\psi_j\rangle, \quad (3.10)$$

$$\|\Phi\|^2 = \sum_{ij} \bar{W}_{ij} W_{ij} = \text{Tr}(WW^\dagger) := 1, \quad (3.11)$$

Egy dinamikai változó az első részrendszerben ekkor:

$$A = \sum_{kl} A_{kl} |\varphi_k\rangle\langle\varphi_l| \quad (3.12)$$

Ennek számítsuk ki a kvantummechanikai várhatóértékét a fenti állapotban:

$$\begin{aligned}
\langle \Phi | (A \otimes \mathbb{I}) \Phi \rangle &= \left\langle \sum_{ij} W_{ij} \varphi_i \otimes \psi_j \middle| \sum_{kl} A_{kl} |\varphi_k\rangle \langle \varphi_l| \otimes \mathbb{I} \middle| \sum_{mn} W_{mn} \varphi_m \otimes \psi_n \right\rangle \\
&= \sum_{ijklmn} \bar{W}_{ij} A_{kl} W_{mn} \langle \varphi_i | \varphi_k \rangle \langle \varphi_l | \varphi_m \rangle \langle \psi_j | \psi_n \rangle \\
&= \sum_{ijl} \bar{W}_{kj} A_{kl} W_{lj} = \text{Tr} \left(W W^\dagger A \right)
\end{aligned} \tag{3.13}$$

ahol $W = \sum_{ab} W_{ab} |\varphi_a\rangle \langle \varphi_b|$. Hasonlóan belátható, hogy

$$\langle \Phi | (\mathbb{I} \otimes A) \Phi \rangle = \text{Tr} \left(W^T \bar{W} A \right) \tag{3.14}$$

A fentiekben kapott $\varrho_1 = W W^\dagger$ és $\varrho_2 = W^T \bar{W}$ operátorokat az első és a második részrendszer redukált sűrűségoperátorainak nevezzük. Nem-nulla sajátértékeik multiplicitással megegyeznek. A felírásból nyilvánvaló, hogy a fenti operátorok önadjungáltak, sőt pozitív szemidefinitek, és könnyen látszik a következő:

$$\text{Tr} \left(W W^\dagger \right) = \text{Tr} \left(W^T \bar{W} \right) = \|\Phi\|^2 = 1. \tag{3.15}$$

Az adott részrendszeren végzett mérések várhatóértékét tehát a sűrűségoperátorokkal kapott nyommal számolhatjuk ki. Összetett rendszer esetében általában nem találunk olyan $\Phi_1 \in \mathcal{H}_1$ elemet, amire $\langle \Phi | (A \otimes \mathbb{I}) \Phi \rangle = \langle \Phi_1 | A \Phi_1 \rangle$ fennállna, – vagyis nincs olyan állapota a részrendszer Hilbert-terének, mely leírná a részrendszert. Ekkor a részrendszer kevert állapotban van. („Mixed state”) Amennyiben mégis található olyan állapot a részrendszer Hilbert-terében, amely leírja a részrendszert, tiszta állapotról („pure state”) beszélünk. A tiszta állapot is leírható sűrűségoperátorral:

$$\begin{aligned}
\langle \Phi_1 | A \Phi_1 \rangle &= \langle \Phi_1 | A \sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \Phi_1 \rangle \\
&= \sum_i \langle \varphi_i | \Phi_1 \rangle \langle \Phi_1 | A | \varphi_i \rangle \\
&= \text{Tr} (|\Phi_1\rangle \langle \Phi_1| A)
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Vagyis egy $|\Phi_1\rangle$ tiszta állapotú részrendszer sűrűségoperátora: $\varrho_1 = |\Phi_1\rangle \langle \Phi_1|$, egy 1-rangú projekció: $\varrho_1^2 = \varrho_1 = \varrho_1^\dagger$. A fent tárgyalt példában a teljes $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ -ben leírt rendszer a $|\Phi\rangle$ tiszta állapotban volt, ekkor képezhetjük a teljes rendszer sűrűségoperátorát:

$$\begin{aligned}
\varrho &= |\Phi\rangle \langle \Phi| \\
&= \sum_{ijkl} W_{ij} \bar{W}_{kl} (|\varphi_i\rangle \otimes |\psi_j\rangle) (\langle \varphi_l| \otimes \langle \varphi_k|) \\
&= \sum_{ijkl} W_{ij} \bar{W}_{kl} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_k| \otimes |\psi_j\rangle \langle \psi_l|
\end{aligned} \tag{3.17}$$

és a (3.13) számítás alapján kapott redukált sűrűségoperátorokat ebből a megfelelő rész-

alakban megadott állapotot leíró W_{ij} mátrix diagonális lesz. Könnyen beláthatjuk ezt az állítást, ha felhasználjuk a mátrixok szinguláris-érték felbontását. Ez a következőt jelenti: bármely A $n \times m$ -es mátrix felírható a következő alakban:

$$A = UDV, \quad (3.24)$$

ahol U $n \times n$ -es, V $m \times m$ -es unitér mátrixok, D pedig egy valós pozitív elemű $n \times m$ -es nem négyzetes diagonális mátrix, mely alatt a következőt értjük: $D_{ij} = \alpha_i \delta_{ij}$. Ekkor

$$\begin{aligned} |\Phi\rangle &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m W_{ij} |\varphi_i\rangle \otimes |\psi_j\rangle \\ &= \sum_{i,k=1}^n \sum_{j,l=1}^m U_{ik} \sqrt{\eta_k} \delta_{kl} V_{lj} |\varphi_i\rangle \otimes |\psi_j\rangle \\ &= \sum_{k=1}^{\min(n,m)} \sqrt{\eta_k} \left(\sum_{i=1}^n U_{ik} |\varphi_i\rangle \right) \otimes \left(\sum_{j=1}^m V_{kj} |\psi_j\rangle \right), \end{aligned} \quad (3.25)$$

ami megegyezik (3.23)-mal. Képezzük ennek a tiszta állapotnak a sűrűségoperátorát:

$$\rho = |\Phi\rangle\langle\Phi| = \sum_{k,l=1}^s \sqrt{\eta_k} \sqrt{\eta_l} |\xi_k\rangle\langle\xi_l| \otimes |\zeta_k\rangle\langle\zeta_l|, \quad (3.26)$$

amiből megkaphatóak a részrendszerek redukált sűrűségoperátorai:

$$\rho_1 = Tr_2 \rho = \sum_{k=1}^s \eta_k |\xi_k\rangle\langle\xi_k| \quad (3.27)$$

$$\rho_2 = Tr_1 \rho = \sum_{k=1}^s \eta_k |\zeta_k\rangle\langle\zeta_k|. \quad (3.28)$$

Tehát a Schmidt-dekompozíció során megjelenő U és V unitér bázistranszformációk fogják egyszerre a két részrendszer Hilbert-terén diagonalizálni a sűrűségoperátort.

Egy \mathcal{H}_1 Hilbert-tér ρ_1 sűrűségoperátorával jellemzett rendszer purifikációjának nevezük ennek alapján általánosan az olyan $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ Hilbert-téren ható ρ állapotú kibővített rendszert, melyre $\rho_1 = Tr_2 \rho$. Láttuk tehát, hogy egy rendszernek létezik purifikációja, de nem egyértelműen. Ennek következményeivel foglalkozunk a **6.** fejezetben.

3.2.4. Mérés

Az előzőekben azt láttuk, hogy a rendszer-állapotok szemléletesen azt az eloszlást jelentik, amelyekkel a mérések várhatóértékeit kapjuk, legyen az állapot akár sűrűségoperátorral, akár vektorral megadva. Most beszélnünk kell arról is, hogy a mérésre hogyan reagál a rendszer. Szükségszerű ugyanis, hogy a rendszer állapota megváltozzon egy méréstől, mivel a méréskor a dinamikai változót, mint valószínűségi változót kiértékeljük, ez által megtudjuk, hogy az addig valószínűségeloszlással jellemzett rendszer egy példányának adott dinamikai változója milyen értéket vett fel. Mivel már tudjuk a pontos értéket, nem beszélhetünk úgy a rendszerről, mintha a korábban lemerített dinamikai változó valószínűségi változó lenne, mert egy újabb mérés ismét a már megkapott eredményt adná. Ezt interpretálhatjuk úgy, hogy méréskor a valószínűségi változó spektruma fog megváltozni, hirtelen az egyik étrék

valószínűsége 1 lesz, a többié 0. Ez viszont azt jelenti, hogy a rendszert leíró Hilbert-tér elem, vagy sűrűségoperátor fog hirtelen megváltozni: „beugrik” a kimért állapotba, az ezután végzett mérések már azonos eredményt adnak.

Az állapotnak ez a beugrása talán a legmegfoghatatlanabb jelensége a kvantumvilágnak. Az axióma csak arról beszél, hogy milyen matematikával írjuk le a mérést, arról nem, hogy „mi történik”, ami egy sokkal érdekesebb – és nehezebb – kérdés.

Lássuk tehát, hogyan lehet a mérésakor történő változást matematikailag megfogalmazni általánosan, kevert állapotokra! *Az n különböző η_i értéket felvevő mérést olyan V_i operátorokkal reprezentáljuk, melyekre*

$$\sum_{i=1}^n V_i^\dagger V_i = \mathbb{I}. \quad (3.29)$$

A mérés hatására a rendszer sűrűségoperátora a következőképpen fog megváltozni:

$$\varrho \mapsto \sum_{i=1}^n V_i \varrho V_i^\dagger. \quad (3.30)$$

A megfelelő η_i kimenetel valószínűsége:

$$p^\varrho(i) = \text{Tr} V_i \varrho V_i^\dagger, \quad (3.31)$$

és amennyiben a méréskor az η_i értéket kapjuk, akkor a mérés végrehajtása után a rendszer sűrűségoperátora:

$$\varrho \mapsto \frac{V_i \varrho V_i^\dagger}{\text{Tr} V_i \varrho V_i^\dagger}. \quad (3.32)$$

Az (3.31) valószínűségek összege nyilván 1 lesz (3.29) miatt. Az egyes kimenetekhez tartozó (3.32) „feltételes sűrűségmátrixok” a hozzájuk tartozó valószínűségekkel szorozva és összeadva éppen a (3.30) feltétel nélküli sűrűségmátrixot adja, a teljes valószínűség tételével összhangban.

Egy megismételhető – más néven Neumann-féle – mérés, melyről ez a fejezet elején ejtettünk szót, páronként ortogonális projekció-operátorokkal reprezentálható. Két ilyen mérést egymás után elvégezve a második már nem változtat a sűrűségi mátrixon:

$$P_i^\dagger = P_i \quad (3.33)$$

$$P_i P_j = \delta_{ij} P_i \quad (3.34)$$

$$\varrho \mapsto \sum_i P_i \varrho P_i \mapsto \sum_{ij} P_j P_i \varrho P_i P_j = \sum_i P_i \varrho P_i \quad (3.35)$$

A diszkrét spektrumú dinamikai változókhöz mindig tartozik egy Neumann-féle mérés, melyben a mérést reprezentáló ortogonális projekciókat az operátor spektrális felbontása adja, ahol:

$$A|\varphi_i\rangle = \lambda_i|\varphi_i\rangle, \quad (3.36)$$

$$\lambda_i \in \mathbb{R}, \quad \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij} \quad \sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = \mathbb{I} \quad (3.37)$$

$$A = \sum_i \lambda_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = \sum_i \lambda_i P_i \quad (3.38)$$

Illusztrációként nézzük meg a $|\Phi\rangle$ -vel jellemzett $\varrho = |\Phi\rangle\langle\Phi|$ sűrűségoperátorú tiszta állapotú rendszer „beugrását”, mivel ez szemléletesebb, mint a kevert állapotú sűrűségoperátorok viselkedése:

$$\begin{aligned} p_A^{\varrho}(i) &= \text{Tr} P_i |\Phi\rangle\langle\Phi| P_i \\ &= \sum_j \langle\varphi_j| P_i |\Phi\rangle\langle\Phi| P_i |\varphi_j\rangle \\ &= \langle\Phi| P_i \sum_j |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j| P_i |\Phi\rangle \\ &= \langle\Phi| P_i P_i |\Phi\rangle = \|P_i |\Phi\rangle\|^2 = \|\langle\varphi_i|\Phi\rangle\|^2 \end{aligned} \quad (3.39)$$

összhangban a kifejtési együtthatókról korábban mondottakkal. Most pedig nézzük meg az állapot megváltozását (3.32) szerint:

$$|\Phi\rangle\langle\Phi| \mapsto \frac{P_i \varrho P_i}{\text{Tr} P_i \varrho P_i} = \frac{|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\Phi\rangle\langle\Phi|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|}{\|\langle\varphi_i|\Phi\rangle\|^2} = |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \quad (3.40)$$

tehát a mérés hatására jól látható a tiszta állapot beugrása a mért értéknek megfelelő operátor-sajátállapotba:

$$|\Phi\rangle \mapsto |\varphi_i\rangle \quad (3.41)$$

Vizsgáljuk még meg, hogy mi történik a fenti módon megfogalmazott mérés hatására egy összetett rendszer részrendszereiben: írjuk fel az egyik részrendszer egy önadjungált operátorának várhatóértékét, ha a másik részrendszerben mérést végzünk:

$$\begin{aligned} \langle A \otimes \mathbb{I} \rangle_{\varrho'} &= \text{Tr} \sum_i (\mathbb{I} \otimes V_i) \varrho (\mathbb{I} \otimes V_i^\dagger) (A \otimes \mathbb{I}) \\ &= \text{Tr} \sum_i (\mathbb{I} \otimes V_i^\dagger) (\mathbb{I} \otimes V_i) \varrho (A \otimes \mathbb{I}) \\ &= \text{Tr} \varrho (A \otimes \mathbb{I}) = \langle A \otimes \mathbb{I} \rangle_{\varrho} \end{aligned} \quad (3.42)$$

mivel a különböző részrendszereken ható operátorok felcserélhetőek. Vagyis azt látjuk, hogy a második részrendszeren végzett mérés változatlanul hagyja az első részrendszer dinamikai változóinak várható értékét.

Mivel a mérés megváltoztatja az állapotot, ezért általánosan nem várhatjuk el, hogy két dinamikai változó mért értéke független legyen méréseik sorrendjétől. A mérés fenti matematikai megfogalmazása ezt is magában hordozza: egyazon Hilbert-téren ható két operátorra vonatkozó mérés akkor lesz független a sorrendtől, ha spektrális projekcióik felcserélhetőek. Különböző Hilbert-tereken ható operátorok nyilván felcserélhetőek, így az általuk reprezentált dinamikai változók mérése független lesz a sorrendtől.

3.2.5. Időfejlődés

Az előző pontban láthattuk, hogy a mérés megzavarja a rendszert. A következő axióma arról szól, hogy mi történik akkor, ha nem végzünk mérést, hanem szabadon hagyjuk fejlődni a rendszert: *Egy magára hagyott rendszer időfejlődését unitér propagátor írja le:*

$$\varrho(t) = U(t, t_0) \varrho(t_0) U^\dagger(t, t_0), \quad (3.43)$$

ahol $U(t, t_0)$ unitér operátorok a változóknak erősen folytonos függvényei, valamint fennáll: $U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) = U(t_2, t_0)$. Az unitér transzformáció definíciójából adódóan invariánsan

hagyja a Hilbert-tér belsőszorzatát, így az időfejlődés során nem változnak az átmeneti valószínűségek, valamint a tiszta állapotú rendszer tiszta állapotban marad.

A konzervatív rendszer fogalmát szemléletesen az időfejlődésen keresztül vezetjük be: (Energjáról eddig még egyáltalán nem beszéltünk.) Konzervatív rendszer propagátora eltolásinvariáns az időben, vagyis

$$U(t + \tau, t_0 + \tau) = U(t, t_0). \quad (3.44)$$

Ekkor $U(t) := U(t + \tau, \tau)$ folytonos egyparaméteres unitér csoportot alkot, így a Stone-tétel értelmében létezik önadjungált generátora. Azt már újabb posztulátum keretében fogalmazzuk meg, hogy ez a generátor éppen az energiát reprezentáló Hamilton operátor -1 -szerese: *Egy H időfüggetlen Hamilton-operátorral jellemzett rendszer unitér propagátora*

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t}. \quad (3.45)$$

Számítsuk ki egy konzervatív rendszer sűrűségoperátorának időderiváltját:

$$\begin{aligned} d_t \varrho(t) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\varrho(t + \varepsilon) - \varrho(t)}{\varepsilon} \right) \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(U(\varepsilon) \varrho(t) \frac{U^\dagger(\varepsilon)}{\varepsilon} - \frac{\varrho(t)}{\varepsilon} \right) \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(U(\varepsilon) \varrho(t) \frac{U(-\varepsilon)}{\varepsilon} - U(\varepsilon) \varrho(t) \frac{\mathbb{I}}{\varepsilon} + U(\varepsilon) \varrho(t) \frac{\mathbb{I}}{\varepsilon} - \frac{\varrho(t)}{\varepsilon} \right) \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(U(\varepsilon) \varrho(t) \frac{U(-\varepsilon) - \mathbb{I}}{\varepsilon} + \frac{U(\varepsilon) - \mathbb{I}}{\varepsilon} \varrho(t) \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} (\varrho(t) H - H \varrho(t)) \end{aligned} \quad (3.46)$$

Tiszta állapotra is hasonlóan kiszámítható az időderivált. Végül tehát a

$$i\hbar \frac{d}{dt} \varrho(t) = [H, \varrho(t)], \quad (3.47)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t) = H \psi(t). \quad (3.48)$$

Schrödinger egyenleteket kapjuk.

Egy dinamikai változó várhatóértéke egy adott $\varrho(t)$ -vel jellemzett állapotban ekkor:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_{\varrho(t)} &= \text{Tr} A \varrho(t) = \text{Tr} \left(A e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} \varrho(t_0) e^{\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} \right) \\ &= \text{Tr} \left(e^{\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} A e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} \varrho(t_0) \right) \\ &= \text{Tr} A_H(t) \varrho_0 = \langle A_H(t) \rangle_{\varrho} \end{aligned} \quad (3.49)$$

ahol a trace ciklikussága miatt két ekvivalens „kvantummechanikai képben” fogalmazhatjuk meg az időbeliség tárgyalását: Schrödinger-képben az időben állandó A -operátor várhatóértékét számítjuk ki egy időben változó állapotban, Heisenberg-képben pedig egy időfüggetlen állapotban vesszük az

$$A_H(t) = \text{Tr} \left(e^{\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} A e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} \right) \quad (3.50)$$

egyenlet által definiált időfüggő operátor várhatóértékét.

Amennyiben a rendszert leíró Hamiltoni időfüggő, akkor az unitér propagátorok nem alkotnak folytonos csoportot, a rendszer nem konzervatív. Noha ekkor a fenti (3.47) egyenletekhez vezető számítás nem vihető végig, újabb axiómában fektetjük le, hogy *időfüggetlen Hamiltonival leírt rendszer sűrűségoperátorának, illetve állapotának időfejlődését is a Schrödinger egyenletek adják:*

$$i\hbar \frac{d}{dt} \varrho(t) = [H(t), \varrho(t)], \quad (3.51)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t) = H(t)\psi(t). \quad (3.52)$$

A tárgyalt unitér időfejlődést Roger Penrose nyomán U-evolúciónak nevezzük. Megjegyezzük, hogy az időfejlődés interpretálására van egy másik, kevésbé ismert mód is: egy rendszer állapotát egymás utáni – „infinitezimálisan közeli”, – megfelelően beállított mérésekkel is fejleszthetjük az időben. Ezt az időfejlődést R-evolúciónak nevezzük, amivel a redukció szóra utalunk.

4. fejezet

Kvantumszámítógépek

Ebben a fejezetben röviden beszélünk a kvantumszámítógépekről. A kvantumszámítógép egy olyan kvantumrendszer, melynek bizonyos részrendszereinek állapotán információt tárolhatunk, melyeket a rendszerben lévő kölcsönhatásokkal az időfejlődés során manipulálhatunk. Talán ez a legszebb alkalmazási területe a kvantumelméleti kutatásoknak. A kísérleti technika fejlődésével az elemi kvantum-műveleteken túl egyre összetettebb kvantumalgoritmusokat végrehajtó kvantumszámítógépek valósíthatóak meg.

A témával foglalkozó összefoglaló mű: [8].

4.1. Az információ tárolása

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. A klasszikus számítógép belsőjében 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 sorolhatnánk. Először is felmerülhet a kérdés: nem lehetne-e sokkal több információt tárolni a fenti módoknál? Vegyük például a memóriacellát: a mai technikai feltételek mellett a miniatürizálás magas fokot ért el, de még így is sok-tízezer elektron van abban a cellában, amelyen csak egy bitnyi – nagyon kevés – információt akarunk raktározni. Ez elég pazarló megoldásnak tűnik, viszont így nagyon könnyen kezelhető az információ, mert a kvantumjelenségek hatásai kiátlagolódnak. Elvileg akár egyetlen elektron ottléte, vagy ott-nem-léte is megadná az egy bit információt, azonban ilyen kis mennyiségnél már nem lehet elhanyagolni a kvantumjelenségeket. Egy elektron jelenléte egy helyen ugyanis a kvantummechanika törvényei szerint csak bizonyos valószínűséggel adható meg. Tehát ha ebben az egy elektront befogadni képes memóriacellában bekapcsolunk egy potenciált, amivel odavonzhatunk egy elektront, akkor az elektron ottlétének valószínűségét úgy kaphatjuk, hogy – az adott potenciált tartalmazó – Schrödinger-egyenlet megoldásaként kapott állapotfüggvény abszolútérték-négyzetét integráljuk a memóriacella térfogatára. Az állapotfüggvény egy megfelelő potenciál esetén

legalább exponenciálisan tűnik el a végtelenben, de ennél erősebb levágás is lehetséges. Viszont ekkor sem csökken egzaktul nullára, így akármilyen erős a potenciál, soha nem lesz az elektron megtalálási valószínűsége a cellában 1. Így tehát nem egy klasszikus bitnyi információ tárolódik, csupán annak törtrésze, ami a klasszikus információelmélettel nem kezelhető. További probléma, hogy 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. Ez méginkább lehetetlenné teszi egy klasszikus bit reprezentálását egy kvantumrendszeren. Ehhez járul még a mérés problémája: az információ kinyerésére csak egy mérést végezhetünk, mivel ez beavatkozást jelent a rendszerbe, és így elveszik az állapot.

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

4.2. A q-bit

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

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C} \quad (4.1)$$

A $|0\rangle$ és $|1\rangle$ állapotokat információs, vagy számítási bázisnak nevezik. Ezt sokféle fizikai rendszeren ábrázolhatjuk, legegyszerűbb példa egy feles spinű részecske, pl. elektron spinsajátállapotai. Egy ilyen (4.1) 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 információátvitel szempontjából.

Egy kvantumrendszer információtartalma tehát nagyon nagy. Viszont amikor 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 információ mennyiség kiolvasása nehézségekbe ütközik, ugyanis ismételt mérésre van csupán lehetőség, és ebből nem lehet valószínűséget megállapítani. Tehát noha az információátvitelhez elegendő egy elektron, de a kiolvasáshoz nagyon sok azonos állapotú elektron kell mérést végezni. Minél többön, annál nagyobb pontossággal ismerhető meg $|\alpha|^2$ értéke. A kvantummechanika valószínűségi jellege nem kerülhető meg, 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 a kezdetétől sok elektronon kell párhuzamosan végezni, hogy a rajtuk való mérés végül a megfelelő kimenetet adja. Ezeknek azonos kezdeti állapotokban kell lenni, ami még a számítási folyamat előtt beállítható. Ezt az eljárást preparációnak nevezik. A kvantumalgoritmusok feladata, hogy a számításokat olyan

formában végezzék el, hogy a kimeneten jól mérhető legyen a fontos információhoz tartozó állapot, vagyis a megfelelő valószínűségi amplitúdó elegendően nagy legyen a többihez képest.

A fentiek fényében tehát látható, hogy mind a klasszikus, mind a kvantuminformáció kezeléséhez sok részecskére van szükség. A kvantumszámítás azonban kínál egy új lehetőséget, amely a klasszikus számítógép számára annak nagy mérete miatt elérhetetlen. Ez az összefonódott állapotok felhasználása az információ manipulálására. Két állapotvektor – két qubit – összefonódott állapotba hozható egyszerű kvantumszámítási műveletekkel. Fogalmi szempontból fontos, hogy nem a részecskék fonódnak össze – a valós térben, – hanem az állapotaik – az állapottérben. 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 gondolatkísérlet.) Ez a fénysebességnél gyorsabb korrelációterjedés, mely klasszikusan elképzelhetetlen, a kvantummechanika „nemlokalitásának” következménye: a részecskék végtelenül kiterjedtek a térben. Az összefonódottság jelensége lehetővé teszi például a kvantumállapot teleportálását, – a kauzalitás megsértése nélkül, – illetve azt is, hogy egy több-qubites 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.

4.3. Kvantum-kapuk

A kvantumszámítási algoritmusok építőkövei a kvantumkapuk, amiket a (4.1) qubiteken ható unitér operátorokkal írhatunk le. Lássunk két példát:

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

$$|0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle), \quad (4.2)$$

$$|1\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle), \quad (4.3)$$

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Fázistoló kapu: adott γ -szögű fázistolást valósít meg az egyik bázisállapoton:

$$|0\rangle \rightarrow |0\rangle, \quad (4.5)$$

$$|1\rangle \rightarrow e^{i\gamma}|1\rangle, \quad (4.6)$$

$$\Gamma(\gamma) = \begin{pmatrix} 1 & \cdot \\ \cdot & e^{i\gamma} \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

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

N-qubitre alkalmazva külön-külön az egyqubites műveleteket a kiindulási $|00\dots 0\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \dots \otimes |0\rangle$ állapot tetszőleges $|\psi_1\psi_2\dots\psi_N\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle$ állapotba vihető, ahol az egyes $|\psi_i\rangle$ állapotok $|0\rangle$ és $|1\rangle$ tetszőleges normált lineárkombinációját jelentik. Egyqubites kapukkal szeparálható állapotok csak szeparálható állapotokba vihetők, ami csak egy korlátozott halmaza a teljes N-qubit Hilbert-tér állapotainak. Vagyis ekkor csak

egymástól függetlenül kezelhetők a qubitek, nem nyílik lehetőség a kvantum-összefonódás felhasználására.

Kell tehát egy transzformáció, amely összefonódott állapotba visz két qubitet. (Ezeket az állapotokat nem lehet egyqubit-állapotok tenzotszorzatára szeparálni.) Az ezt megvalósító egyik kapu például a *kontrollált fázistolókapu*: Az első qubit függvényében végez el egy egyqubites fázistolást a második qubiten.

$$|00\rangle \rightarrow |00\rangle, \quad (4.8)$$

$$|01\rangle \rightarrow |01\rangle, \quad (4.9)$$

$$|10\rangle \rightarrow |10\rangle, \quad (4.10)$$

$$|11\rangle \rightarrow e^{i\gamma}|11\rangle, \quad (4.11)$$

$$B(\gamma) = \begin{pmatrix} 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & e^{i\gamma} \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

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

4.4. Holonomikus kvantumszámítógép

A kvantumszámítógép jól kidolgozott elméleti konstrukció, az alapl műveletekből összetett algoritmusok építhetők. A gyakorlati megvalósítás előtti legfőbb akadály, hogy a műveletek számának növelésével a rendszer koherenciájának fenntartása a környezet hatásaival szemben egyre nehezebb. Így a műveletek számával a számítás hibája megnő. Ennek kiküszöbölésére sokféle módszer született, legkézenfekvőbb volt a redundáns információátvitelen alapuló klasszikus hibakorrektív módszerek átültetése a kvantumszámítógépre. A geometriai hatásokon alapuló kvantumszámítás nagy előnye, hogy magából a konstrukcióból adódóan rendkívül hibatűrő.

A holonomikus kvantumszámítás témájában áttekintő művek: [9], [10].

Ahhoz, hogy a holonómiákat felhasználhassuk kvantumszámításra, a következő fejezetekben megvizsgáljuk, hogy milyen holonómiák lépnek fel kvantumrendszereknél. Az **5.** fejezetben tekintjük a tiszta állapotok holonómiáit, valamint egy konkrét rendszeren végzett számítással egy-qubit kaput valósítunk meg. Ezt követően a **6.** fejezetben bemutatjuk az összefonódott állapotoknál felmerülő holonómiákat.

5. fejezet

Tiszta állapotok holonómiája

Nézzük meg, milyen holonómiák jelennek meg kvantumrendszerek leírásánál. A **3.** fejezetben tárgyaltuk, hogy egy kvantumrendszer állapotát a Hilbert-tér sugarai reprezentálják. Ez a megállapítás máris megad egy természetes projekciót a Hilbert-térből a Hilbert-tér sugarainak terébe. A Hilbert-téren, mint nyalábon megjelenő holonómia az úgynevezett Pancharatnam holonómia. Mielőtt ezt megvizsgálánk, vegyük szemügyre a Berry-féle fázist, mely az első lépés volt a kvantumrendszerek holonómiáinak vizsgálatában.

5.1. Berry-fázis

5.1.1. Adiabaticus közelítés

Tekintsünk egy olyan rendszert, melynek Hamilton operátora időfüggő, de az időfüggés nagyon lassú. A „nagyon lassú” adiabaticus 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 adiabaticus közelítés másik érdekes alkalmazási területe a kvantummechanikai soktest-probléma, ahol a potenciál, melyben az elektronok mozognak, változik az atommagok mozgásával, melyet azonban – a konkrét problémától függően – adiabaticusnak tekinthetünk a jóval gyorsabb elektronok mozgásához viszonyítva.

A probléma általánosításaként jelölje $\mathbf{X} = \mathbf{X}(t)$ a Hamiltoni folytonosan és időben adiabaticusan változó paramétereit! A lehetséges paramétereket az \mathcal{N} paraméterter tartalmazza, mely legyen differenciálható sokaság. A környezet változása egy folytonos görbét definiál \mathcal{N} -ben. Ekkor a Hamiltoni

$$H = H(\mathbf{X}(t)) \quad (5.1)$$

a rendszer állapotainak \mathcal{H} Hilbert-terén ható operátor. \mathcal{H} vektorainak – jelölje őket a görbe mentén $|\psi(\mathbf{X}(t))\rangle \equiv |\psi(t)\rangle$ – 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:

$$\langle \phi(t) | \psi(t) \rangle = \int d\mathbf{r} \overline{\phi(\mathbf{r}, \mathbf{X}(t))} \psi(\mathbf{r}, \mathbf{X}(t)) \quad (5.2)$$

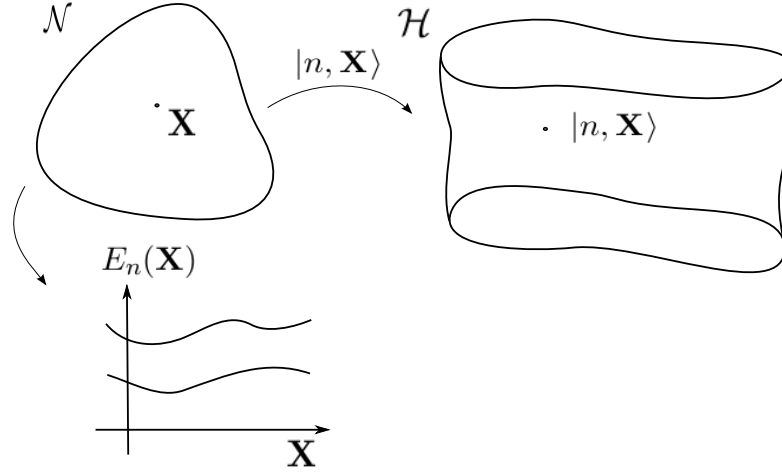
A rendszer időfejlődését az időfüggő Schrödinger-egyenlettel írjuk le:

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (5.3)$$

A rendszer energiasajátállapotait a Hamilton operátor sajátértékegyenlete adja. Legyen most a spektrum diszkrét, a sajátállapotok pedig alkossanak teljes ortonormált rendszert! A különböző paraméterekre nyilván más és más energianívókat és sajátállapotokat kapunk:

$$H(\mathbf{X}(t))|n, \mathbf{X}(t)\rangle = E_n(\mathbf{X}(t))|n, \mathbf{X}(t)\rangle \quad (5.4)$$

Itt azt követeljük meg, hogy a nívók és a sajátállapotok sima és egyértékű függvényei legyenek \mathbf{X} -nek. (5.1 ábra) Ekkor $\mathbf{X}(t)$ folytonos változása mellett a sajátalterek folytonosan elfordulnak \mathcal{H} -ban.



5.1. ábra. A paramétertér, a Hilbert-tér és az energianívók.

Lássuk, miért lesz hasznos az adiabatikus közelítés! A holonómiák bevezetéséhez 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. Ezután a rendszer 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:

$$\hbar \left| \frac{\langle n, \mathbf{X}(t) | \partial_t H(\mathbf{X}(t)) | n+1, \mathbf{X}(t) \rangle}{E_n(\mathbf{X}(t)) - E_{n+1}(\mathbf{X}(t))} \right| \ll E_n(\mathbf{X}(t)) - E_{n+1}(\mathbf{X}(t)). \quad (5.5)$$

Tulajdonképpen e feltétel fejezi ki a közelítés adiabatikus voltát.

Az imént bevezetett rendszer tehát egy közelítésen alapszik. Ezen a rendszeren be fogunk vezetni holonómiát. Kicsit később megmutatjuk, hogy ez a közelítés hol „sántít”, valamint az Aharonov-Anandan fázisnál meg fogjuk látni, hogy a probléma közelítés nélkül is tárgyalható, ehhez csupán kissé más holonómiára lesz szükség.

5.1.2. Következmények Abeli esetben

Amennyiben a fenti feltételek teljesülnek, és a rendszernek az a sajátaltere, melyből az időfejlődést indítjuk, nem degenerált, akkor a rendszer állapota, mialatt (5.3) fejleszti az

időben, megmarad a kiindulási sajátállapotnak megfelelő, az időfejlődés alatt elforduló egydimenziós altérben a kvantum-adiabatikus tétel szerint. Ekkor az állapotvektor csak egy egységnyi abszolútértékű komplex faktorban térhet el attól, ahogyan a sajátállapot változik az időben. Tehát bármely időpontban előállítható a következőképpen:

$$|\psi(t)\rangle = a^{(n)}(t)b^{(n)}(t)|n, \mathbf{X}(t)\rangle \quad (5.6)$$

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

$$|\psi(0)\rangle = |n, \mathbf{X}(0)\rangle \quad (5.7)$$

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

$$a^{(n)}(t) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \int_0^t E_n(\tau) d\tau\right), \quad (5.8)$$

ennek leválasztására a további számítások alapján látható praktikus indokunk van. $b^{(n)}(t)$ kiszámításához írjuk be (5.6)-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.)

$$\begin{aligned} i\hbar d_t(ab|n\rangle) &= Hab|n\rangle, \\ i\hbar(\dot{a}b|n\rangle + a\dot{b}|n\rangle + abd_t|n\rangle) &= abE_n|n\rangle, \\ i\hbar\left(\frac{-i}{\hbar}E_nb|n\rangle + \dot{b}|n\rangle + bd_t|n\rangle\right) &= bE_n|n\rangle \end{aligned}$$

Szorozzuk be ezt a kiindulási állapot konjugáltjának megfelelő $\langle n|$ bra-vektorral balról! Ekkor:

$$-\langle n|d_t|n\rangle = \frac{\dot{b}}{b} = d_t \log b. \quad (5.9)$$

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

$$b^{(n)}(t) = \exp\left(-\int_0^t \langle n, \mathbf{X}(\tau)|\frac{d}{d\tau}|n, \mathbf{X}(\tau)\rangle d\tau\right). \quad (5.10)$$

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 $(d_t\langle n|)|n\rangle = \overline{\langle n|d_t|n\rangle}$ miatt $\langle n|d_t|n\rangle = -\langle n|d_t|n\rangle$, tehát $\langle n|d_t|n\rangle$ 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

$$\frac{d}{dt}|n, \mathbf{X}(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial X^\mu}|n, \mathbf{X}(t)\rangle \frac{dX^\mu}{dt}. \quad (5.11)$$

(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{N} -ben. Ekkor az időfejlődés alatt a vizsgált sajátaltér is visszatér eredeti helyére,

mivel a sajátállapot egyértékű függvénye kell legyen \mathbf{X} -nek, vagyis $|n, \mathbf{X}(T)\rangle = |n, \mathbf{X}(0)\rangle$, és csak a fázisfaktort kell foglalkoznunk. Ez a fázisfaktor lesz a holonómia-transzformáció, a holonómia-csoport pedig $U(1)$. Mivel $U(1)$ csoport elemei kommutálnak egymással, Abel-csoportot alkotnak, innen jön ennek az esetnek az elnevezése. Az Abel-csoport tehát a nemdegenerált kiindulási nívó következménye.

Ekkor:

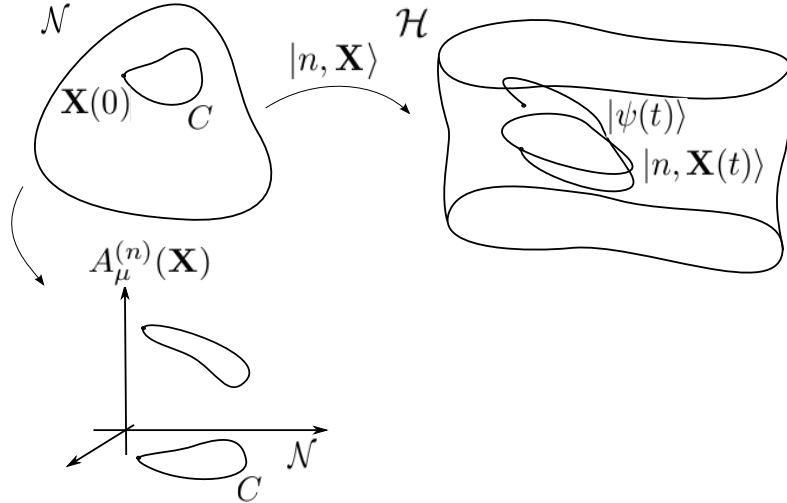
$$b_C^{(n)} = \exp\left(-\oint_C \langle n, \mathbf{X} | \frac{\partial}{\partial X^\mu} |n, \mathbf{X}\rangle dX^\mu\right). \quad (5.12)$$

E fázisfaktor neve: Berry-féle fázis. Az exponensben szereplő integrál nagysága csupán C görbe alakjától függ, a változás sebességétől nem, – a kvantum-adiabatikus tétel megengedte korlátok közt, – tehát tisztán *geometriai* jelentéssel bír.

Bevezethetjük ekkor a

$$A_\mu^{(n)}(\mathbf{X}) := i\langle n, \mathbf{X} | \partial_\mu |n, \mathbf{X}\rangle \quad (5.13)$$

\mathcal{N} -en értelmezett $\dim\mathcal{N}$ komponensű kovariáns vektormezőt, melyet Berry-féle vektorpotenciálnak nevezünk. (5.2 ábra) Ennek görbementi integrálja megadja a keresett fázist.



5.2. ábra. A paramétertéren értelmezett vektorpotenciál egy komponensének sematikus ábrázolása.

Meg fogjuk mutatni, hogy a (5.13) vektorpotenciál integrálja mértékinvariáns. A mértéktranszformációt az alapján kapjuk, hogy a sajátfüggvények csak fázisfaktor erejéig meghatározottak, így (5.13) csak egy skalárfüggvény gradiense erejéig lesz meghatározott. Valóban:

$$|n, \mathbf{X}'\rangle = |n, \mathbf{X}\rangle e^{i\alpha(\mathbf{X})}, \quad (5.14)$$

$$A_\mu'^{(n)} = ie^{-i\alpha(\mathbf{X})} \langle n, \mathbf{X} | \partial_\mu (|n, \mathbf{X}\rangle e^{i\alpha(\mathbf{X})}) = A_\mu^{(n)} - \partial_\mu \alpha(\mathbf{X}), \quad (5.15)$$

ahol kihasználtuk a (5.14) $U(1)$ mértéktranszformáció Abeli voltát, vagyis, hogy a fázisfaktortal való szorzás a vektorpotenciállal felcserélhető.

A paramétertér az adott problémától függően lehet görbült, magas dimenziós. A további számításokhoz ezért differenciálformákat fogunk használni, melyekkel a vonal és felületi integrál általánosítható ilyen esetekre. (Ennek megalapozását lásd [7]-ben.)

Vezessük be (5.13)-mal a

$$A^{(n)} := A_\mu^{(n)}(\mathbf{X}) dX^\mu \quad (5.16)$$

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

$$\begin{aligned} F^{(n)} &:= dA^{(n)} = \partial_\nu A_\mu^{(n)} dX^\nu \wedge dX^\mu \\ &= \frac{1}{2}(\partial_\mu A_\nu^{(n)} - \partial_\nu A_\mu^{(n)})dX^\mu \wedge dX^\nu \end{aligned} \quad (5.17)$$

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

$$F_{\mu\nu}^{(n)} = \partial_\mu A_\nu^{(n)} - \partial_\nu A_\mu^{(n)} \quad (5.18)$$

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

Ekkor a fázist, amelyet tetszőleges topologikus sokaságon 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:

$$b_C^{(n)} = \exp\left(i \oint_{\partial S \equiv C} A^{(n)}\right) = \exp\left(i \int_S dA^{(n)}\right) = \exp\left(i \int_S F^{(n)}\right) \quad (5.19)$$

Természetesen az integrál így, formákkal számolva is mértékinvariáns lesz, azonban formákkal számolva látszik az is, hogy ez általánosságban a (5.17) görbületi két-forma invarianciájából adódik:

$$A'^{(n)} = A^{(n)} - d\alpha(\mathbf{X}) \quad (5.20)$$

$$F'^{(n)} = dA'^{(n)} = dA^{(n)} - dd\alpha(\mathbf{X}) = F^{(n)} \quad (5.21)$$

mivel a kétszeres külső deriválás nullát ad.

5.1.3. Következmények nem-Abeli esetben

Foglalkozzunk most olyan esettel, melynél 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:

$$H(\mathbf{X}(t))|n, j, \mathbf{X}(t)\rangle = E_n(\mathbf{X}(t))|n, j, \mathbf{X}(t)\rangle, \quad j = 1, \dots, M. \quad (5.22)$$

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 állapotvektor elfordulhat e sajátaltérben. Tehát helyzetünk összetettebb, mint Abeli esetben. Ezt a hatást egy $M \times M$ -es időfüggő unitér transzformációval írhatjuk le: $\mathcal{U}(t) \in U(M)$. $U(M)$ nem Abel-csoport ha $M > 1$, ekkor elemei nem kommutálnak egymással. A paraméterter egy zárt görbéjén körbehaladva a holonómia így $U(M)$ lesz. Ezért nevezzük ezt az elfajult-alterű időfejlődést nem-Abelinek.

Induljunk ki az n . nívón lévő j . sajátállapotból:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= a^{(n)}(t)|n, j, \mathbf{X}(t)\rangle \mathcal{U}^{(n)}(t) \\ &= a^{(n)}(t) \sum_k |n, k, \mathbf{X}(t)\rangle \mathcal{U}_{kj}^{(n)}(t), \end{aligned} \quad (5.23)$$

ahol

$$|\psi(0)\rangle = |n, j, \mathbf{X}(0)\rangle. \quad (5.24)$$

Itt ismét egyszerűsíti a számítást, hogy (5.23)-ban a szokásos (5.8) dinamikai fázisfaktort leválasztjuk.

$\mathcal{U}(t)$ kiszámítása az Abeli esethez hasonlóan történik, írjuk be (5.23)-at a Schrödinger-egyenletbe: (A jobb olvashatóság kedvéért ismét elhagyjuk az időfüggés jelölését, valamint egy tagban lévő azonos indexekre jelölés nélkül összegzünk.)

$$\begin{aligned} i\hbar d_t(a|n, k\rangle\mathcal{U}_{kj}) &= Ha|n, k\rangle\mathcal{U}_{kj}, \\ i\hbar(\dot{a}|n, k\rangle\mathcal{U}_{kj} + ad_t|n, k\rangle\mathcal{U}_{kj} + a|n, k\rangle\dot{\mathcal{U}}_{kj}) &= aH|n, k\rangle\mathcal{U}_{kj}, \\ i\hbar\left(\frac{-i}{\hbar}E_n|n, k\rangle\mathcal{U}_{kj} + |n, k\rangle\dot{\mathcal{U}}_{kj} + d_t|n, k\rangle\mathcal{U}_{kj}\right) &= E_n|n, k\rangle\mathcal{U}_{kj}. \end{aligned}$$

Szorozzuk be ezt, egy ugyanabban az altérben lévő tetszőleges másik $\langle n, l \neq j|$ sajátvektorral balról!

$$\dot{\mathcal{U}}_{lj}^{(n)} = i\mathcal{A}_{lk}\mathcal{U}_{kj}^{(n)}, \quad (5.25)$$

ahol

$$\mathcal{A}_{lk}^{(n)} = i\langle n, l, \mathbf{X}(t)|\frac{d}{dt}|n, k, \mathbf{X}(t)\rangle. \quad (5.26)$$

Tehát

$$\dot{\mathcal{U}}^{(n)}(t) = i\mathcal{A}^{(n)}(t)\mathcal{U}^{(n)}(t), \quad \mathcal{U}^{(n)}(0) = I \quad (5.27)$$

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

$$[\mathcal{A}^{(n)}(t_1), \mathcal{A}^{(n)}(t_2)] \neq 0, \quad t_1 \neq t_2. \quad (5.28)$$

Integráljuk (5.27)-et!

$$\mathcal{U}^{(n)}(t) = I + i \int_0^t \mathcal{A}^{(n)}(t_1)\mathcal{U}^{(n)}(t_1)dt_1. \quad (5.29)$$

Ekkor (5.29) jobb oldalába önmagát szukszcesszíven behelyettesíthetjük, így csak $\mathcal{A}^{(n)}$ -től függő mennyiséget kapunk:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}^{(n)}(t) &= I + i \int_0^t dt_1 \mathcal{A}^{(n)}(t_1) + i^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \mathcal{A}^{(n)}(t_1)\mathcal{A}^{(n)}(t_2) + \dots \\ &+ i^p \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{p-1}} dt_p \mathcal{A}^{(n)}(t_1)\mathcal{A}^{(n)}(t_2) \dots \mathcal{A}^{(n)}(t_p) + \dots \end{aligned} \quad (5.30)$$

Ezekben az integrandusokban az operátorok időargumentuma balról jobbra csökken: $t \geq t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq t_p \geq 0$. A \mathcal{T} időrendező szorzás bevezetésével (5.30) rövidebb alakba írható:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}^{(n)}(t) &= \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p!} i^p \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_p} dt_p \mathcal{T}(\mathcal{A}^{(n)}(t_1) \dots \mathcal{A}^{(n)}(t_p)) \\ &= \mathcal{T} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p!} i^p \left(i \int_0^t dt_1 \mathcal{A}^{(n)}(t_1) \right)^p. \end{aligned} \quad (5.31)$$

(Az integrálás 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:

$$\mathcal{U}^{(n)}(t) = \mathcal{T} \left(\exp \left(i \int_0^t \mathcal{A}^{(n)}(\tau) d\tau \right) \right) \quad (5.32)$$

mátrix lesz az (5.27) egyenlet általános megoldása. Ciklikus paramétermegváltozást feltételezve, valamint (5.11) miatt ekkor

$$\mathcal{U}_{lj}^{(n)}(C) = \mathcal{P} \left(\exp \left(i \oint_C \mathcal{A}_\mu^{(n)} d\mathbf{X}^\mu \right) \right)_{lj}, \quad (5.33)$$

lesz a geometriai hatást leíró transzformáció ahol

$$\mathcal{A}_{\mu lj}^{(n)}(\mathbf{X}) = i \langle n, l, \mathbf{X} | \partial_\mu | n, j, \mathbf{X} \rangle \quad (5.34)$$

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

Definiáljuk ezzel a

$$\mathcal{A}^{(n)} := \mathcal{A}_\mu^{(n)}(\mathbf{X}) dX^\mu \quad (5.35)$$

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 (5.35)-nek a felület körüli vonalintegráljával? Megmutatható, hogy a (5.17) 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:

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &:= d\mathcal{A} - i\mathcal{A} \wedge \mathcal{A} \\ &= (\partial_\mu \mathcal{A}_\nu - i\mathcal{A}_\mu \mathcal{A}_\nu) dX^\mu \wedge dX^\nu \\ &= \frac{1}{2} (\partial_\mu \mathcal{A}_\nu - \partial_\nu \mathcal{A}_\mu - i[\mathcal{A}_\mu, \mathcal{A}_\nu]) dX^\mu \wedge dX^\nu \end{aligned} \quad (5.36)$$

az antiszimmetrikus részt véve, ahol

$$\mathcal{F}_{\mu\nu}^{(n)} = \partial_\mu \mathcal{A}_\nu^{(n)} - \partial_\nu \mathcal{A}_\mu^{(n)} - i[\mathcal{A}_\mu^{(n)}, \mathcal{A}_\nu^{(n)}] \quad (5.37)$$

a kétszer kovariáns, mátrix értékű görbületi tenzor. (A helyfüggést és a mátrixindexeket a könnyebb olvashatóság kedvéért nem jelöljük.) Láthatjuk, hogy Abeli esetben visszkapjuk (5.17) és (5.18) alakját.

Ekkor a Stokes-tétel a (5.36)-ben látható módon definiált nem-Abeli egy- és két-formák vonal illetve felületi integrálja között teremt kapcsolatot:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}^{(n)}(C) &= \mathcal{P} \exp \left(i \oint_{\partial S \equiv C} \mathcal{A}^{(n)} \right) \\ &= \mathcal{P} \exp \left(i \int_S d\mathcal{A}^{(n)} - i\mathcal{A}^{(n)} \wedge \mathcal{A}^{(n)} \right) \\ &= \mathcal{P} \exp \left(i \int_S \mathcal{F}^{(n)} \right). \end{aligned} \quad (5.38)$$

Nézzük még meg e nem-Abeli esetben a Berry-féle egy-forma (5.35) és két-forma (5.36) mértéktranszformációját! Itt a Hamiltoni sajátfüggvényei az adott n . 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

$$|n, k, \mathbf{X}(t)\rangle' = |n, i, \mathbf{X}(t)\rangle \mathcal{V}_{ik}^{(n)}(t), \quad (5.39)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{A}'_{\mu kl}{}^{(n)} &= i \mathcal{V}_{ki}^{(n)\dagger} \langle n, i, \mathbf{X} | \partial_\mu \left(|n, j, \mathbf{X}\rangle \mathcal{V}_{jl}^{(n)} \right) \\ &= \mathcal{V}_{ki}^{(n)\dagger} \mathcal{A}_{\mu ij}^{(n)} \mathcal{V}_{jl}^{(n)} + i \mathcal{V}_{ki}^{(n)\dagger} \partial_\mu \mathcal{V}_{il}^{(n)}, \end{aligned} \quad (5.40)$$

$$\mathcal{A}'_\mu{}^{(n)} = \mathcal{V}^{(n)\dagger} \mathcal{A}_\mu^{(n)} \mathcal{V}^{(n)} + i \mathcal{V}^{(n)\dagger} \partial_\mu \mathcal{V}^{(n)} \quad (5.41)$$

a nem-Abeli vektorpotenciál mátrixaira. Így kapjuk az (5.35) egy-formára:

$$\mathcal{A}'^{(n)} = \mathcal{V}^{(n)\dagger} \mathcal{A}^{(n)} \mathcal{V}^{(n)} + i \mathcal{V}^{(n)\dagger} d\mathcal{V}^{(n)} \quad (5.42)$$

Tehát egy ilyen egy-forma mértéktranszformációja egészen szokatlan formát ölt. Viszont az integrálok egyenlőségének megteremtése miatt (5.36) módjára definiált két-forma egyszerűen kovariánsan transzformálódik:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}'^{(n)} &= d\mathcal{A}'^{(n)} - i \mathcal{A}'^{(n)} \wedge \mathcal{A}'^{(n)} = \dots \\ &= \mathcal{V}^{(n)\dagger} \left(d\mathcal{A}^{(n)} - i \mathcal{A}^{(n)} \wedge \mathcal{A}^{(n)} \right) \mathcal{V}^{(n)} \\ &= \mathcal{V}^{(n)\dagger} \mathcal{F}^{(n)} \mathcal{V}^{(n)} \end{aligned} \quad (5.43)$$

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

$$\begin{aligned} \mathcal{U}'^{(n)} &= \mathcal{P} \exp \left(i \int_S \mathcal{F}'^{(n)} \right) \\ &= \mathcal{P} \exp \left(i \int_S \mathcal{V}^{(n)\dagger} \mathcal{F}^{(n)} \mathcal{V}^{(n)} \right) \\ &= \mathcal{P} \exp \left(\mathcal{V}^{(n)\dagger} \left(i \int_S \mathcal{F}^{(n)} \right) \mathcal{V}^{(n)} \right) \\ &= \mathcal{V}^{(n)\dagger} \mathcal{U}^{(n)} \mathcal{V}^{(n)} \end{aligned} \quad (5.44)$$

(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{N} -ben lévő görbe mentén!)

5.2. Nem-Abeli Berry-fázis alkalmazása: 1-qubit kapu

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-degenerancia lép fel: a nívók kétszeresen elfajultak lesznek, ilyen altér épen alkalmas lesz egy qubit befogadására, vagyis a rendszer állapota egy ilyen nívón egy qubitet reprezentál.

(A hasonló jelenséget vizsgáló kísérleti cikkeket lásd például: [13], [14], [15].)

5.2.1. A Hamiltoni

Tekintsük a következő Hamiltonit, mely egy kvadrupól elektromos térbe helyezett spint ír le:

$$H = \mathbf{S}Q\mathbf{S} = \sum_{i,j=1}^3 Q_{ij}S_iS_j, \quad (5.45)$$

ahol \mathbf{S} a jól ismert spin-operátor, Q pedig a kvadratikus potenciált leíró 3×3 -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 tulajdonságai ekkor:

$$Q = Q^T, \quad (5.46)$$

$$\text{Tr}Q = 0, \quad (5.47)$$

$$\langle Q, Q \rangle \equiv \|Q\|^2 = 1, \quad (5.48)$$

ahol az utolsó normálási feltétel a kvadrupóltér erősségét jelenti, ahol a belső szorzat a 3×3 -as valós mátrixok terén: $\langle A, B \rangle = \frac{3}{2}\text{Tr}(A^T B)$. (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: $\mathcal{H} = \mathbb{C}^4$. Használjunk mátrix reprezentációt, a spin z -komponensének sajátápotainak bázisában, ekkor H 4×4 -es komplex elemű hermitikus és nullanyomú mátrix. (Ezt, és a további számításokat lásd részletesen [12]-ben.)

Következő lépésként alkalmazzunk egy U unitér bázistranszformációt:

$$H \longrightarrow U^\dagger H U, \quad U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathbb{I} & i\mathbb{I} \\ i\mathbb{I} & \mathbb{I} \end{pmatrix}, \quad U^\dagger = U^{-1}, \quad (5.49)$$

ahol \mathbb{I} a 2×2 -es egységmátrix. A transzformáció után a komplex elemű 4×4 -es Hamiltoni 2×2 -es blokkjaiban azonosíthatóak a σ_i a Pauli-mátrixok, így a Hamiltoni felírható 2×2 -es kvaternióelemű mátrixként, ahol a kvaternionikus egységeket 2×2 -es komplexelemű mátrixokkal reprezentáljuk a következőképpen: $1 = \mathbb{I}$, $\mathbf{i} = -i\sigma_1$, $\mathbf{j} = -i\sigma_2$, $\mathbf{k} = -i\sigma_3$. A kvaternióelemű mátrixokkal a további számítások könnyebbek és elegánsabbak lesznek.

Ez után az átalakítás után a Hamilton-operátor a következő alakot ölti:

$$H(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} X^4 & X^0 - \mathbf{i}X^1 - \mathbf{j}X^2 - \mathbf{k}X^3 \\ X^0 + \mathbf{i}X^1 + \mathbf{j}X^2 + \mathbf{k}X^3 & -X^4 \end{pmatrix} \quad (5.50)$$

ahol az átalakítás után leolvasott X^μ együtthatók a $Q_{ij} \in \mathbf{R}$ paraméterek valós lineárkombinációiból állnak

$$\begin{aligned} X^0 &= \frac{\sqrt{3}}{2}(Q_{11} - Q_{22}), & X^3 &= -\frac{3}{2}(Q_{11} + Q_{22}), \\ X^1 &= \sqrt{3}Q_{13}, & X^2 &= \sqrt{3}Q_{23}, & X^4 &= \sqrt{3}Q_{12}. \end{aligned} \quad (5.51)$$

Itt már kihasználtuk Q szimmetriáját és nyomnélküliségét. A Q -ra vonatkozó (5.48) normálási feltétel a X^μ együtthatókból képzett vektor normálási feltételébe megy át:

$$\begin{aligned} |\mathbf{X}|^2 &= 3(Q_{12}^2 + Q_{23}^2 + Q_{13}^2 + Q_{11}^2 + Q_{22}^2 + Q_{11}Q_{22}) \\ &= \frac{3}{2}\text{Tr}Q^2 = \langle Q, Q \rangle = 1. \end{aligned} \quad (5.52)$$

Tehát a (5.50) formájú Hamiltoni paramétere egy $\mathbf{X} = \mathbf{X}(t)$ ötkomponensű, időfüggő, normált vektor. Ezek S^4 -en helyezkednek el, mely az ötdimenzióba beágyazható négydimenziós egységömbfelület. Tehát $\mathcal{N} \equiv S^4$.

A (5.50) alak ekkor felírható az alábbi alakban: (alkalmazzuk az Einstein-konvenciót \mathcal{N} paraméterter vektorainál, az indexek 0-tól 4-ig futnak.)

$$H(\mathbf{X}) = X^\mu \Gamma_\mu = \begin{pmatrix} X^4 & \bar{q} \\ q & -X^4 \end{pmatrix}. \quad (5.53)$$

$$q = X^0 + \mathbf{i}X^1 + \mathbf{j}X^2 + \mathbf{k}X^3, \quad (5.54)$$

$$|q|^2 = 1 - (X^4)^2, \quad (5.55)$$

ahol a $q \in \mathbb{H}$ kvaternió abszolútértékére vonatkozó utóbbi egyenlet az (5.52) normafeltételből adódik. A megfelelő $\Gamma_\mu \in Sp(2)$ kvaternió-önadjungált nullanyomú mátrixok alakja:

$$\begin{aligned} \Gamma_0 &= \begin{pmatrix} \cdot & 1 \\ 1 & \cdot \end{pmatrix}, & \Gamma_4 &= \begin{pmatrix} 1 & \cdot \\ \cdot & -1 \end{pmatrix}, \\ \Gamma_1 &= \begin{pmatrix} \cdot & -\mathbf{i} \\ \mathbf{i} & \cdot \end{pmatrix}, & \Gamma_2 &= \begin{pmatrix} \cdot & -\mathbf{j} \\ \mathbf{j} & \cdot \end{pmatrix}, & \Gamma_3 &= \begin{pmatrix} \cdot & -\mathbf{k} \\ \mathbf{k} & \cdot \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.56)$$

melyek a Clifford-számok egy reprezentációját adják:

$$\{\Gamma_\mu, \Gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}I. \quad (5.57)$$

(A továbbiakban nem jelöljük külön, hogy \mathbb{I} a 2×2 -es vagy 4×4 -es, komplex vagy kvaternióelemű egységmátrix, amennyiben az a felírt egyenletből egyértelműen kiderül.)

5.2.2. A Hamiltoni vizsgálata

A rendszer állapotait tartalmazó Hilbert tér tehát $\mathcal{H} \equiv \mathbb{H}^2$. A paraméterek tere $\mathcal{N} \equiv S^4$. A Hamiltoni sajátértékei azonnal meghatározhatóak (5.57) miatt:

$$H(\mathbf{X})^2 = X^\mu \Gamma_\mu X^\nu \Gamma_\nu = \frac{1}{2} \{\Gamma_\mu, \Gamma_\nu\} X^\mu X^\nu = |\mathbf{X}|^2 \mathbb{I} = \mathbb{I}. \quad (5.58)$$

(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 altér lesz, (Kramers-degenerancia) ami az egy-qubités 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. Ennek tanulsága, hogy az E_+ és E_- energianívofelületek távolsága bármely $\mathbf{X} \in \mathcal{N}$ paraméterértékre azonos lesz, és a kvadrupóltér növelésével nő. Tehát elvileg akármilyen gyorsan változó paraméterek esetén, a kvadrupóltér megfelelő mértékű növelésével teljesíthető az (5.5) 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 sajátaltérbe, majd normálunk. Célunk, hogy a projekciókat H -felhasználásával állítsuk elő. Ezt könnyen megtehetjük, hiszen csak két altér van, és erre adódik két egyenlet: (spektrálfelbontás és teljesség)

$$\sum_n E_n P^{(n)} = H, \quad (5.59)$$

$$\sum_n P^{(n)} = \mathbb{I} \quad (5.60)$$

Tehát:

$$P^{(\pm)}(\mathbf{X}) = \frac{1}{2}(\mathbb{I} \pm H(\mathbf{X})) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \pm X^4 & \pm \bar{q} \\ \pm q & 1 \mp X^4 \end{pmatrix}. \quad (5.61)$$

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

A sajátvektorok képzéséhez vetítsük mindkét bázisvektort $P^{(\pm)}$ -projektorokkal a két sajátaltérbe:

$$|u(\mathbf{X}), \pm\rangle := N_u^{(\pm)} P^{(\pm)}(\mathbf{X}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm X^4)}} \begin{pmatrix} 1 \pm X^4 \\ \pm q \end{pmatrix}, \quad (5.62a)$$

$$|v(\mathbf{X}), \pm\rangle := N_v^{(\pm)} P^{(\pm)}(\mathbf{X}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2(1 \mp X^4)}} \begin{pmatrix} \pm \bar{q} \\ 1 \mp X^4 \end{pmatrix}, \quad (5.62b)$$

ahol a normálási tényezők a (5.55) 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.)

A vártak megfelelően tehát látszik, amint a Hamiltoni sajátaltérei \mathcal{H} -ban elfordulnak az $\mathbf{X}(t)$ paraméterek változásának megfelelően. Másrészt azt is látjuk, hogy a sajátvektorok (5.62) előállítása nem reguláris minden $\mathbf{X} \in \mathcal{N} \equiv S^4$ esetén. Valóban, $|u(\mathbf{X}), -\rangle$ és $|v(\mathbf{X}), +\rangle$ nem lesz 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.

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

$$|v(\mathbf{X}), \pm\rangle = |u(\mathbf{X}), \pm\rangle(\pm V(\mathbf{X})) \quad (5.63)$$

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

$$V(\mathbf{X}) = \frac{\bar{q}}{|q|} \quad (5.64)$$

(Kvaternió mértéktranszformáció, mellyel a kvaternióértékű vektorpotenciált transzformálhatjuk. Az egységnyi normájú kvaterniók csoportja izomorf $SU(2)$ -vel, melynek elemei 2×2 -es mértéktranszformáció mátrixok, melyekkel a 2×2 -es mátrix-érékű vektorpotenciálon végezhetnénk mértéktranszformációt.)

$$\begin{aligned} |u(\mathbf{X}), \pm\rangle(\pm V(\mathbf{X})) &= \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm X^4)}} \begin{pmatrix} (1 \pm X^4) \frac{\pm \bar{q}}{|q|} \\ \pm q \frac{\pm \bar{q}}{|q|} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm \bar{q} \frac{\sqrt{1 \pm X^4}}{\sqrt{1 - (X^4)^2}} \\ \frac{\sqrt{1 - (X^4)^2}}{\sqrt{1 \pm X^4}} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2(1 \mp X^4)}} \begin{pmatrix} \pm \bar{q} \\ 1 \mp X^4 \end{pmatrix} = |v(\mathbf{X}), \pm\rangle. \end{aligned} \quad (5.65)$$

Megjegyezzük, hogy (5.64) mértéktranszformáció csak ott értelmezett, ahol az egyik mértékben felírt sajátvektor sem szinguláris. Vagyis a pólusok kivételével mindenhol.

5.2.3. A görbületi egy-forma kiszámítása

Következzen az $\mathcal{A}(\pm)$ kvaternióértékű (nem-Abeli) helyfüggő egy-formák kiszámítása, először u -mértékben:

$$\langle u(\mathbf{X}), \pm | = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm X^4)}} (1 \pm X^4, \pm \bar{q}), \quad (5.66)$$

$$\begin{aligned} d|u(\mathbf{X}), \pm\rangle &= \frac{d}{dX^\mu} \left(\frac{1}{\sqrt{2(1 \pm X^4)}} \begin{pmatrix} 1 \pm X^4 \\ \pm q \end{pmatrix} \right) dX^\mu \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{d}{dX^4} \sqrt{1 \pm X^4} dX^4 \\ \frac{\pm dq}{\sqrt{1 \pm X^4}} \pm q \frac{d}{dX^4} \frac{1}{\sqrt{1 \pm X^4}} dX^4 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{\pm dX^4}{2\sqrt{1 \pm X^4}} \\ \frac{\pm dq}{\sqrt{1 \pm X^4}} \pm q \frac{1}{2} \frac{\pm dX^4}{\sqrt{1 \pm X^4}^3} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm X^4)}} \begin{pmatrix} \pm \frac{dX^4}{2} \\ \pm dq - \frac{qdX^4}{2(1 \pm X^4)} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5.67)$$

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

$$\begin{aligned} \langle u(\mathbf{X}), \pm | d|u(\mathbf{X}), \pm\rangle &= \frac{1}{2(1 \pm X^4)} \left(\pm(1 \pm X^4) \frac{dX^4}{2} + \bar{q}q \mp \frac{\bar{q}q}{1 \pm X^4} \frac{dX^4}{2} \right) \\ &= \frac{1}{2(1 \pm X^4)} (\bar{q}dq + X^4 dX^4). \end{aligned} \quad (5.68)$$

Ehelyütt kihasználjuk, hogy az $X^\mu X_\mu = 1$ normafeltétel miatt

$$\frac{1}{2}d(X^\mu X_\mu) = X^0 dX^0 + \dots + X^4 dX^4 = 0, \quad (5.69)$$

$$\bar{q}dq = \Re(\bar{q}dq) + \Im(\bar{q}dq), \quad (5.70)$$

$$\Re(\bar{q}dq) = X^0 dX^0 + \dots + X^3 dX^3. \quad (5.71)$$

Ekkor:

$$\mathcal{A}_u^{(\pm)} = i \frac{\Im(\bar{q}dq)}{2(1 \pm X^4)}, \quad (5.72)$$

és hasonló módon kapható a v mértékben:

$$\mathcal{A}_v^{(\pm)} = i \frac{\Im(qd\bar{q})}{2(1 \mp X^4)}. \quad (5.73)$$

(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 (5.63) mértéktranszformációval a kvaternió egy-forma mértéktranszformációjára a

$$\mathcal{A}_v^{(\pm)} = \bar{V} \mathcal{A}_u^{(\pm)} V + i\bar{V}dV \quad (5.74)$$

(5.42) alakú összefüggés lesz érvényben, amint az ebben a konkrét esetben számítással is illusztrálható.

5.2.4. A Berry-fázis kiszámítása

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

$$|\pm, \mathbf{X}(0)\rangle \mathcal{U}^{(\pm)}(C) = |\pm, \mathbf{X}(0)\rangle \mathcal{P} \exp \left(i \oint_C \mathcal{A}^{(\pm)} \right) \quad (5.75)$$

formula helyett egy könnyebben kezelhető fogunk készíteni. Osszuk fel a $0 \dots T$ intervallumot N darab $\varepsilon = \frac{T}{N}$ hosszúságú részre! Legyenek ekkor a görbe pontjai $|\mathbf{X}_a\rangle \equiv |\pm, \mathbf{X}(a\varepsilon)\rangle$. 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 (5.75) kifejezéssel ekvivalens a következő:

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{P} \prod_{a=0}^N P(\mathbf{X}_a) |\mathbf{X}_0\rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} P(\mathbf{X}_N) P(\mathbf{X}_{N-1}) \dots P(\mathbf{X}_0) |\mathbf{X}_0\rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} |\mathbf{X}_N\rangle \mathcal{P} \prod_{a=0}^N e^{i\mathcal{A}(\mathbf{X}_a)} \\ &= |\mathbf{X}_0\rangle \mathcal{P} \exp \left(\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{a=0}^N i\mathcal{A}(\mathbf{X}_a) \right) \\ &= |\mathbf{X}_0\rangle \mathcal{P} \exp \left(i \oint_C \mathcal{A} \right). \end{aligned} \quad (5.76)$$

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

$$|\pm, \mathbf{X}(0)\rangle \mathcal{U}^{(\pm)}(C) = \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{P} \prod_{a=0}^N P^{(\pm)}(\mathbf{X}_a) |\mathbf{X}_0\rangle. \quad (5.77)$$

E fenti formula alkalmazásához ismernünk kell a $P^{(\pm)}(t) \equiv P^{(\pm)}(\mathbf{X}(t))$ projektorok időfejlődését. (5.61) miatt ez meg fog egyezni a teljes rendszer időfejlésztésével:

$$\begin{aligned} P^{(\pm)}(t) &= \frac{1}{2} (I \pm H(t)) \\ &= \frac{1}{2} \left(U(t) U^\dagger(t) \pm U(t) H(0) U^\dagger(t) \right) \\ &= U(t) P^{(\pm)}(0) U^\dagger(t). \end{aligned} \quad (5.78)$$

A Hamiltonit diagonalizálják a normált sajátvektoraiból (5.62a-5.62b) képzett $U \in Sp(2)$ (kvaternióelemű kétdimenziós $U^\dagger = U^{-1}$ és itt $\det U = 1$) transzformációs mátrixok:

$$U_N(\mathbf{X}) = [u_+ | v_-] = \frac{1}{\sqrt{2(1+X^4)}} \begin{pmatrix} 1+X^4 & -\bar{q} \\ q & 1+X^4 \end{pmatrix}, \quad (5.79a)$$

$$U_S(\mathbf{X}) = [v_+ | u_-] = \frac{1}{\sqrt{2(1-X^4)}} \begin{pmatrix} \bar{q} & 1-X^4 \\ 1-X^4 & -q \end{pmatrix}, \quad (5.79b)$$

ahol $U_N(\mathbf{X})$ szinguláris a déli sarkon, $U_S(\mathbf{X})$ pedig az északin. Közöttük (5.63) alapján a következő mértéktranszformáció teremt kapcsolatot:

$$U_N(\mathbf{X}) \begin{pmatrix} V & \cdot \\ \cdot & -\bar{V} \end{pmatrix} = U_S(\mathbf{X}). \quad (5.80)$$

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:

$$U^\dagger(\mathbf{X}) H(\mathbf{X}) U(\mathbf{X}) = H(\mathbf{X}_N). \quad (5.81)$$

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

$$H(\mathbf{X}) = U(\mathbf{X}) H(\mathbf{X}_N) U^\dagger(\mathbf{X}), \quad (5.82)$$

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:

$$R: \mathbf{X}_N \rightarrow \mathbf{X} \quad (5.83)$$

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:

$$H(R\mathbf{X}_N) = U(R) H(\mathbf{X}_N) U^\dagger(R), \quad (5.84)$$

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

$$H(R\mathbf{X}) = U(R)H(\mathbf{X})U^\dagger(R), \quad (5.85)$$

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:

$$H(t) = U(t)H(0)U^\dagger(t), \quad (5.86)$$

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

Az iméntiek tanulsága, hogy ha olyan görbét választunk S^4 -ben, melyek $SO(5)$ -szimmetrikusak, és az északi sarkról indulnak, akkor a számítás könnyen elvégezhető, 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 időfejlésztő operátorra. Tehát nagyon speciális görbéket tekintünk csupán.

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

$$H(t) = U(R(t))H(0)U^\dagger(R(t)), \quad H(T) = H(0), \quad (5.87)$$

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

$$U = e^{-i\alpha_{\mu\nu}S_{\mu\nu}}, \quad (5.88)$$

$$S_{\mu\nu} = \frac{1}{4i}[\Gamma_\mu, \Gamma_\nu] \quad (5.89)$$

alakban, (ahol $\alpha_{\mu\nu}$ valóselemű, ferdén szimmetrikus 5×5 -ös mátrix,) mivel a fenti $S_{\mu\nu} \in Sp(2)$ mátrixok a Γ -mátrixok Clifford-algebra-tulajdonságai miatt kielégítik az ötdimenziós forgáscsoport Lie-algebrájának felcserelési relációit:

$$[S_{\mu\nu}, S_{\rho\sigma}] = \frac{i}{4}(\delta_{\mu\rho}S_{\nu\sigma} + \delta_{\nu\sigma}S_{\mu\rho} - \delta_{\mu\sigma}S_{\nu\rho} - \delta_{\nu\rho}S_{\mu\sigma}), \quad (5.90)$$

így ezek lesznek a Lie-csoport e reprezentációjának generátorai. (A $S_{\mu\nu}$ a megfelelő $(\mu\nu)$ -síokban való forgatást generálja.)

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

$$\alpha_{\mu\nu}(t) := \omega t \frac{1}{2} \cdot \text{const}_{\mu\nu}, \quad (5.91)$$

$$\omega T = 2\pi \quad (5.92)$$

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

$$U(t) = e^{-i\alpha_{\mu\nu}(t)S_{\mu\nu}} = e^{\frac{\omega t}{2}Z} = \cos\left(\frac{\omega t}{2}\right)I + \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right)Z, \quad (5.93)$$

ahol az utolsó egyenlőség fennállásához az kell, hogy a forgatásból kapott mátrixra az általánosan nem teljesülő $Z^2 = -\mathbb{I}$ reláció álljon fenn, ekkor az exponenciális függvény hatványsorának szétírásánál Z kiemelhető. Így látszik, hogy $U(0) = \mathbb{I}$, valamint, $U(T) = -\mathbb{I}$, 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 $Z^2 = -\mathbb{I}$. A további számítások során már csak ilyen eseteket nézünk. Ezzel a lépéssel tehát tovább specializáltuk az időfejlődés pályáját. A későbbiekhez még az is szükséges, hogy Z kvaternió-unitér legyen. Ezek által pedig Z ferdén hermitikus lesz.

Most, hogy az (5.93) időfejlesztést a $Z^2 = -I$ esetre általánosan tudjuk, számoljuk ki (5.77) alapján a geometriai hatást leíró kvaterniót! A végtelen szummát zárt alakban kapjuk meg az időfejlesztés formájának köszönhetően: (A levezetés mindkét altérben működik, így azt nem jelöljük külön a projekcióknál, $P^{(\pm)}(t) \equiv P(t)$. Valamint egyszerűsítendő a jelölést, legyen $P(0) \equiv P$.)

$$\begin{aligned}
\lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{P} \prod_{a=0}^N P(\mathbf{X}_a) &= \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} P(T)P \left(\frac{N-1}{N}T \right) P \left(\frac{N-2}{N}T \right) \dots P \left(\frac{1}{N}T \right) P(0) \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} e^{\frac{\omega}{2}TZ} P e^{-\frac{\omega}{2}TZ} e^{\frac{\omega}{2} \frac{N-1}{N}TZ} P e^{-\frac{\omega}{2} \frac{N-1}{N}TZ} \dots e^{\frac{\omega}{2} \frac{1}{N}TZ} P e^{-\frac{\omega}{2} \frac{1}{N}TZ} P \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} e^{\frac{\omega}{2}TZ} \left(P e^{-\frac{\omega}{2} \frac{T}{N}Z} P \right)^N = e^{\frac{\omega}{2}TZ} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(e^{-\frac{\omega}{2} \frac{T}{N}PZP} \right)^N \\
&= e^{\frac{\omega}{2}TZ} e^{-\frac{\omega}{2}TPZP}
\end{aligned} \tag{5.94}$$

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

$$\begin{aligned}
|\pm, \mathbf{X}(0)\rangle \mathcal{U}^{(\pm)}(C) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{P} \prod_{a=0}^N P^{(\pm)}(t_a) |\pm, \mathbf{X}(0)\rangle \\
&= e^{\pi Z} e^{-\pi P^{(\pm)}(0)ZP^{(\pm)}(0)} P^{(\pm)}(0) |\pm, \mathbf{X}(0)\rangle.
\end{aligned} \tag{5.95}$$

Ekkor egyrészt $e^{\pi Z} = -I$, másrészt a második exponens kiszámításához pedig felhasználjuk a következő összefüggést:

$$(PZP)^2 = -(PZP)^\dagger (PZP)P = -|PZP|^2 P, \tag{5.96}$$

ami fennáll, ha Z anti-Hermitikus, és P kvaternió-Hermitikus 1-rangú projekció. ($|\cdot|$ a kvaternionikus operátornorma, $|A| = \sqrt{\langle A|A \rangle} = \sqrt{\text{Tr}(A^\dagger A)}$.) Ekkor:

$$e^{-\pi PZP} P = \cos(\pi |PZP|) P - \sin(\pi |PZP|) \frac{PZP}{|PZP|}. \tag{5.97}$$

Ekkor összefoglalva:

$$\begin{aligned}
|\pm, \mathbf{X}(0)\rangle \mathcal{U}^{(\pm)}(C) &= \\
&= \left(-\cos(\pi |P^{(\pm)}ZP^{(\pm)}|) P^{(\pm)} + \sin(\pi |P^{(\pm)}ZP^{(\pm)}|) \frac{P^{(\pm)}ZP^{(\pm)}}{|P^{(\pm)}ZP^{(\pm)}|} \right) |\pm, \mathbf{X}(0)\rangle
\end{aligned} \tag{5.98}$$

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:

$$\alpha(t) := \frac{\omega t}{2} \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & r & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ -r & \cdot & \cdot & \cdot & -p \\ \cdot & \cdot & \cdot & p & \cdot \end{pmatrix}, \quad (5.99)$$

$$p, r \in \mathbb{R}, \quad p^2 + r^2 = 1, \quad (5.100)$$

ahol az utóbbi feltétel annak felel meg, hogy a forgatás irányvektora legyen egységnyi, a forgatás nagyságát az ωt tényező határozza meg. A fenti α -mátrix az ötdimenziós térben a (03) és (34) koordinátasíkokban forgat, így egy ferde síkban történő forgatást valósít meg, melynek tangensét p és r együtthatók aránya határozza meg.

Ekkor felírva a forgatást:

$$U(t) = e^{-i\alpha_{\mu\nu}(t)S_{\mu\nu}} = e^{\frac{\omega t}{2}Z} \quad (5.101)$$

$$Z = \Gamma_3 (r\Gamma_0 + p\Gamma_4), \quad (5.102)$$

melynek kiszámításához felhasználtuk a Γ_μ -k Clifford-algebrájának következményeként adódó egyenleteket:

$$\Gamma_\mu \Gamma_\nu = -\Gamma_\nu \Gamma_\mu, \quad (5.103)$$

$$[\Gamma_\mu, \Gamma_\nu] = 2\Gamma_\mu \Gamma_\nu, \quad (5.104)$$

mivel itt csak $\mu \neq \nu$ fordulhat elő. Könnyen belátható ekkor:

$$Z^2 = r^2 \Gamma_3 \Gamma_0 \Gamma_3 \Gamma_0 + p^2 \Gamma_3 \Gamma_4 \Gamma_3 \Gamma_4 + rp (\Gamma_3 \Gamma_0 \Gamma_3 \Gamma_4 + \Gamma_3 \Gamma_4 \Gamma_3 \Gamma_0) = -\mathbb{I} \quad (5.105)$$

mivel $\Gamma_\mu^2 = I$ és (5.103) megfelelő alkalmazásaival az első két tag összege (5.100) miatt $-\mathbb{I}$, a zárójel tartalma pedig eltűnik. (Ez alapján adhatunk ellenpéldát: a $Z^2 = -\mathbb{I}$ feltétel nem teljesül, ha Z -nek (5.102)-hoz hasonló előállításában nem emelhető ki a két Γ -t tartalmazó tagokból egy közös Γ_μ . Ekkor a fenti egyenletben a zárójel értéke nem nulla.)

Tehát (5.105) következményeképpen használhatjuk a (5.98) formulát. Ehhez kiszámoljuk a következőket: Mivel $t = 0$ -ban a Hamiltoni diagonális, ezért a projektorok:

$$P^{(+)}(0) = \begin{pmatrix} 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \quad P^{(-)}(0) = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.106)$$

Ezekkel

$$Z = \begin{pmatrix} -r & p \\ p & r \end{pmatrix} \mathbf{k}, \quad (5.107)$$

$$P^{(+)}(0)ZP^{(+)}(0) = \begin{pmatrix} -r & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{pmatrix} \mathbf{k}, \quad (5.108)$$

$$\left(P^{(+)}(0)ZP^{(+)}(0)\right)^2 = \begin{pmatrix} -r^2 & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \quad (5.109)$$

$$P^{(-)}(0)ZP^{(-)}(0) = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot \\ \cdot & r \end{pmatrix} \mathbf{k}, \quad (5.110)$$

$$\left(P^{(-)}(0)ZP^{(-)}(0)\right)^2 = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot \\ \cdot & -r^2 \end{pmatrix}, \quad (5.111)$$

valamint

$$|P^{(+)}(0)ZP^{(+)}(0)| = r. \quad (5.112)$$

Ekkor (5.98) vektoregyenlet megoldásával például a E_+ energiájú altéren ható kvaternióértékű Berry-fázis:

$$\mathcal{U}^{(+)}(C) = -\cos(\pi r) - \sin(\pi r)\mathbf{k} \quad (5.113)$$

Ezt visszaírva 2×2 komplex mátrixokkal, megkapjuk a nem-Abeli Berry-fázist, amely az eredeti \mathbb{C}^4 Hilbert-tér megfelelő kétdimenziós sajátalterében az időfejlődés hatását írja le:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}^{(+)}(C) &= \begin{pmatrix} -\cos(\pi r) + i \sin(\pi r) & \cdot \\ \cdot & -\cos(\pi r) - i \sin(\pi r) \end{pmatrix} \\ &= e^{-i\pi(r+1)} \begin{pmatrix} 1 & \cdot \\ \cdot & e^{i2\pi r} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5.114)$$

ami egy fázistoló kapu egy prefaktortól eltekintve. A lehetséges fázistolás $2\pi r$, ahol $-1 \leq r \leq 1$ az (5.100) feltétellel összhangban.

5.3. Aharonov-Anandan fázis

A Berry-fázis koncepciója az adiabatikus időfejlődésen alapult, és egy paramétertérbeli zárt görbe hatására a Hilbert-tér vektorain fellépő fázisfaktor megjelenésében nyilvánult meg. Ebben a fejezetben megvizsgáljuk, hogy mi történik adiabatikus időfejlődés során a Hilbert-tér sugarainak terében, valamint azt, hogy milyen lehetőség van nem adiabatikus időfejlődés leírására. A fejezet végén bemutatjuk a jelenség mögött húzódó szép általános struktúrát.

5.3.1. A ciklikus evolúció

Egy kvantumrendszer állapotát a Hilbert-tér sugarai reprezentálják, amit (3.3) definiál. Ha \mathcal{H} Hilbert-téren definiáljuk a következő \sim ekvivalencia-relációt:

$$|\varphi\rangle \sim |\psi\rangle \iff \{\exists a \in \mathbb{C}, a \neq 0 : \varphi = a\psi\}, \quad (5.115)$$

akkor a sugarak terét

$$\mathcal{P} = \mathcal{H} / \sim \quad (5.116)$$

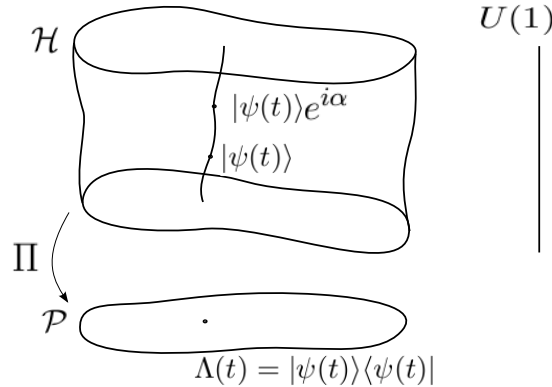
adja meg, melyet projektív Hilbert-térnek neveznek. (5.3) Ez izomorf \mathcal{H} egydimenziós altereire vetítő ortogonális projekciók terével. (Amennyiben egy összetett rendszer részrendszerét írjuk le \mathcal{H} -val, akkor a projektív tér a részrendszer tiszta állapotú sűrűségoperátorainak tere.)

A Schrödinger-egyenlet megoldásából képzett projekció:

$$i\hbar d_t |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (5.117)$$

$$\Lambda(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \in \mathcal{P} \quad (5.118)$$

egy görbét ír le \mathcal{P} -ben.



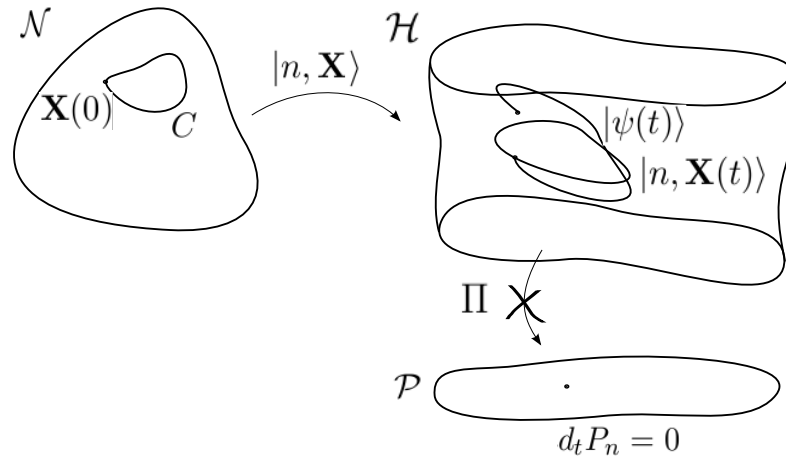
5.3. ábra. Hilbert-tér és projektív Hilbert-tér.

Továbbiakban legyen ez a görbe zárt: $\Lambda(T) = \Lambda(0)$. Ezt az esetet nevezzük ciklikus evolúciónak. (Tehát itt hangsúlyozottan az evolúció lesz ciklikus, másrészt az adott görbe a \mathcal{P} projektív térben záródik. Ez különbözteti meg a korábbi szituációtól, ahol a paraméterek változtak zárt görbe mentén \mathcal{N} -ben. A következőkben megmutatjuk, hogy miért indokolt ez a különbségtétel, és miért jelent a ciklikus időfejlődés a korábban tárgyalt ciklikus-paraméterváltozású adiabatikus időfejlődéstől eltérő fogalmat.)

Ha egy rendszer Hamilton operátora nem függ az időtől, akkor a Schrödinger-egyenlet megoldása során a változók szeparálhatók, és a hullámfüggvény időfüggését a dinamikai fázisfaktor fogja hordozni: $|\psi(t)\rangle = \exp\{i\alpha(t)\}|\psi(0)\rangle$. Ezt nevezzük stacionárius állapotnak.

Ekkor az időfejlődés során a rendszer állapota megmarad a Hilbert-tér kindulási állapotához tartozó sugarán, $\Lambda(t)$ nem változik, az általa leírt görbe degenerált: egy pont \mathcal{P} -ben.

Az adiabatikus közelítésnél feltettük, hogy a rendszer állapota az adott $\mathbf{X} \in \mathcal{N}$ paraméterhez tartozó Hamiltoni n . sajátvektorával (5.4) volt arányos a következőképpen: $|\psi(t)\rangle = a^{(n)}(t)b^{(n)}(t)|n, \mathbf{X}(t)\rangle$. (Az ehhez tartozó sugár már nem lesz állandó.) Az ebből képzett projekció ekkor minden időpontban a megfelelő Hamiltoni spektrális projekciója lesz: $\Lambda(t) = P_n(t) = |n, \mathbf{X}(t)\rangle\langle n, \mathbf{X}(t)|$, mely felcserélhető a Hamiltonival, így $i\hbar d_t P_n = [H, P_n] = 0$, vagyis a projektív térben nem fog elmozdulni a rendszer állapota. $\Lambda(t) = P_n(t) = P_n(0)$ lesz, ami stacionárius időfejlődést jelent, holott a különböző $\mathbf{X} \in \mathcal{N}$ paraméterhez tartozó Hamiltoni sajátvektorai nem kell, hogy azonos sugaron legyenek, a belőlük képzett projekció általános, nemdegenerált görbét is bejárhat.



5.4. ábra. Az adiabatikus időfejlődés a projektív téren stacionárius kellene, hogy legyen.

Ez az ellentmondás az adiabatikus közelítésből adódik, és úgy interpretálható, hogy valójában nem létezik olyan lassú időfejlődés, melyre a kvantumátmenetek valószínűsége egzaktul nullára csökkenne. Így az időfejlődés során valójában csak igen nagy valószínűséggel fog a rendszer $|\psi(t)\rangle$ állapota megmaradni $|n, \mathbf{X}(t)\rangle$ -nek megfelelő nívón, de a nívóátmenet teljesen nem zárható ki.

Ahhoz, hogy az adiabatikus közelítés mégis alkalmazható legyen, kell találni egy transzformációt a paramétereken, mellyel kapott Hamiltoni-sajátállapotok vetületei a projektív téren a ciklikus időfejlődést megvalósító projekciókkal esnek egybe. (5.5 ábra) Tehát legyen

$$g : \mathcal{N} \longrightarrow \mathcal{N} \quad (5.119)$$

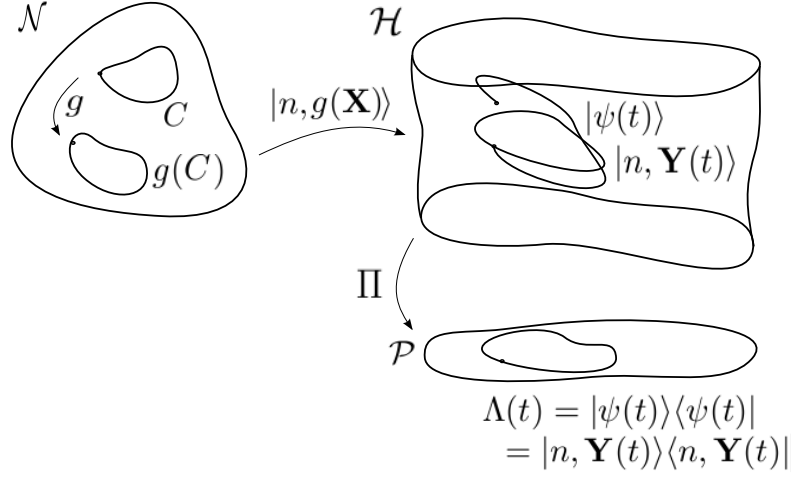
$$\mathbf{X} \longmapsto g(\mathbf{X}) = \mathbf{Y} \quad (5.120)$$

diffeomorfizmus, melyre

$$\Lambda(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = |n, \mathbf{Y}(t)\rangle\langle n, \mathbf{Y}(t)|. \quad (5.121)$$

A paraméterek \mathbf{X} szerint változnak, a rendszer dinamikáját jellemző Hamiltoni $H(\mathbf{X})$ lesz, de a rendszer állapota az \mathbf{Y} -nal kapott Hamilton operátor sajátvektorával lesz arányos: $H(\mathbf{Y})|n, \mathbf{Y}\rangle = E_n(\mathbf{Y})|n, \mathbf{Y}\rangle$. Ez hordozza magában azt, hogy a rendszer állapota elfordul az őt leíró Hamiltoni sajátállapotától, amelyből indulva a kvantumátmenetek valószínűsége fokozatosan eltér a nullától. Így megkerültük az adiabaticitás megkövetelését, és közben – amint látni fogjuk, – az adiabatikus esetben már elvégzett számítások csekély módosítással

ugyanúgy végigvihetők. A nehézséget ekkor a fenti g diffeomorfizmus megtalálása okozza, mely egyáltalán nem biztos, hogy létezik. Vannak olyan fizikai rendszerek, melyekre ilyen paramétertérbeli transzformáció található.



5.5. ábra. A paraméterek transzformációja.

5.3.2. Következmények

Tegyük fel tehát, hogy létezik olyan g , melyre (5.121) teljesül. Ekkor

$$|\psi(t)\rangle = c^{(n)}(t)|n, \mathbf{Y}(t)\rangle \quad (5.122)$$

fenáll minden időpontban, ahol $c^{(n)}(t)$ egységnyi abszolútértékű fázisfaktor a $c^{(n)}(0) = 1$ kezdeti feltétellel. Ezt behelyettesítve az időfüggő Schrödinger-egyenletbe, majd $\langle n, \mathbf{Y}(t)|$ -vel szorozva a

$$\frac{d_t c^{(n)}(t)}{c^{(n)}(t)} = -\frac{i}{\hbar} \langle n, \mathbf{Y}(t)|H(\mathbf{X}(t))|n, \mathbf{Y}(t)\rangle - \langle n, \mathbf{Y}(t)|d_t|n, \mathbf{Y}(t)\rangle \quad (5.123)$$

differenciálegyenletet kapjuk $c^{(n)}(t)$ -re. Ennek megoldását a korábbihoz hasonlóan faktorizálhatjuk a dinamikai és geometriai fázisra:

$$c^{(n)}(t) = a^{(n)}(t)b^{(n)}(t) \quad (5.124)$$

$$a^{(n)}(t) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \int_0^t \langle n, \mathbf{Y}(\tau)|H(\mathbf{X}(\tau))|n, \mathbf{Y}(\tau)\rangle d\tau\right), \quad (5.125)$$

$$b^{(n)}(t) = \exp\left(-\int_0^t \langle n, \mathbf{Y}(\tau)|d_\tau|n, \mathbf{Y}(\tau)\rangle d\tau\right). \quad (5.126)$$

Itt az $a^{(n)}(t)$ dinamikai fázisban az energiának az $|n, \mathbf{Y}\rangle$ állapotban vett várhatóértéke jelenik meg. Ez nem sajátállapot, így nem jelenik meg a megfelelő E_n energiasajátérték, (Általános esetben $[H(\mathbf{X}), H(g(\mathbf{X}))] \neq 0$, mivel adiabatikus ciklikus evolúció nem létezik a degenerált esetet leszámítva.)

A $b^{(n)}(t)$ geometriai fázisban szereplő integrandus ismét tisztán képzetes, ahogy (5.11)-ben is. Írjuk át az idő-integrált az $\mathbf{X}(t)$ -görbe menti integrálra:

$$\frac{d}{dt}|n, \mathbf{Y}(\mathbf{X}(t))\rangle = \frac{\partial}{\partial X^\mu}|n, \mathbf{Y}(\mathbf{X}(t))\rangle \frac{dX^\mu}{dt}. \quad (5.127)$$

ahol a deriválás közvetett, melyhez a $Y^\nu = Y^\nu(X^\mu)$ lokális koordinátákat vezethetjük be az áttérésnél. Az áttérés lehetséges, mert g diffeomorfizmus, így a $\frac{\partial Y^\nu}{\partial X^\mu} = \frac{\partial g^\nu(\mathbf{X})}{\partial X^\mu}$ parciális deriváltak léteznek.

A paraméterterben \mathbf{X} zárt görbe, így áttérhetünk görbe menti integrálra. Az eredő geometriai fázis egy ciklus megtétele után:

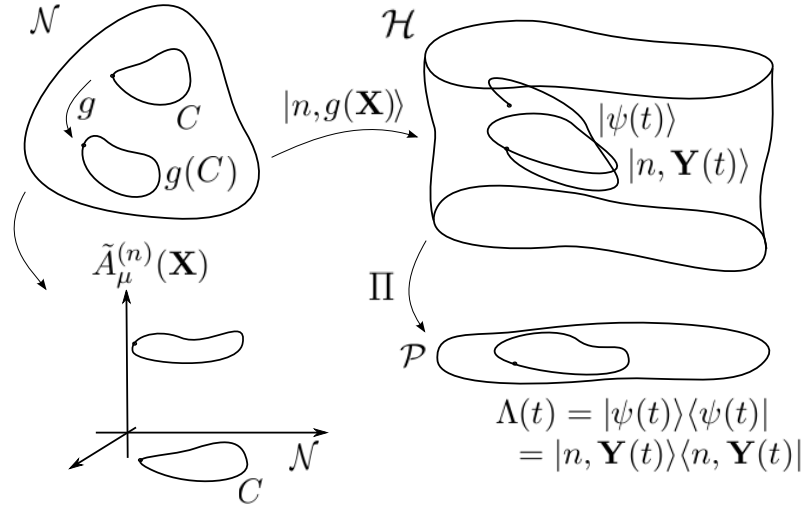
$$b_C^{(n)} = \exp \left(- \oint_C \langle n, g(\mathbf{X}) | \frac{\partial}{\partial X^\mu} | n, g(\mathbf{X}) \rangle dX^\mu \right) \quad (5.128)$$

E fázisfaktor neve: Aharonov-Anandan-fázis.

Bevezethetjük ekkor az Aharonov-Anandan-féle vektorpotenciált

$$\tilde{A}_\mu^{(n)}(\mathbf{X}) := i \langle n, g(\mathbf{X}) | \frac{\partial}{\partial X^\mu} | n, g(\mathbf{X}) \rangle \quad (5.129)$$

mely egy \mathcal{N} -en értelmezett $\dim \mathcal{N}$ komponensű kovariáns vektormező, a korábbiakkal analógiában.



5.6. ábra. Az Aharonov-Anandan vektorpotenciál.

A teljes integrandus adja az Aharonov-Anandan görbületi egyformát, mely ekkor

$$\tilde{A}^{(n)} := \tilde{A}_\mu^{(n)}(\mathbf{X}) dX^\mu \quad (5.130)$$

alakba írható. Ennek külső deriválásával kaphatjuk az Aharonov-Anandan-féle görbületi két-formát:

$$\tilde{F}^{(n)} := d\tilde{A}^{(n)}. \quad (5.131)$$

Ekkor a fázis (5.19)-hoz hasonlóan megkapható a Stokes-tétel segítségével a görbületi két-forma C által határolt S felületen történő integrálásával:

$$b_C^{(n)} = \exp \left(i \int_S \tilde{F}^{(n)} \right). \quad (5.132)$$

5.3.3. Paralell-transzport

Láttuk tehát, hogy a (5.125) és (5.126) fázisfaktorokkal megkaphatjuk a Hamiltoni megoldását: $|\psi(t)\rangle = a^{(n)}(t)b^{(n)}(t)|n, \mathbf{Y}(t)\rangle$. Nézzük $|\psi(t)\rangle$ időfejlődésének geometriai vonatkozásait! Ennek érdekében válasszuk le a dinamikai fázisfaktort:

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}(t)\rangle &= \bar{a}^{(n)}(t)|\psi(t)\rangle \\ &= b^{(n)}(t)|n, \mathbf{Y}(t)\rangle \\ &= \exp\left(-\int_0^t \langle n, \mathbf{Y}(\tau)|d_\tau|n, \mathbf{Y}(\tau)\rangle d\tau\right) |n, \mathbf{Y}(t)\rangle. \end{aligned} \quad (5.133)$$

Vizsgáljuk meg ezt az állapotot! Képezzük a következőt:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\psi}(t)|d_t\tilde{\psi}(t)\rangle &= \\ &= \bar{b}^{(n)}(t)\langle n, \mathbf{Y}(t)|\left(-\langle n, \mathbf{Y}(t)|d_t|n, \mathbf{Y}(t)\rangle b^{(n)}(t)|n, \mathbf{Y}(t)\rangle + b^{(n)}(t)d_t|n, \mathbf{Y}(t)\rangle\right) \end{aligned} \quad (5.134)$$

ahol a bra-vektorral való beszorzás után zárójel tartalma eltűnik:

$$\langle \tilde{\psi}|d_t\tilde{\psi}\rangle = 0 \quad (5.135)$$

vagyis azt kapjuk, hogy a Hilbert-térben $|\tilde{\psi}\rangle$ megváltozása mindig önmagára ortogonális lesz.

Módunk van ennek szemléletes interpretációjára. Ehhez vezessünk be egy új fogalmat: akkor mondjuk, hogy $|\psi_1\rangle$ és $|\psi_2\rangle$ egymással fázisban van, ha különbségük normanégyzete minimális. (Ezt a kvantuminterferencia jelensége motiválja: a fázisban levő állapotok kioltják egymást.)

$$\| |\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle \|^2 = 2 - 2\Re\langle \psi_1|\psi_2\rangle \quad (5.136)$$

ami infimumát akkor veszi fel, ha $\Re(\langle \psi_1|\psi_2\rangle)$ a szuprémumát, aminek feltétele pedig:

$$\langle \psi_1|\psi_2\rangle \in \mathbb{R}^+. \quad (5.137)$$

Vagyis két tetszőleges $|\psi_1\rangle$ és $|\psi_2\rangle$ Hilbert-tér elem fázisban van, ha belső szorzatuk valós pozitív. (Ez nem ekvivalenciareláció, mert nem tranzitív.)

A fenti fogalmat lokálisan is értelmezhetjük: $|\psi\rangle$ és $|\psi + d\psi\rangle$ fázisban van, ha

$$\langle \psi|\psi + d\psi\rangle = 1 + \langle \psi|d\psi\rangle \in \mathbb{R}^+. \quad (5.138)$$

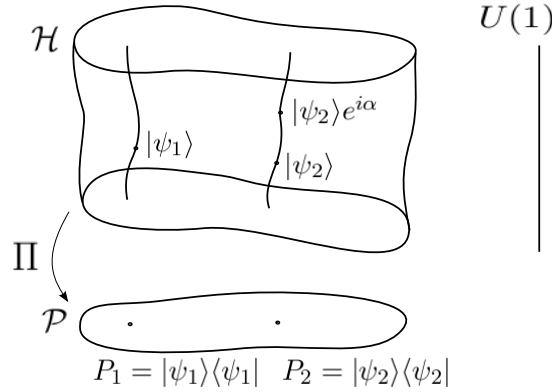
Mivel a második tag tisztán képzetes, ezért a lokális „fázisszomszédság” feltétele:

$$\langle \psi|d\psi\rangle = 0. \quad (5.139)$$

Ez alapján (5.135) azt állítja, hogy az időfejlődés során az állapot lokálisan fázisban marad. Mivel ez nem tranzitív tulajdonság, így a projektív térben megtett zárt görbe után a Hilbert-térben az állapot a kiindulási állapothoz képest egy fázisban különbözni fog.

5.3.4. Fubini-Study metrika

Van egy szemléletes lehetőségünk arra, hogy a Hilbert tér sugarainak terén, vagyis a projektív Hilbert-téren távolságfogalmat vezessünk be. Ezt Fubini-Study metrikának nevezik, és a Hilbert-tér természetes metrikájára vezethető vissza oly módon, hogy két fázisban levő normált vektor Hilbert-térbeli távolsága adja meg a távolságot a projektív téren.



5.7. ábra. „Egymástól távoli” vektorok fázisszomszédsága.

Legyen P_1 és P_2 két elem a projektív téren, $|\psi_1\rangle$ és $|\psi_2\rangle$ pedig egy-egy reprezentáns elem a Hilbert térből, melyekkel $P_1 = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$, $P_2 = |\psi_2\rangle\langle\psi_2|$. (5.7 ábra) Ekkor

$$\begin{aligned} d_{FS}^2(P_1, P_2) &= \inf_{\alpha} \|\ |\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle e^{i\alpha} \|^2 \\ &= \inf_{\alpha} (2 - 2\Re(\langle\psi_1|\psi_2\rangle e^{i\alpha})) \end{aligned} \quad (5.140)$$

ami az infimumot olyan α -ra veszi fel, amire $\langle\psi_1|\psi_2\rangle e^{i\alpha}$ tisztán valós pozitív. Ebből a fázisfaktor meghatározható:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle e^{i\alpha} = |\langle\psi_1|\psi_2\rangle e^{i\alpha}| \quad (5.141)$$

$$e^{i\alpha} = \frac{\langle\psi_2|\psi_1\rangle}{|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|} \quad (5.142)$$

amiből

$$d_{FS}^2(P_1, P_2) = 2(1 - |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|) \quad (5.143)$$

adódik.

Ez valóban érzéketlen a vektoroknak egy fázisfaktorral való szorzására, és teljesíti a metrika tulajdonságait.

5.3.5. Általánosítás

Amennyiben $d|\psi\rangle$ -t $|\psi\rangle$ infinitezimális megváltozásának tekintjük a Hilbert-térben, úgy (5.135) feltételt a paraméter-tér nélkül is kimondhatjuk. A Hilbert-teret a projektív tér feletti nyalábnak tekintve, a korábbinál általánosabban definiáljuk a paralell-transzportot. Amennyiben a rendszer állapotát \mathcal{P} projektív téren ciklikusan tudjuk fejleszteni, az általa leírt görbéhez egyértelműen megadhatunk egy horizontálisan kiemelt – általában nem zárt – görbét \mathcal{H} -n.

Vezessük be az általános görbületi egy-formát:

$$\mathbb{A} = i\langle\psi|d|\psi\rangle, \quad (5.144)$$

amit adott koordináta-rendszerben kifejtethetünk:

$$\mathbb{A} = \mathbb{A}_{\hat{\mu}}(x) dx^{\hat{\mu}} = i\langle\psi(x)| \frac{\partial}{\partial x^{\hat{\mu}}} |\psi(x)\rangle dx^{\hat{\mu}}, \quad (5.145)$$

ahol $x^{\hat{\mu}}$ megszámlálható lokális koordináta \mathcal{P} -n.

Ezzel a (5.135) paralell-transzport feltétel szerint $\mathbb{A}_{\hat{\mu}}(x) = 0$ adott x -re, vagyis a paralell-transzport során mindig található lokális $|\psi(x)\rangle \rightarrow |\psi(x)\rangle \exp\{i\alpha(x)\}$ mértéktranszformáció, melyre $\mathbb{A} = 0$. Globálisan ez bármely x -re nem teljesíthető, így általános $x(T) = x(0)$ zárt görbe esetén $|\psi(x)\rangle$ által felvett fázis nem lesz nulla. E fázist eltüntető globális mértéktranszformáció akkor lehetséges, ha $\mathbb{F} = d\mathbb{A} = 0$.

Legyen $f^{(n)}$ leképezés a paramétertérből a projektív térbe, (5.8. ábra) melyet lokális koordinátákkal megadva $x^{\hat{\mu}}(X^{\mu})$ sima függvényekkel definiálhatunk, ahol a szokásos X^{μ} -k lokális koordináták \mathcal{N} -en.

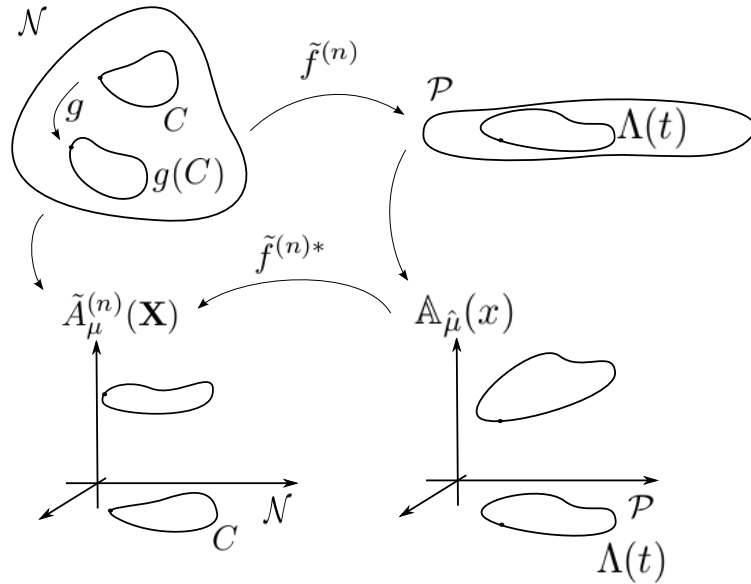
$$f^{(n)} : \mathcal{N} \longrightarrow \mathcal{P} \quad (5.146)$$

$$\mathbf{X} \longmapsto P_n(\mathbf{X}) = |n, \mathbf{X}\rangle \langle n, \mathbf{X}|. \quad (5.147)$$

Vezessük be még: $\tilde{f}^{(n)} = f^{(n)} \circ g$ leképezést:

$$\tilde{f}^{(n)} : \mathcal{N} \longrightarrow \mathcal{P} \quad (5.148)$$

$$\mathbf{X} \longmapsto P_n(g(\mathbf{X})) = |n, g(\mathbf{X})\rangle \langle n, g(\mathbf{X})|. \quad (5.149)$$



5.8. ábra. Az általános görbületi-forma

A Berry és az Aharonov-Anandan egy-formák

$$A^{(n)} = A_\mu^{(n)}(\mathbf{X})dX^\mu = i\langle n, \mathbf{X} | \frac{\partial}{\partial X^\mu} | n, \mathbf{X} \rangle dX^\mu, \quad (5.150)$$

$$\tilde{A}^{(n)} = \tilde{A}_\mu^{(n)}(\mathbf{X})dX^\mu = i\langle n, g(\mathbf{X}) | \frac{\partial}{\partial X^\mu} | n, g(\mathbf{X}) \rangle dX^\mu \quad (5.151)$$

speciális esetei lesznek (5.145) univerzális konnektió-formának. A kapcsolat az $f^{(n)}$ és $\tilde{f}^{(n)}$ leképezések által valósul meg: az $A^{(n)}$ Berry és az $\tilde{A}^{(n)}$ Aharonov-Anandan egy-forma az \mathbb{A} univerzális konnektió-forma $f^{(n)}$ és $\tilde{f}^{(n)}$ általi visszahúzottjai:

$$A^{(n)} = f^{(n)*} \mathbb{A}, \quad (5.152)$$

$$\tilde{A}^{(n)} = \tilde{f}^{(n)*} \mathbb{A}. \quad (5.153)$$

6. fejezet

Kevert állapotok holonómiája

A **3.** fejezetben bemutattuk, hogy az összetett rendszerek leírására a sűrűségoperátorokat használjuk. Láttuk továbbá, hogy egy részrendszer redukált sűrűségoperátorának purifikációja előállítható a redukált sűrűségoperátor sajátértékeivel. Azonban található más olyan állapot is, melyekből az adott sűrűségoperátor redukálható. Ez a tény ad lehetőséget arra, hogy holonómiákat vezessünk be kevert állapotokra.

6.1. A Hilbert-Schmidt nyaláb

Jelölje \mathcal{D}_N az $N \times N$ -es sűrűségmátrixok terét:

$$\mathcal{D}_N = \{\varrho \in M(N, \mathbb{C}) : \varrho^\dagger = \varrho, \varrho \geq 0, \text{Tr} \varrho = 1\} \quad (6.1)$$

A **3.2.3.** fejezetben használt jelölésekkel a \mathcal{H}_1 , N -dimenziós Hilbert-téren ható redukált sűrűségoperátor mátrixa általánosan:

$$\varrho = WW^\dagger \in \mathcal{D}_N \quad (6.2)$$

ahol W ϱ -nak egy purifikációját írja le (3.10) alakban, mely egy tiszta állapot $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1$ -ben. Továbbiakban csak speciális sűrűségoperátorokat fogunk tekinteni, melyek pozitívak:

$$\mathcal{D}_{N+} = \{\varrho \in GL(N, \mathbb{C}) : \varrho^\dagger = \varrho, \varrho > 0, \text{Tr} \varrho = 1\}, \quad (6.3)$$

vagyis ϱ összes sajátértéke pozitív, így ϱ „teljes rangú”: $\text{rank}(\varrho) = N$. Ekkor $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1$ teret \mathcal{H}_S Hilbert-Schmidt-térnek nevezzük. Ennek $\|W\| = 1$ normált elemeiből kaphatunk $\text{Tr} \varrho = 1$ normált sűrűségoperátorokat. A Hilbert-Schmidt-tér elemei \mathcal{H}_1 -en ható operátorok, a rajta lévő belső szorzat pedig:

$$\langle \cdot | \cdot \rangle : \mathcal{H}_S \times \mathcal{H}_S \longrightarrow \mathbb{C} \quad (6.4)$$

$$W_1, W_2 \longmapsto \langle W_1 | W_2 \rangle = \text{Tr}(W_1^\dagger W_2) \quad (6.5)$$

Ezeknek az állapotoknak redukcióját írjuk le egy leképezéssel a következőképpen:

$$\Pi : \mathcal{H}_S \longrightarrow \mathcal{D}_{N+} \quad (6.6)$$

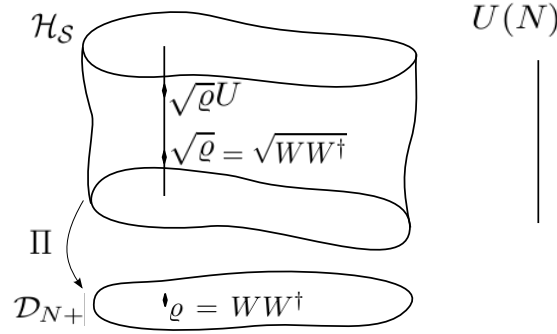
$$W \longmapsto WW^\dagger = \varrho \quad (6.7)$$

Ez láthatóan invariáns egy unitérrel való jobbszorzásra:

$$W \longrightarrow WU, \quad U^\dagger = U^{-1} \quad (6.8)$$

$$WW^\dagger \longrightarrow WUU^\dagger W^\dagger = WW^\dagger. \quad (6.9)$$

Bevezethetjük a fentiekkel az úgynevezett Hilbert-Schmidt-nyalábot. Az alaptér a nemszinguláris sűrűségoperátorok tere, a nyaláb a Hilbert-Schmidt-tér, a szál $U(N)$, a nyaláb projekciója pedig a (6.6)-ben definiált ráképezés.



6.1. ábra. Hilbert-Schmidt nyaláb.

Tetszőleges W mátrixra jelöljük

$$|W| := \sqrt{WW^\dagger}, \quad (6.10)$$

mely pozitív operátor. Ekkor bármely nemszinguláris W egyértelműen előállítható a következő alakban:

$$W = |W|U, \quad U = U^\dagger \quad (6.11)$$

amit W poláris dekompozíciójának nevezünk.

Ez alapján a \mathcal{D}_{N+} alaptérnek létezik egy globális, természetes beágyazása a Hilbert-Schmidt nyalábba:

$$\iota : \mathcal{D}_{N+} \longrightarrow \mathcal{H}_S \quad (6.12)$$

$$\varrho \longmapsto \sqrt{\varrho}, \quad (6.13)$$

továbbá egy $\varrho = WW^\dagger$ sűrűségoperátor purifikációt célszerűen $\sqrt{\varrho}U$ alakban állíthatjuk elő.

6.2. Konnekción

Lehetőségünk van metrika bevezetésére a Hilbert-Schmidt-téren. A konstrukció a következő: Egy differenciálható sokaság minden pontjában képezhetjük az érintőtereit, melyek egymással lokálisan diffeomorf valós lineáris terek, és rajtuk megadható metrika. A \mathcal{H}_S Hilbert-Schmidt-tér eleve lineáris tér, azonosítható önmaga $T_x\mathcal{H}_S$ érintőterével. Ekkor a rajta levő (6.4) belső szorzat valós részével egy természetes metrika definiálható.

$$\langle \cdot | \cdot \rangle_S : T_x\mathcal{H}_S \times T_x\mathcal{H}_S \longrightarrow \mathbb{R} \quad (6.14)$$

$$W_1, W_2 \longmapsto \langle W_1 | W_2 \rangle_S = \Re \text{Tr}(W_1^\dagger W_2) \quad (6.15)$$

amivel:

$$d_S^2 : T_x \mathcal{H}_S \times T_x \mathcal{H}_S \longrightarrow \mathbb{R} \quad (6.16)$$

$$W_1, W_2 \longmapsto d_S^2(W_1, W_2) = \langle (W_2 - W_1) | (W_2 - W_1) \rangle_S \quad (6.17)$$

Ahhoz, hogy a sűrűségmátrixok terén futó görbe horizontális kiemeltjét megadhassuk, meg kell tudni határozni a nyalábon a horizontális és vertikális irányokat. A vertikális irány – nyalábirány – könnyen megadható: egy vertikális irányú görbe $W(t) = W_0 U(t)$ felírható $W_0 \exp\{iHt\}$ alakban, ahol H hermitikus. Érintője ekkor $dW(t) = W_0 dU(t) = W_0 U(t) iH = W(t) iH$, vagyis a görbe minden W pontjában az érintőtérben iWH alakú. Ennek alapján adhatjuk meg a horizontális irány definícióját: az érintőtérben a iWH -alakú vektorokra (6.14) alapján merőleges vektor lesz horizontális. Tehát egy $W(t)$ -görbe $dW(t)$ érintője W -pontban horizontális:

$$\begin{aligned} \langle dW | iWH \rangle_S &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left(dW^\dagger iWH + (iWH)^\dagger dW \right) \\ &= \frac{i}{2} \text{Tr} \left(dW^\dagger WH - HW^\dagger dW \right) \\ &= \frac{i}{2} \text{Tr} \left(H(dW^\dagger W - W^\dagger dW) \right) = 0, \end{aligned} \quad (6.18)$$

ahol az utolsó egyenlőségnek kell fennállnia bármely hermitikus H operátorra, így

$$dW^\dagger W = W^\dagger dW \quad (6.19)$$

egyenlet fejezi ki a $W(t)$ -görbe horizontálisát adott pontban. Ez egy mátrixokra vonatkozó elsőrendű differenciálegyenlet, melyet megold a következő ansatz:

$$dW = GW, \quad G = G^\dagger. \quad (6.20)$$

Tehát egy G hermitikus operátor fogja a görbét horizontálisan „fejleszteni”. G általános esetben nem állandó a görbén. A teljes hosszában horizontális görbe eszerint

$$W(t) = W_0 \mathcal{T} e^{G(t)}. \quad (6.21)$$

alakban áll elő, ahol \mathcal{T} a t szerinti rendezés operátora.

Célunk G meghatározása a \mathcal{D} alaptérbeli $\varrho(t)$ görbe alapján. Mivel $\rho(t) = W(t)W^\dagger(t)$, ezért

$$\begin{aligned} d\rho &= dW W^\dagger + W dW^\dagger \\ &= G W W^\dagger + W W^\dagger G \\ &= \{G, \varrho\}. \end{aligned} \quad (6.22)$$

mely egyenletből $G(t)$ meghatározható.

6.3. Számítások két-fermion-rendszerre

A fermionokból álló összetett rendszerek állapota a felcserélésre előjelet vált, ezért az állapotot leíró W mátrixok antiszimmetrikusak lesznek. Az ilyeneket konvencionális okokból P -vel jelöljük:

$$\varrho = 2PP^\dagger, \quad P = -P^T. \quad (6.23)$$

A (6.19) feltétel alapján a sűrűségmátrixok terében futó $\varrho(t)$ görbe horizontális kiemeltje a nyalábon olyan görbe, melyre minden pontban $dP^\dagger P$ hermitikus. Ekkor a (6.20) alapján

$$dP = GP, \quad G = G^\dagger, \quad (6.24)$$

$$d\varrho = \{G, \varrho\} \quad (6.25)$$

differenciálegyenletet kapjuk a horizontális görbét fejlesztő G -re. Ekkor G -t $\varrho_{ij}(t)$ -paraméterek függvényében kapjuk. (6.25) megoldása 2×2 -es esetben könnyű: a Pauli-mátrixok bázisán fejtve ki a mátrixokat, egyszerű formájú egyenletrendszer adódik, melyből G meghatározható.

A 4×4 -es esetben kapott egyenletek formájukat tekintve sokkal bonyolultabbak, és megoldásuknak egyszerű, zárt alakra hozása hosszas próbálkozások után is kudarcba fulladt.

Másik megközelítést választottunk tehát a probléma megoldására: próbáljuk meg (6.24) egyenletből kifejezni G -t! Ezt követően az így kapott G önadjungált-része fogja megadni a keresett mátrixot. A [11]-ben járt utat követjük, mert ezekkel a P és ϱ közötti kapcsolat számunkra hasznos formájúnak adódik.

Írjuk P -t a térerősség-tenzorhoz hasonló alakban:

$$P := \begin{pmatrix} 0 & E_1 & E_2 & E_3 \\ -E_1 & 0 & -B_3 & B_2 \\ -E_2 & B_3 & 0 & -B_1 \\ -E_3 & -B_2 & B_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.26)$$

ahol $\mathbf{E}, \mathbf{B} \in \mathbb{C}^3$. Ennek könnyen képezhetjük az inverzét:

$$\text{Det}(P) = (\mathbf{E}\mathbf{B})^2 \quad (6.27)$$

$$\text{Adj}(P) = \mathbf{E}\mathbf{B} \begin{pmatrix} 0 & -B_1 & -B_2 & -B_3 \\ B_1 & 0 & E_3 & -E_2 \\ B_2 & -E_3 & 0 & E_1 \\ B_3 & E_2 & -E_1 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.28)$$

Ekkor legyen

$$\tilde{G} = dPP^{-1} = \frac{1}{\mathbf{E}\mathbf{B}} \begin{pmatrix} (d\mathbf{E})\mathbf{B} & ((d\mathbf{E}) \times \mathbf{E})^T \\ (d\mathbf{B}) \times \mathbf{B} & M \end{pmatrix} \quad (6.29)$$

$$M = (d\mathbf{E}) \circ \mathbf{B} - \mathbf{E} \circ d\mathbf{B} + (\mathbf{E}d\mathbf{B})\mathbb{I} \quad (6.30)$$

amely mátrix a speciális relativitáselméletben megszokott $1 + 3$ alakban particionált blokk-szerkezetű. (\mathbb{I} a 3×3 -as egységmátrix.) Itt \tilde{G} mátrix P elemeivel áll elő. Ennek a mátrixnak az önadjungált része lesz a keresett mátrix.

Végezzünk most el a [11]-ben használt bázistranszformációt! Legyen

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -i & 0 \\ 0 & 1 & i & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad U^{-1} = U^\dagger. \quad (6.31)$$

Ekkor megmutatható, hogy $\varrho' = U\varrho U^\dagger$ transzformáció hatása:

$$\begin{aligned} 2\varrho' &= (\|\mathbf{a}\|^2 + \|\mathbf{b}\|^2)(I \otimes I) \\ &+ x^l(I \otimes \bar{\sigma}_l) \\ &+ y^j(\sigma_j \otimes I) \\ &+ (b^j \bar{a}^l + \bar{b}^j a^l)(\sigma_j \otimes \bar{\sigma}_l) \end{aligned} \quad (6.32)$$

ahol a kifejtés az impulzuszórántum $\frac{1}{2}$ -es spinor és konjugált spinor ábrázolásainak tenzor-szorzatán történik. (I a 2×2 -es egységmátrix, σ_i a Pauli-mátrixok, $\varepsilon = i\sigma_2$, és $\bar{\sigma}_i = \varepsilon\sigma_i\varepsilon$.) A kifejtési együtthatók a P régi változóinak kombinációi a következőképpen:

$$\mathbf{a} = \mathbf{E} + i\mathbf{B} \quad (6.33)$$

$$\mathbf{b} = \mathbf{E} - i\mathbf{B} \quad (6.34)$$

$$\mathbf{x} = -i\mathbf{a} \times \bar{\mathbf{a}} \quad (6.35)$$

$$\mathbf{y} = i\mathbf{b} \times \bar{\mathbf{b}} \quad (6.36)$$

Végezzük most el a fenti transzformációt \tilde{G} -re is!

$$\tilde{G}' = U\tilde{G}U^\dagger \quad (6.37)$$

(Unitér transzformáció nyilván őrzzi az önadjungáltságot és a ferdén-önadjungáltságot.) Ekkor a fenti bázison a kifejtési együtthatók meghatározhatóak, és

$$\begin{aligned} \tilde{G}' &= (i\mathbf{b}d\mathbf{b} + i\mathbf{a}d\mathbf{a})(I \otimes I) \\ &+ (\mathbf{a} \times d\mathbf{a})^l(I \otimes \bar{\sigma}_l) \\ &+ (\mathbf{b} \times d\mathbf{b})^j(\sigma_j \otimes I) \\ &+ (ib^j da^l + i(db^j)a^l)(\sigma_j \otimes \bar{\sigma}_l) \end{aligned} \quad (6.38)$$

alak adódik. Így a keresett mátrixot megkaphatjuk:

$$G' = \frac{1}{2} (\tilde{G}' + \tilde{G}'^\dagger) \quad (6.39)$$

mely könnyen elvégezhető, tekintve, hogy \tilde{G}' önadjungált bázison van kifejtve. Ez így a további számításokhoz jól használható alak.

7. fejezet

Összefoglalás, további tervek

Áttekintettük a tiszta és a kevert állapotú kvantummechanikai rendszerek leírásában felbukkanó nyalábokat. A számítások konkrét alkalmazásaként tiszta állapotú rendszeren kiszámított holonómia-transzformációval fázistoló-kaput valósítottunk meg. Kevertállapotú holonómiák kiszámításához előzetes számításokat végeztünk.

A további célkitűzések között első helyen szerepel az alkalmazott topológiai fogalmak elmélyítése, valamint minél nagyobb rálátás megszerzése ezek fizikai alkalmazásaira.

A tiszta állapotok holonómiáinak témájában a továbbfejlesztési lehetőségek köre széles: Egyrészt fontos lehet olyan formalizmus keresése, mely segítségével nagyobb Hilbert-téren ható legalább négydimenziós degenerált altérrel rendelkező Hamilton-operátorok is könnyen kezelhetők. Az ilyenek lehetőséget nyújtanak két-qubites kvantumkapuk megvalósítására. Az így megvalósítható kvantumkapuk kiszámítása további probléma. Másik irányt jelent a paraméterterbéli görbék bonyolultabb formáinak alkalmazása. Kevert állapotú rendszereken az itt nem tárgyalt Bures-metrika, továbbá holonómiák kiszámítására nyílik lehetőség a (6.39)-ben kapott eredményünk segítségével.

Irodalomjegyzék

- [1] Ingemar Bengtsson, Karol Życzkowski: *Geometry of Quantum States*, Cambridge University Press (Cambridge, 2006).
- [2] Norman Steenrod: *The Topology of Fibre Bundles* (Princeton Mathematical Series) Princeton University Press (Princeton, New Jersey, 1951).
- [3] Mikino Nakahara: *Geometry, Topology and Physics* (Graduate Student Series in Physics) Institute of Physics Publishing Bristol and Philadelphia, 1990.
- [4] Apagyi Barnabás, Lévay Péter: *Válogatott fejezetek a kvantummechanikából, V. fejezet*, Műegyetemi Kiadó (Budapest, 2000).
- [5] A. Bohm, A. Mostafazadeh, H. Koizumi, Q. Niu, J. Zwanziger: *The Geometric Phase in Quantum Systems*, Springer (Berlin 2003).
- [6] Petz Dénes: *Lineáris analízis*, Akadémiai Kiadó, Budapest (2002).
- [7] Szőkefalvi-Nagy Gyula, Gehér László, Nagy Péter: *Differenciálgeometria*, Műszaki Könyvkiadó (Budapest 1979).
- [8] M. A. Nielsen, I. L. Chuang: *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press (2000).
- [9] M. Ericsson: *Geometric and Topological Phases with Applications to Quantum Computation*, Acta Universitatis Upsalensis, (Uppsala 2002).
- [10] A. Ekert, M. Ericsson, P. Hayden, H. Inamori, J. A. Jones, D. Oi, V. Vedral: *Geometric Quantum Computation*, arXiv:quant-ph/0004015v1 (2000).
- [11] Lévay Péter, Nagy Szilvia, Pipek János: *Elementary formula for entanglement entropies of fermionic systems*, Phys. Rev. **A72** 022302 (2005).
- [12] Szalay Szilárd: *Geometriai fázisfaktorok alkalmazása a kvantumszámításban*, (TDK-dolgozat, 2005).
- [13] A. Zee: *Non-Abelian gauge structure in nuclear quadrupole resonance*, Phys. Rev. **A38** 1. 1-6 (1988).
- [14] B. A. Bernevig, S. Zhang: *Holonomic quantum computing based on the Stark effect*, Phys. Rev. **B71** 035303 (2005).
- [15] 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).