Plenum Dichtematrix und verschränkte Zustände

Betrachten Sie ein quantenmechanisches System, welches aus zwei Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen besteht. Mit den Spin-Operatoren $\hat{\mathbf{S}}_i = \frac{\hbar}{2}\left(\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z\right)$ sei der Hamilton-Operator gegeben durch

$$\hat{H} = -\frac{g}{\hbar}\,\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 \tag{1}$$

a) Stellen Sie $\hat{H}$ in der Basis $|J, M\rangle$ des Gesamtdrehimpulses $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$ dar.

In der Basis $|J, M\rangle$ werden die Zustände eines Zweiteilchensystems mithilfe der Quantenzahlen J, M, s_1 und s_2 kodiert. Letztere beiden schreiben wir nicht explizit an, da für alle Zustände $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ gilt. Um den Hamiltonoperator in dieser Basis darstellen zu können, möchten wir ihn also in eine Form bringen, die nur noch Operatoren enthält, deren Wirkung auf die Zustände wir kennen. Dies gelingt uns folgendermaßen:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{J}}^2 &= \left(\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2\right)^2 \\
&= \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2\,\hat{\mathbf{S}}_1\hat{\mathbf{S}}_2 \\
\Rightarrow \hat{\mathbf{S}}_1\hat{\mathbf{S}}_2 &= \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{S}}_1^2 - \hat{\mathbf{S}}_2^2\right)
\end{aligned}$$

Für die Darstellung in der $|J, M\rangle$-Basis müssen wir noch die Basiselemente identifizieren. Derlei gibt es vier, weil jedes einzelne Teilchen zwei verschiedene z-Komponenten des Spins annehmen kann. Für die Länge J des Gesamtspins $\hat{\mathbf{J}}$ gilt:

$$|s_1 - s_2| \leq J \leq s_1 + s_2 \Rightarrow J \in \{0, 1\}$$

Darüber hinaus wissen wir für die z-Projektion $\hat{J}_z$ des Gesamtspins:

$$-J \leq J_z \leq J$$

Somit haben wir für $J = 0$ nur die Möglichkeit $J_z = 0$, und für $J = 1$ die drei Möglichkeiten $J_z = -1, 0, 1$. Unsere Basis $\mathcal{B}$ lautet somit

$$\mathcal{B} = \{|0,0\rangle\,, |1,1\rangle\,, |1,0\rangle\,, |1,-1\rangle\}$$

Für alle diese Zustände gilt:

$$\hat{\mathbf{S}}_{1,2}\,|J, M\rangle = \hbar^2 s_{1,2}(s_{1,2}+1)\,|J, M\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}\,|J, M\rangle$$

Zudem kennen wir die Wirkung von $\hat{\mathbf{J}}^2$ auf die Zustände:

$$\hat{\mathbf{J}}^2\,|J, M\rangle = \hbar^2 J(J+1)\,|J, M\rangle = \begin{cases} 0, & J = 0 \\ 2\hbar^2\,|1, M\rangle\,, & J = 1 \end{cases}$$

Somit können wir den Hamiltonian in Matrixform bezüglich der Basis $\mathcal{B}$ (mit den Basiselementen in der Reihenfolge wie oben) schreiben als

$$\hat{H}_{J,M} = -\frac{g\hbar^2}{2\hbar}\begin{pmatrix} 0-\frac{3}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2-\frac{3}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2-\frac{3}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2-\frac{3}{2} \end{pmatrix} = -\frac{g\hbar}{4}\begin{pmatrix} -3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

---

b) Das System befinde sich zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand $|\psi(t=0)\rangle = |\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 =: |\uparrow\downarrow\rangle$. Berechnen Sie die Wellenfunktion $|\psi(t)\rangle$ für $t > 0$.

Der große Vorteil an der Darstellung aus **a)** ist, dass der Hamiltonoperator bereits diagonal ist und seine Eigenwerte somit einfach abgelesen werden können. Wir wollen also den gegebenen Zustand in der Gesamtdrehimpulsbasis darstellen. Für die Umrechnung zwischen den beiden Basen könnten wir eine vorgefertigte Tabelle mit Clebsch-Gordan-Koeffizienten verwenden. Hier allerdings wollen wir diese explizit herleiten.

Für gegebenes J gibt es $2J+1$ Zustände mit jeweils unterschiedlichem M, die ein sogenanntes Multiplet formen. Der Zustand mit dem höchsten M dieser Multipletts ist jeweils eindeutig. Beispielsweise kann der Zustand $|1,1\rangle$ nur durch $m_{s_1} = m_{s_2} = \frac{1}{2}$, also durch den Zustand $|\uparrow\uparrow\rangle$, bewerkstelligt werden. Wir wissen also:

$$|1,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$$

Die anderen Zustände aus dem Multiplett erhalten wir durch anwenden des Absteigeoperators

$$\hat{J}_- := \hat{J}_-^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)} + \mathbb{1}^{(1)} \otimes \hat{J}_-^{(2)}$$

Außerdem wissen wir, dass der Absteiger des Gesamtdrehimpulses die Quantenzahl M um eins erniedrigt (neben der Multiplikation mit einem irrelevanten Faktor):

$$\hat{J}_- |J,M\rangle \propto |J,M-1\rangle$$

Somit gilt:

$$\begin{aligned} \hat{J}_- |1,1\rangle = \hat{J}_- |\uparrow\uparrow\rangle &\propto |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \\ &\propto |1,0\rangle \end{aligned}$$

und mit Normierung:

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

Der Zustand mit $M = -1$ ist wieder eindeutig (aus den gleichen Argumenten wie schon $M = 1$):

$$|1,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$$

Der vierte Zustand ist nun der mit $J = 0, M = 0$. Es ist klar, dass er eine Linearkombination aus den Zuständen $|\uparrow\downarrow\rangle$ und $|\downarrow\uparrow\rangle$ sein muss:

$$|0,0\rangle = a\,|\uparrow\downarrow\rangle + b\,|\downarrow\uparrow\rangle$$

Die Koeffizienten bestimmen wir über die Forderung, dass der Zustand normal auf die anderen sein soll. Zu $|1,1\rangle$ und $|1,-1\rangle$ ist er das trivialerweise, und durch die Orthogonalitätsbedingung zum Zustand $|1,0\rangle$ erhalten wir

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

Es ist also klar ersichtlich, dass der Zustand $|\uparrow\downarrow\rangle$ dargestellt werden kann als

$$|\uparrow\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,0\rangle + |0,0\rangle\right)$$

Für seine Zeitentwicklung versehen wir jeden Zustand mit seinem eigenen Phasenfaktor:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,0\rangle\, e^{igt/4} + |0,0\rangle\, e^{-3igt/4}\right)$$

---

c) Ein Zustand $|\phi\rangle$ eines aus zwei (oder mehreren) Teilsystemen bestehenden Gesamtsystems wird als *verschränkt* bezeichnet, wenn er sich *nicht* als direktes Produkt von Zuständen $|\phi\rangle_1$ und $|\phi\rangle_2$ der Teilsysteme 1 und 2 schreiben lässt, d.h. es existieren keine $|\phi\rangle_1$ und $|\phi\rangle_2$, sodass $|\phi\rangle = |\phi\rangle_1 \otimes |\phi\rangle_2$.

Zu welchen Zeiten $t \geq 0$ ist der Zustand $|\psi(t)\rangle$ aus **b)** nicht verschränkt?

Herangehensweise 1: Direktes Betrachten des Zustands

Eine Möglichkeit für das Überprüfen der Verschränktheit ist es, den zeitentwickelten Zustand direkt zu betrachten. Wir übersetzen diesen zunächst wieder in die Produktbasis der Einzelspins, da nur hier die Anschreibbarkeit als Produkt direkt ersichtlich ist. Mit der oben gefundenen Transformation gilt:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}\left[\left(e^{igt/4} + e^{-3igt/4}\right)|\uparrow\downarrow\rangle + \left(e^{igt/4} - e^{-3igt/4}\right)|\downarrow\uparrow\rangle\right]$$

Dieser Zustand ist genau dann als Produktzustand anschreibbar und somit nicht verschränkt, wenn einer der beiden Koeffizienten verschwindet. Von der ersten Klammer erhalten wir:

$$-e^{igt/4} = e^{-3igt/4} \Rightarrow e^{-igt} = -1 \Rightarrow \cos(gt) - i\sin(gt) = -1$$

Hier geben Real- und Imaginärteil jeweils eine Bedingung, die durch die gleiche Lösung erfüllt werden:

$$t = \frac{(2n-1)\pi}{g}, \quad n \in \mathbb{N}$$

Die zweite Klammer ergibt

$$e^{igt/4} = e^{-3igt/4} \Rightarrow e^{-igt} = 1 \Rightarrow \cos(gt) - i\sin(gt) = 1$$

Dies liefert die Bedingung

$$t = \frac{2\pi n}{g}, \quad n \in \mathbb{N}$$

Kombiniert man die beiden Bedingungen, so ist also der Zustand $|\psi(t)\rangle$ zu allen Zeiten

$$t = \frac{n\pi}{g}, \quad n \in \mathbb{N}$$

nicht verschränkt.

Herangehensweise 2: Berechnen der Teilspur der Dichtematrix

Wir betrachten zunächst die Dichtematrix, die auf den ersten Blick nichts mit unserer Problemstellung zu tun hat. Wir werden jedoch zeigen können, dass die Verschränktheit der Teilchen äquivalent dazu ist, dass die reduzierten Dichtematrizen keine reinen Zustände beschreiben.

Seien die Zustände $|i\rangle_1$ bzw. $|i\rangle_2$ die Einteilchenbasiszustände der Teilchen 1 und 2. Dann können wir einen allgemeinen Zustand $|\phi\rangle$ schreiben als

$$|\phi\rangle = \sum_{i,j} a_{ij} \, |i\rangle_1 \otimes |j\rangle_2 \,,$$

wobei $A := (a_{ij} \in \mathbb{C}^{q \times p}$. Nun bilden wir die Teilspur der daraus resultierenden Dichtematrix über das Subsystem 1:

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_2 &= \mathrm{Tr}_1 \, \hat{\rho} \\
&= \sum_i \langle i|_1 \left(\sum_{j,k} a_{jk} \, |j\rangle_1 \otimes |k\rangle_2 \right) \left(\sum_{l,m} a^*_{lm} \, \langle l|_1 \otimes \langle m|_2 \right) |i\rangle_1 \\
&= \sum_{\substack{i,j,k \\ l,m}} \delta_{ij} \, \delta_{il} \, a_{jk} \, a^*_{lm} \, |k\rangle_2 \, \langle m|_2 \\
&= \sum_{i,j,k} a_{ij} \, a^*_{ik} \, |j\rangle_2 \, \langle k|_2
\end{aligned}$$

Die reduzierte Dichtematrix in Matrixschreibweise ist also gegeben über

$$\hat{\rho}_2 = AA^\dagger$$

Beschreibt die reduzierte Dichtematrix einen reinen Zustand, so muss also $\mathrm{rk}(AA^\dagger) = 1$ sein. Wir werden im folgenden zeigen, dass dies äquivalent zu $\mathrm{rk}(A) = 1$ und dazu, dass $|\phi\rangle$ als Produktzustand angeschrieben werden kann, ist. Hierfür betrachten wir zunächst den Kern von $AA^\dagger$. Dieser ist definiert als die Menge aller Vektoren x, die von $AA^\dagger$ auf 0 abgebildet werden:

$$\ker(AA^\dagger) = \left\{ x \in \mathbb{C}^p : AA^\dagger x = 0 \right\}$$

Nun gilt:

$$AA^\dagger x = 0 \Rightarrow x^\dagger AA^\dagger x = 0 \Rightarrow (A^\dagger x)^\dagger A^\dagger x = 0 \Rightarrow A^\dagger x = 0$$

Die Umkehrung $A^\dagger x = 0 \Rightarrow AA^\dagger x = 0$ gilt trivialerweise. Daher ist aber auch die Menge aller von $AA^\dagger$ bzw. $A^\dagger$ auf 0 abgebildeten x gleich groß:

$$\ker(AA^\dagger) = \ker(A^\dagger) \Rightarrow \dim(\ker(AA^\dagger)) = q - \mathrm{rk}(AA^\dagger) = \dim(\ker(A^\dagger)) = q - \mathrm{rk}(A^\dagger) = q - \mathrm{rk}(A)$$

und somit gilt:

$$\mathrm{rk}(AA^\dagger) = 1 \Leftrightarrow \mathrm{rk}(A) = 1$$

In einer Matrix von Rang 1 sind nun aber alle Spalten ein Vielfaches voneinander, das heißt wir können A schreiben als

$$A = \begin{pmatrix} c_1\mathbf{b} & c_2\mathbf{b} & \dots & c_q\mathbf{b} \end{pmatrix} = \mathbf{b}\mathbf{c}^T$$

wobei $\mathbf{b} \in \mathbb{C}^p$, $\mathbf{c} \in \mathbb{C}^q$. Umgekehrt ist sicher jedes äußere Produkt von Rang 1, da ja eben alle Spalten Vielfache voneinander sind. Somit haben wir gefunden:

$$\hat{\rho}_2 \text{ rein} \Leftrightarrow a_{ij} = b_i c_j$$

Dann gilt für den Zustand $|\phi\rangle$:

$$|\phi\rangle = \sum_{i,j} a_{ij} |i\rangle_1 \otimes |j\rangle_2 = \sum_{i,j} b_i c_j |i\rangle_1 \otimes |j\rangle_2 = \left(\sum_i b_i |i\rangle_1\right) \otimes \left(\sum_j c_j |j\rangle_2\right),$$

das heißt der Zustand lässt sich als Produktzustand schreiben. Somit haben wir gezeigt, dass ein Zweizustandsystem dann und nur dann nicht verschränkt ist, wenn seine reduzierten Dichtematrizen reine Zustände beschreiben.

Nun können wir unseren Zustand

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}\left[\left(e^{igt/4} + e^{-3igt/4}\right)|\uparrow\downarrow\rangle + \left(e^{igt/4} - e^{-3igt/4}\right)|\downarrow\uparrow\rangle\right]$$

in der Basis

$$\mathcal{B}_{\text{prod}} = \{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$$

anschreiben als

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ e^{igt/4}\left(1 + e^{-igt}\right) \\ e^{igt/4}\left(1 - e^{-igt}\right) \\ 0 \end{pmatrix},$$

und somit ist die Dichtematrix gegeben als

$$
\begin{aligned}
\hat{\rho} &= \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 0 \\ e^{igt/4}\left(1+e^{-igt}\right) \\ e^{igt/4}\left(1-e^{-igt}\right) \\ 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & e^{-igt/4}\left(1+e^{igt}\right) & e^{-igt/4}\left(1-e^{igt}\right) & 0 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (1+e^{-igt})(1+e^{igt}) & (1+e^{-igt})(1-e^{igt}) & 0 \\ 0 & (1-e^{-igt})(1+e^{igt}) & (1-e^{-igt})(1-e^{igt}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+\cos(gt) & -i\sin(gt) & 0 \\ 0 & i\sin(gt) & 1-\cos(gt) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\left[(1+\cos(gt))\left|\uparrow\downarrow\right\rangle\left\langle\uparrow\downarrow\right| + i\sin(gt)\left(\left|\downarrow\uparrow\right\rangle\left\langle\uparrow\downarrow\right| - \left|\uparrow\downarrow\right\rangle\left\langle\downarrow\uparrow\right|\right) + (1-\cos(gt))\left|\downarrow\uparrow\right\rangle\left\langle\downarrow\uparrow\right|\right]
\end{aligned}
$$

Für die Teilspur über das zweite System gilt nun:

$$
\begin{aligned}
\hat{\rho}_1 &= \mathrm{Tr}_2(\hat{\rho}) \\
&= \left\langle\uparrow\right|_2 \hat{\rho} \left|\uparrow\right\rangle_2 + \left\langle\downarrow\right|_2 \hat{\rho} \left|\downarrow\right\rangle_2 \\
&= \frac{1}{2}\left((1+\cos(gt))\left|\uparrow\right\rangle\left\langle\uparrow\right| + (1-\cos(gt))\left|\downarrow\right\rangle\left\langle\downarrow\right|\right) \\
&= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\cos(gt) & 0 \\ 0 & 1-\cos(gt) \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Diese Matrix kann nur dann Rang 1 haben und somit einen reinen Zustand beschreiben, wenn einer der beiden Einträge verschwindet. Somit finden wir:

$$
\cos(gt) = \pm 1 \Rightarrow t = \frac{n\pi}{g}, \quad n \in \mathbb{N}
$$

---

d) Gekoppelte Spins können auch in Quantencomputern zum Einsatz kommen: Eine Elementare Operation (Quantengatter) ist z.B. das Vertauschen (SWAP) einzelner Qubits. Betrachten Sie das System in der Basis der einzelnen Spins (d.h. Basis $\mathcal{B}_{\text{prod}}$ aus dem vorigen Teilbeispiel). Zeigen Sie, dass für bestimmte Zeiten t^* und bis auf triviale Phasen, die Kopplung der Spins in Glg. (1) das folgende SWAP Gatter realisiert: $\{\left|1\right\rangle, \left|2\right\rangle, \left|3\right\rangle, \left|4\right\rangle\} \xrightarrow{\hat{H}} \{\left|1\right\rangle, \left|3\right\rangle, \left|2\right\rangle, \left|4\right\rangle\}$.

Wir betrachten die Zeitentwicklung der einzelnen Basiszustände. Hierfür übersetzen wir die Produktbasiszustände zunächst in die Gesamtdrehimpulsbasis, lassen die dort triviale Zeitentwicklung wirken, und übersetzen dann wieder in die ursprüngliche Basis zurück. Wir finden mit unseren Ergebnissen aus **b)**:

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar}\left|\uparrow\uparrow\right\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\left|1,1\right\rangle = e^{igt/4}\left|1,1\right\rangle \tag{2}$$

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar}\left|\uparrow\downarrow\right\rangle \overset{\textbf{b)}}{=} \frac{1}{2}\left[\left(e^{igt/4}+e^{-3igt/4}\right)\left|\uparrow\downarrow\right\rangle + \left(e^{igt/4}-e^{-3igt/4}\right)\left|\downarrow\uparrow\right\rangle\right] \tag{3}$$

$$\begin{aligned}
e^{-i\hat{H}t/\hbar}\left|\downarrow\uparrow\right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\hat{H}t/\hbar}(\left|1,0\right\rangle - \left|0,0\right\rangle)\\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|1,0\right\rangle e^{igt/4} - \left|0,0\right\rangle e^{-3igt/4}\right)\\
&= \frac{1}{2}\left[\left(e^{igt/4}-e^{-3igt/4}\right)\left|\uparrow\downarrow\right\rangle + \left(e^{igt/4}+e^{-3igt/4}\right)\left|\downarrow\uparrow\right\rangle\right] \qquad (4)
\end{aligned}$$

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar}\left|\downarrow\downarrow\right\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\left|1,-1\right\rangle = e^{igt/4}\left|1,-1\right\rangle \tag{5}$$

Wie aus Gleichungen (2) und (5) ersichtlich, ändern sich tatsächlich die Zustände $|1\rangle$ und $|4\rangle$ im zeitlichen Verlauf (bis auf Phasen) gar nicht. Wie man in Gleichungen (3) und (4) sieht, bestehen diese aus Linearkombinationen der Zustände $|2\rangle$ und $|3\rangle$, wobei die beiden Zustände jeweils genau gegengleich den gleichen Koeffizienten aufweisen. Verschwindet nun der Koeffizient $e^{igt/4}+e^{-3igt/4}$ vor $|2\rangle$ in Gleichung (3), so wird auch der Koeffizient vor $|3\rangle$ in Gleichung (4) Null. Somit tauschen für diese Zeiten tatsächlich die beiden Zustände platz und das SWAP-Gatter ist realisiert. Die genauen Zeitpunkte kennen wir schon aus Beispiel **c)**:

$$t^* = \frac{(2n-1)\pi}{g}, \quad n \in \mathbb{N}$$