

ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ



ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

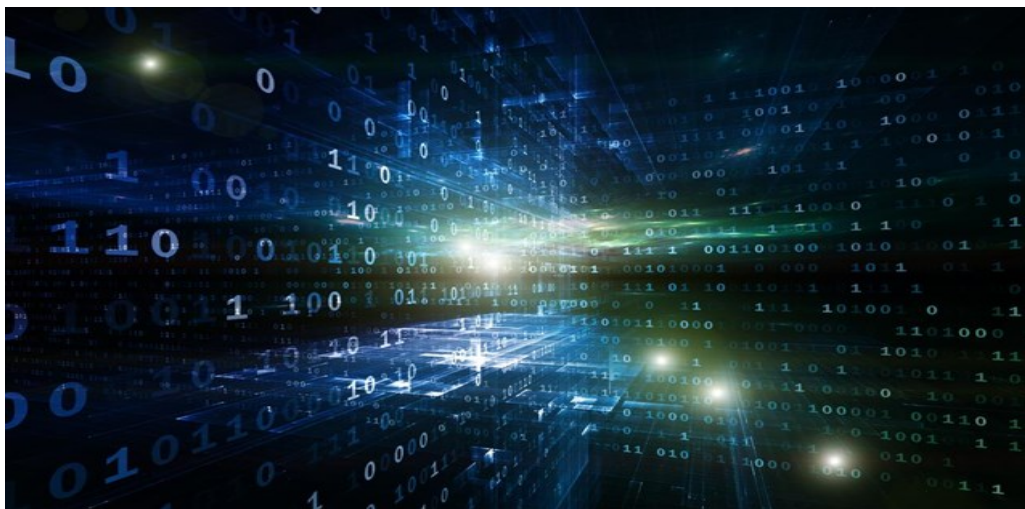
Τέλεια μεταβίβαση καταστάσεων σε κβαντικά καλώδια με τοπικές συμμετρίες

ΣΥΓΓΡΑΦΕΑΣ:

Νίνα Γεωργουλέα

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ:

Φώτιος Διάκονος



ΑΘΗΝΑ, ΙΟΥΝΙΟΣ 2018

**Τέλεια μεταβίβαση καταστάσεων σε κβαντικά καλώδια με
τοπικές συμμετρίες**

Τομέας Φυσικής Στερεάς Κατάστασης

Αθήνα, 2018

Περίληψη

Η διαχείριση της κβαντικής πληροφορίας είναι ένα από τα θεμελιώδη προβλήματα στην προσπάθεια υλοποίησης κβαντικών υπολογιστών. Ένα σημαντικό στάδιο σε αυτή τη διαδικασία είναι η μεταβίβαση πληροφορίας με κβαντικά ‘καλώδια’ που σε ικανοποιητικό βαθμό μπορούν να προσομοιωθούν με αλυσίδες από qubits. Στην παρούσα εργασία μελετήσαμε τη πιστή μεταβίβαση κβαντικών καταστάσεων σε ανοικτές και κλειστές γραμμικές αλυσίδες spin 1/2 που αποτελούν αναπαράσταση των qubits. Θεωρούμε αλληλεπιδράσεις πρώτων γειτόνων χωρίς την εφαρμογή κάποιου εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Επίσης αγνοούμε την αλληλεπίδραση του συστήματος με το περιβάλλον. Προσδιορίζεται αριθμητικά για ποιες μεταβάσεις μπορεί να γίνει τέλεια μεταβίβαση των καταστάσεων και για ποιες όχι μέσω της μεθόδου ελαχιστοποίησης Nelder-Mead. Ερμηνεύοντας τα αποτελέσματα της ελαχιστοποίησης προσδιορίζουμε ορισμένα κριτήρια που πρέπει να ικανοποιούνται για να γίνεται τέλεια μεταβίβαση κβαντικών καταστάσεων και στους δύο τύπους αλυσίδων spin. Ειδικότερα οι βέλτιστες λύσεις παρουσιάζουν συχνά τοπικά συμμετρικές σταθερές ζεύξης. Έτσι αναδεικνύεται ο ρόλος των τοπικών συμμετριών στην τέλεια μεταβίβαση κβαντικών καταστάσεων αλλά η βαθύτερη κατανόησή του απαιτεί περαιτέρω μελέτη.

Abstract

The management of quantum information is one of the fundamental problems in the implementation of quantum computers. An important stage in this process is the transfer of information in quantum 'wires' that can be simulated with chains of qubits. In this work we studied the perfect transfer of a quantum state in open and closed linear chains of $1/2$ -spins representing the qubits. We consider exclusively first neighbor interactions without external magnetic field. We also ignore the interaction of the system with the environment. Numerically it is determined when a perfect state transfer is possible, employing the Nelder-Mead minimization method. Interpreting the minimization results, we obtain some strict conditions for perfect transfer of quantum states in both spin chain types. Optimal solutions usually possess locally symmetric hopping elements. This highlights the role of local symmetries in the perfect transfer of quantum states, however its deeper understanding requires further study.

Περιεχόμενα

Εισαγωγή	1
1 Στοιχεία θεωρίας για την μεταβίβαση κβαντικών καταστάσεων	5
1.1 Τα αξιώματα της κβαντικής μηχανικής	5
1.2 Η έννοια των bits και των qubits	7
1.3 Μήτρες πυκνότητας και κβαντική σύμπλεξη	7
1.4 Πιστότητα μεταβίβασης κβαντικών καταστάσεων	9
1.5 Σφαίρα του Bloch	10
1.6 Αλυσίδες spin και βάσεις καταστάσεων	11
2 Μελέτη της τέλει μεταβίβασης των καταστάσεων σε αλυσίδες spin από την πρώτη στην τελευταία θέση	15
2.1 Μελέτη της πλήρους μεταβίβασης των κβαντικών καταστάσεων σε αλυσίδα spin σύμφωνα με τον Bose	15
2.2 Πλήρης μεταβίβαση καταστάσεων σε κατοπτρικά συμμετρική αλυσίδα spin	21
2.3 Πλήρης μεταβίβαση των καταστάσεων με αλληλεπιδράσεις των spins πέρα από τους πρώτους γείτονες	25
3 Μελέτη της πλήρους μεταβίβασης των καταστάσεων σε τυχαίες θέσεις των γραμμικών αλυσίδων spin με τη μέθοδο Nelder-Mead	29
3.1 Μέθοδος Nelder-Mead	29
3.2 Πλήρης μεταβίβαση των καταστάσεων σε ανοικτές αλυσίδες spin	32
3.3 Πλήρης μεταβίβαση των καταστάσεων σε κλειστές αλυσίδες spin	43
3.4 Εφαρμογές των αλυσίδων spin	52
4 Επίλογος	53
Βιβλιογραφία	55

Εισαγωγή

Η θεωρία της πληροφορίας προτάθηκε από τον Shannon το 1948 και επεκτάθηκε στον κβαντικό κόσμο από τον Feynmann το 1980 με την υπόθεση ότι η κβαντική μηχανική χρησιμεύει για την επεξεργασία και τη μεταβίβαση της πληροφορίας [1]. Έχει δειχθεί ότι με την κωδικοποίηση της πληροφορίας σε κβαντικά συστήματα υπάρχουν πολλά πλεονεκτήματα στα πρωτόκολλα επικοινωνίας. Με τον όρο “πρωτόκολλο επικοινωνίας” ορίζεται ένα σύστημα κανόνων που επιτρέπουν τη μεταβίβαση της πληροφορίας μέσω οποιασδήποτε μεταβολής μιας φυσικής ποσότητας. Ο Feynmann πρότεινε ότι ο κβαντικός υπολογιστής είναι ιδανικός για την προσομοίωση κβαντομηχανικών συστημάτων, κάτι το οποίο είναι αδύνατο με τη χρησιμοποίηση των κλασσικών υπολογιστών. Η λειτουργία των κβαντικών υπολογιστών είναι βασισμένη στην κβαντική πληροφορία. Οι προοπτικές της κβαντικής διαχείρισης της πληροφορίας που μπορούν να οδηγήσουν σε συγκεκριμένες ελπιδοφόρες εφαρμογές, την κατέστησαν ένα πολύ ελκυστικό πεδίο έρευνας. Τα πρώτα πειράματα για την κβαντική επικοινωνία πραγματοποιήθηκαν πριν από περίπου 30 χρόνια και από τότε έχουν αναπτυχθεί και πραγματοποιηθεί πολλά πρωτόκολλα για αυτή.

Σύμφωνα με το νόμο του Moore [2] ο αριθμός των τρανζίστορ ανά τετραγωνική ίντσα, από τα οποία αποτελούνται οι λογικές πύλες στα ολοκληρωμένα κυκλώματα, διπλασιάζεται κάθε χρόνο και προβλέπεται ότι αυτό θα συνεχιστεί και στο μέλλον. Ωστόσο, ο ρυθμός έχει επιβραδυνθεί και ο αριθμός των τρανζίστορ διπλασιάζεται πλέον κάθε 18 μήνες και αυτό χρησιμοποιείται ως ο σημερινός νόμος του Moore. Ακόμη και έτσι όμως ο νόμος αυτός οδηγεί σε εκθετική αύξησή τους. Μια άλλη ερμηνεία του νόμου του Moore είναι ότι οι υπολογιστές γίνονται όλο και πιο μικροί και η υπολογιστική τους ισχύ όλο και πιο μεγάλη, καθώς τα τρανζίστορ στα ολοκληρωμένα κυκλώματα γίνονται πιο αποτελεσματικά με την πάροδο του χρόνου. Λόγω της ελάττωσης της χωρικής διάστασης των τρανζίστορ επέρχεται κάποια στιγμή (εφόσον τα τρανζίστορ είναι τόσο μικροσκοπικά) η ανάγκη για την κβαντική περιγραφή τους. Όμως σε αυτή τη περίπτωση όλη η διαδικασία διαχείρισης της πληροφορίας πρέπει να γίνει με βάση τους νόμους της Κβαντικής Μηχανικής. Επομένως η αντιπαράθεση μας με την Κβαντική Πληροφορία γίνεται αναγκαία. Επί πλέον αναμένεται ότι οι κβαντικοί υπολογιστές θα υλοποιούν πιο γρήγορα τους υπολογισμούς και ειδικότερα αυτούς που αφορούν τα κβαντικά προβλήματα. Τέλος, διαπιστώθηκε ότι οι κβαντικοί υπολογιστές μπορούν να καταναλώσουν λιγότερη ενέργεια για κάθε μία λειτουργία σε σχέση με τους κλασσικούς, οπότε είναι ενεργειακά προτιμητέοι [3].

Στην κβαντική επικοινωνία η πληροφορία μεταβιβάζεται με τη βοήθεια συστημάτων - όπως τα άτομα, τα φωτόνια και τα spins που αποτελούν τα λεγόμενα “qubits” [4]. Αυτά είναι υπεύθυνα για την μεταβίβαση της πληροφορίας και συμπεριφέρονται σύμφωνα με τις αρχές της Κβαντικής Μηχανικής. Υπάρχουν πολλά συστήματα που αποτελούν υλοποίηση από qubits και τα πιο γνωστά από αυτά είναι τα εξής [5]:

- Δισταθμικά άτομα καθώς και άτομα με περισσότερες στάθμες όταν μπορούν να χρησιμοποιηθούν μόνο δύο από αυτές.
- Ιόντα με δύο ενεργειακά επίπεδα.
- Πολωμένα σωματίδια με $\text{spin } \frac{1}{2}$.
- Μεμονωμένα πολωμένα φωτόνια.
- Κβαντικές τελείες.
- Τρόποι του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου σε μία κοιλότητα συντονιστή.

Σε συστήματα μικρής κλίμακας τα qubits αλληλεπιδρούν μεταξύ τους είτε άμεσα είτε έμμεσα. Η διάδοση της κβαντικής πληροφορίας γίνεται μέσω μιας σειράς ανταλλαγών. Οι κβαντικές καταστάσεις μεταφέρονται με τη βοήθεια ενός καναλιού επικοινωνίας, χρησιμοποιώντας τη δυναμική της αντίστοιχης Χαμιλτονιανής. Στη συνέχεια η διαδιδόμενη πληροφορία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να υλοποιηθούν μία σειρά από εφαρμογές όπως η εκτέλεση συγκεκριμένων υπολογισμών στους κβαντικούς υπολογιστές, η (απο)κρυπτογράφηση μηνυμάτων στη κβαντική κρυπτογραφία ή η μεταβίβαση πληροφορίας σε απομακρυσμένες θέσεις με τη βοήθεια της σύμπλεξης στη κβαντική τηλεμεταφορά. Ύστερα, θα εστιάσουμε στους κβαντικούς υπολογιστές. Ένας κβαντικός υπολογιστής περιέχει κβαντικούς επεξεργαστές που αποτελούνται από πολλά qubits και των οποίων η εξέλιξη μπορεί να ελεγχθεί. Αντίστοιχα, ένας κβαντικός υπολογισμός που λαμβάνει χώρα σε αυτόν είναι ένας μοναδιακός μετασχηματισμός που δρα σε καταστάσεις πολλών qubits. Η ισχύς των κβαντικών υπολογιστών βασίζεται στους θεμελιώδεις κβαντικούς νόμους, όπως η αρχή της κβαντικής υπέρθεσης και η σύμπλεξη. Η σύμπλεξη αποτελεί σημαντικό κομμάτι πολλών πρωτοκόλλων κβαντικής πληροφορίας. Παρατηρείται στα σύνθετα κβαντικά συστήματα και δηλώνει την ύπαρξη μη τοπικών συσχετισμών μεταξύ των μετρήσεων που γίνονται σε ξεχωριστά σωματίδια. Όμως και στους κβαντικούς υπολογιστές γίνονται λάθη που να μειώνουν την απόδοσή του. Για αυτά τα λάθη οφείλονται η αναπόφευκτη αλληλεπίδραση του υπολογιστή με το περιβάλλον του, καθώς και η παρουσία ατελειών στο hardware του.

Στην παρούσα μελέτη το ενδιαφέρον επικεντρώθηκε στη μεταβίβαση της πληροφορίας σε αλυσίδες $\text{spin } \frac{1}{2}$. Η μεταβίβαση των καταστάσεων από τη μία θέση στην άλλη μπορεί να είναι πλήρης ή μερική και εδώ εξετάστηκαν μόνο οι περιπτώσεις όπου γίνεται πλήρης μεταβίβαση των καταστάσεων. Έγινε η υπόθεση ότι υπάρχουν αλληλεπιδράσεις μόνο μεταξύ των πρώτων γειτόνων των spins. Για πολλές μεταφορές εμφανίζονται τοπικές συμμετρίες στις συζεύξεις μεταξύ των spins. Η συμμετρία είναι ένας μετασχηματισμός που όταν εφαρμόζεται αφήνει το σύστημα αναλλοίωτο. Ακόμα, το σύστημα που εξετάστηκε είναι θεωρητικά κλειστό, δηλαδή είναι τέλεια απομονωμένο από το περιβάλλον, οπότε δεν υπάρχει ανταλλαγή ενέργειας και πληροφορίας με αυτό. Στη φύση όλα τα πραγματικά συστήματα είναι ανοικτά που σημαίνει ότι είναι ατελώς απομονωμένα και συνεπώς ανταλλάσσουν ενέργεια με τα υπόλοιπα συστήματα. Επίσης, για ευκολία στους υπολογισμούς έχει μηδενιστεί το μαγνητικό πεδίο, οπότε δεν υπάρχουν διαγώνιοι όροι στη Χαμιλτονιανή των αντίστοιχων συστημάτων, καθώς επίσης και το spin του οποίου η κατάσταση πρόκειται να μεταφερθεί είναι κατακόρυφα προσανατολισμένο.

Στη συνέχεια η εργασία οργανώνεται ως εξής: Στο Κεφάλαιο 1 υπάρχουν πολλά σημαντικά στοιχεία θεωρίας για την κατανόηση των μηχανισμών της μεταβίβασης των καταστάσεων και της κβαντικής πληροφορίας γενικότερα. Στο Κεφάλαιο 2 αναλύεται η εξέλιξη της μεταβίβασης των καταστάσεων από τον Bose μέχρι και σήμερα. Στο Κεφάλαιο 3 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της έρευνας που έγινε για τη μεταβίβαση των κβαντικών καταστάσεων σε γραμμικές

αλυσίδες spin όταν αυτές είναι i) ανοικτές και ii) κλειστές. Επίσης, αναφέρονται οι εφαρμογές που έχουν αυτές στην τεχνολογία. Τέλος, στο Κεφάλαιο 4 συνοψίζονται τα αποτελέσματα της έρευνας και παρουσιάζονται προτάσεις για περαιτέρω μελέτη αυτών. Είναι σημαντικό να επισημανθεί σε όλο το κείμενο έχει χρησιμοποιηθεί το σύστημα μονάδων όπου $\hbar = 1$.

Κεφάλαιο 1

Στοιχεία θεωρίας για την μεταβίβαση κβαντικών καταστάσεων

Στο Κεφάλαιο 1 αναφέρονται τα βασικά στοιχεία της κβαντικής θεωρίας που είναι απαραίτητα για την κατανόηση της μεταβίβασης καταστάσεων σε αλυσίδες spin. Στην ενότητα 1.1 αναλύονται τα πέντε αξιώματα της κβαντομηχανικής για τα κλειστά συστήματα στα οποία βασίζεται η μεταβίβαση της κβαντικής πληροφορίας. Στην ενότητα 1.2 εξηγείται τι είναι το bit για την κλασσική πληροφορία και το qubit για την κβαντική, στην ενότητα 1.3 ορίζονται οι μήτρες πυκνότητας και η κβαντική σύμπλεξη για τα σύνθετα συστήματα και στην ενότητα 1.4 ποσοτικοποιείται η ποιότητα της μεταβίβασης των καταστάσεων με την εισαγωγή της έννοιας της πιστότητας. Ακόμα, στην ενότητα 1.5 ορίζεται η σφαίρα του Bloch και εξηγείται πως αναπαριστάται η κατάσταση ενός qubit σε αυτήν και τέλος στην ενότητα 1.6 εξηγείται η δομή της αλυσίδας spin και αναφέρονται οι βάσεις των καταστάσεων που χρησιμοποιούνται.

1.1 Τα αξιώματα της κβαντικής μηχανικής

Οι αρχές της κβαντικής μηχανικής εφαρμόζονται στην κβαντική πληροφορία και αποτελούν το μαθηματικό πλαίσιο για την περιγραφή του φυσικού κόσμου [6]. Για τα κλειστά συστήματα το πλαίσιο αυτό καθορίζεται με τον ορισμό πέντε αξιωμάτων (axioms), τα οποία προσδιορίζουν την αναπαράσταση των καταστάσεων, των παρατηρήσεων, των μετρήσεων και της δυναμικής, καθώς επίσης και τον τρόπο συνδυασμού δύο συστημάτων για τον σχηματισμό ενός σύνθετου συστήματος. Επομένως, τα πέντε αυτά αξιώματα αποτελούν μία πλήρη μαθηματική διατύπωση της κβαντικής μηχανικής.

Αξίωμα 1: Καταστάσεις. Η κατάσταση (state) είναι μια πλήρης περιγραφή του φυσικού συστήματος και στην κβαντική μηχανική αποτελεί μία “ακτίνα” του χώρου Hilbert. Με τον όρο “ακτίνα” εννοείται μία ισοδύναμη κλάση διανυσμάτων, τα οποία διαφέρουν μεταξύ τους λόγω πολλαπλασιασμού με ένα μη μηδενικό μιγαδικό μέγεθος. Για κάθε μη μηδενική ακτίνα μπορεί με σύμβαση να επιλεγθεί μία αντιπροσωπευτική τάξη και να δηλωθεί με $|\psi\rangle$, η οποία είναι κανονικοποιημένη:

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1. \quad (1.1)$$

Έτσι, οι καταστάσεις αντιστοιχούν στα κανονικοποιημένα διανύσματα και η συνολική φάση του διανύσματος δεν έχει φυσική σημασία. Οπότε, οι $|\psi\rangle$ και $e^{ia}|\psi\rangle$ περιγράφουν την ίδια κατά-

σταση, με $|e^{ia}| = 1$. Επειδή κάθε ακτίνα αντιστοιχεί σε μία δυνατή κατάσταση, για δύο τυχαίες καταστάσεις $|\phi\rangle, |\psi\rangle$, μπορεί μία άλλη κατάσταση να είναι γραμμικός συνδυασμός αυτών των δύο:

$$a|\phi\rangle + b|\psi\rangle. \quad (1.2)$$

Ο χώρος Hilbert είναι ένας διανυσματικός χώρος στους μιγαδικούς αριθμούς και τα διανύσματα του γράφονται στη μορφή $|\psi\rangle$, σύμφωνα με το συμβολισμό του Dirac. Επίσης, στο χώρο Hilbert το εσωτερικό γινόμενο δύο καταστάσεων είναι πάντα θετικό για μη μηδενικές καταστάσεις, ισχύει η γραμμικότητα, καθώς επίσης και η συμμετρία αντιστροφής. Τέλος, ο χώρος Hilbert είναι πλήρης στη νόρμα $||\psi|| = \langle\psi|\psi\rangle^{1/2}$.

Αξίωμα 2: Παρατηρήσιμο μέγεθος. Το παρατηρήσιμο μέγεθος (observable) είναι μία ιδιότητα του φυσικού συστήματος που μπορεί να μετρηθεί. Στην κβαντική μηχανική το παρατηρήσιμο μέγεθος είναι ένας ερμητιανός τελεστής. Ένας τελεστής A είναι ερμητιανός αν $A = A^\dagger$, που αυτό σημαίνει ότι $\langle\phi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A|\phi\rangle^*$ για όλα τα διανύσματα $|\phi\rangle$ και $|\psi\rangle$. Όλοι οι τελεστές σε αυτή την εργασία για να διαχωρίζονται από τα υπόλοιπα μεγέθη είναι γραμμένοι με έντονα γράμματα.

Αξίωμα 3. Μέτρηση. Η μέτρηση (measurement) είναι μία διαδικασία στην οποία η πληροφορία για την κατάσταση του συστήματος δίνεται στον παρατηρητή. Στην κβαντική μηχανική η μέτρηση του παρατηρήσιμου μεγέθους A προβάλλει σε μία ιδιοκατάστασή του και ο παρατηρητής μαθαίνει έτσι την τιμή της αντίστοιχης ιδιοτιμής. Εάν η κβαντική κατάσταση ακριβώς πριν από τη μέτρηση είναι $|\psi\rangle$, τότε το αποτέλεσμα a_n λαμβάνεται με a priori πιθανότητα.

Αξίωμα 4. Δυναμική. Η δυναμική (dynamics) περιγράφει πως εξελίσσονται οι καταστάσεις με το χρόνο. Στην κβαντική μηχανική η χρονική εξέλιξη ενός κλειστού συστήματος περιγράφεται από ένα μοναδιακό τελεστή U . Αυτός έχει την ιδιότητα $U^\dagger U = 1$ και γράφεται $U(t', t) = e^{-i(t'-t)H}$, όπου t η αρχική χρονική στιγμή και t' η τελική χρονική στιγμή, ενώ H είναι η Χαμιλτονιανή του συστήματος που εδώ θεωρείται ανεξάρτητη του χρόνου.

Αξίωμα 5. Σύνθετα συστήματα. Εάν ο χώρος Hilbert ενός συστήματος A είναι H_A και ο χώρος Hilbert ενός συστήματος B είναι H_B , τότε ο χώρος Hilbert του συστήματος AB είναι το τανυστικό γινόμενο $H_A \otimes H_B$. Αν το σύστημα A είναι στην κατάσταση $|\psi\rangle_A$ και το σύστημα B στην κατάσταση $|\psi\rangle_B$, τότε η κατάσταση του σύνθετου συστήματος (composite system) είναι το γινόμενο $|\psi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B$. Αν $|i\rangle_A$ είναι η ορθοκανονική βάση για το H_A και $|\mu\rangle_B$ βάση για το H_B , τότε οι καταστάσεις $|i, \mu\rangle_{AB} \equiv |i\rangle_A \otimes |\mu\rangle_B$ είναι βάση για το $H_A \otimes H_B$, με την ιδιότητα:

$${}_{AB}\langle i, \mu | j, \nu \rangle_{AB} = \delta_{ij} \delta_{\mu\nu} \quad (1.3)$$

Ο τελεστής $M_A \otimes N_B$ εφαρμόζει το M_A στο σύστημα A και το N_B στο σύστημα B . Η δράση του στην ορθοκανονική βάση $|i, \mu\rangle_{AB}$ είναι:

$$M_A \otimes N_B |i, \mu\rangle_B = \sum_{j, \nu} |j, \nu\rangle_{AB} (M_A)_{ji} (N_B)_{\nu\mu}. \quad (1.4)$$

Ένας τελεστής που δρα τετριμμένα στο σύστημα B είναι ο εξής: $M_A \otimes I_B$, όπου I_B είναι ο ταυτοτικός τελεστής στον H_B και ένας τελεστής που δρα τετριμμένα στο σύστημα A είναι ο $I_A \otimes N_B$.

1.2 Η έννοια των bits και των qubits

Η αδιαίρετη μονάδα της κλασσικής πληροφορίας είναι το “bit”, το οποίο μπορεί να πάρει μία από τις δύο δυνατές τιμές $\{0, 1\}$ [6]. Η αντίστοιχη μονάδα της κβαντικής πληροφορίας ονομάζεται “quantum bit” ή για συντομογραφία “qubit”. Ο μικρότερος μη τετριμμένος χώρος Hilbert είναι δισδιάστατος και μπορεί να ορισθεί μία ορθοκανονική βάση για αυτόν, η εξής: $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, που αναπαριστούν τη θεμελιώδη και τη διεγερμένη κατάσταση ενός συστήματος αντίστοιχα. Η πιο γενική κατάσταση ενός qubit είναι:

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle, \quad (1.5)$$

όπου a και b είναι οι μιγαδικοί αριθμοί που ικανοποιούν την εξίσωση $|a|^2 + |b|^2 = 1$, επειδή η κατάσταση $|\psi\rangle$ είναι κανονικοποιημένη. Αυτή είναι ιδιότητα της κβαντικής μηχανικής και ονομάζεται κβαντική υπέρθεση. Το qubit δηλαδή αποτελεί το κβαντικό σύστημα που περιγράφεται από το δισδιάστατο χώρο Hilbert. Στην εξίσωση 1.5 παρατηρείται η κβαντική υπέρθεση, διότι οι δύο κβαντικές καταστάσεις προστίθενται μεταξύ τους έτσι ώστε να συνυπάρχουν ταυτόχρονα.

Μπορεί να γίνει μία μέτρηση που να προβάλλει το qubit στη βάση $\{|0\rangle, |1\rangle\}$. Σε αυτή την περίπτωση το αποτέλεσμα είναι $|0\rangle$ με πιθανότητα $|a|^2$ ή $|1\rangle$ με πιθανότητα $|b|^2$. Αν η τιμή του qubit είναι αρχικά άγνωστη, τότε δεν υπάρχει κανένας τρόπος να προσδιοριστούν τα a και b με μία μοναδική μέτρηση ή με οποιαδήποτε άλλη πιθανή μέτρηση. Ωστόσο, μετά τη μέτρηση το qubit είναι σε μία γνωστή κατάσταση, είτε $|0\rangle$ είτε $|1\rangle$, η οποία διαφέρει σε γενικές γραμμές από την προηγούμενη κατάσταση. Επομένως, η μέτρηση ενός qubit είναι μία στοχαστική διαδικασία. Έστω ότι δίνεται ένα bit που έχει μία προκαθορισμένη τιμή $\{0, 1\}$ αλλά δεν είναι αρχικά γνωστή. Με βάση αυτή την πληροφορία η πιθανότητα να έχει το bit την τιμή 0 είναι p_0 και για να έχει την τιμή 1 είναι αντίστοιχα p_1 , όπου $p_0 + p_1 = 1$. Όταν μετράται το bit η τιμή του γίνεται γνωστή με απόλυτη σιγουριά. Ένα qubit δηλαδή διαφέρει από ένα bit, επειδή το bit μπορεί να μετρηθεί χωρίς πρόβλημα και να αποκρυπτογραφηθεί όλη η πληροφορία που αυτό κωδικοποιεί, δηλαδή η μέτρηση ενός bit είναι μία ντετερμινιστική διαδικασία. Οπότε υπάρχει μόνο ένας τρόπος εξέτασης του bit, όμως περισσότεροι από ένας για την εξέταση ενός qubit.

1.3 Μήτρες πυκνότητας και κβαντική σύμπλεξη

Τα ανοικτά συστήματα έχουν αρκετές διαφορές σε σχέση με τα κλειστά [6]. Στα ανοικτά συστήματα οι καταστάσεις δεν είναι ακτίνες, οι μετρήσεις δεν είναι ορθογώνιες προβολές και η εξέλιξη των καταστάσεων δεν είναι μοναδιακή. Για την κατανόηση του ανοικτού συστήματος θεωρείται ένα σύστημα με δυάδες από qubits και μπορεί να παρατηρηθεί κάθε φορά μόνο το ένα από τα δύο. Γίνεται η υπόθεση ότι το qubit A μπορεί να το χειριστεί κανείς όπως θέλει, σε αντίθεση με το qubit B. Το συνολικό σύστημα AB υπακούει στα αξιώματα της κβαντικής μηχανικής (Ενότητα 1.1), όμως πρέπει να βρεθεί ένας τρόπος που να αφορά μόνο τις παρατηρήσεις για το qubit A.

Ως ορθοκανονικές βάσεις για τα qubits A και B χρησιμοποιούνται οι βάσεις $\{|0\rangle_A, |1\rangle_A\}$ και $\{|0\rangle_B, |1\rangle_B\}$ αντίστοιχα. Η κβαντική κατάσταση που αποτελείται από δυάδες των qubits είναι η εξής:

$$|\psi\rangle_{AB} = a|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B + b|1\rangle_A \otimes |1\rangle_B. \quad (1.6)$$

Έστω ότι το qubit A προβάλλεται στη βάση $\{|0\rangle_A, |1\rangle_A\}$. Σε αυτή την περίπτωση για να προκύψει το αποτέλεσμα $|0\rangle_A$ η πιθανότητα είναι $|a|^2$ και προετοιμάζει την κατάσταση $|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B$ και για να προκύψει αντίστοιχα το αποτέλεσμα $|1\rangle_B$ η πιθανότητα είναι $|b|^2$ και προετοιμάζει την κατάσταση $|1\rangle_A \otimes |1\rangle_B$. Σε οποιαδήποτε από τις δύο περιπτώσεις μία προκαθορισμένη κατάσταση του qubit B επιλέγεται από τη μέτρηση. Αν στη συνέχεια μετρηθεί το qubit B τότε είναι εγγυημένο ότι θα βρεθεί με πιθανότητα 1 το αποτέλεσμα $|0\rangle_B$ εάν προηγουμένως ήταν $|0\rangle_A$ και το αποτέλεσμα $|1\rangle_B$ στην περίπτωση που προηγουμένως είχε βρεθεί $|1\rangle_A$. Επομένως, τα αποτελέσματα των μετρήσεων στις βάσεις $\{|0\rangle_A, |1\rangle_A\}$ και $\{|0\rangle_B, |1\rangle_B\}$ είναι τέλεια συσχετισμένα στην κατάσταση $|\psi\rangle_{AB}$, άρα είναι συμπλεγμένα (entangled).

Χρειάζεται όμως να εξετασθούν παρατηρήσιμα μεγέθη που να δρουν στο qubit A και το αποτέλεσμα της μέτρησης για το A να είναι ανεξάρτητο από τα αποτελέσματα των μετρήσεων για το qubit B. Ένα παρατηρήσιμο μέγεθος που δρα στο qubit A είναι το εξής:

$$M_A \otimes I_B, \quad (1.7)$$

όπου M_A είναι ο ερμητιανός τελεστής που δρα στο A και I_B είναι ο ταυτοτικός τελεστής που δρα στο B. Η αναμενόμενη τιμή του παρατηρήσιμου μεγέθους για την κατάσταση $|\psi\rangle_{AB}$ είναι:

$$\langle M_A \rangle = |a|^2 \langle 0|M_A|0 \rangle + |b|^2 \langle 1|M_A|1 \rangle \quad (1.8)$$

και υπάρχει ορθογωνιότητα μεταξύ των καταστάσεων $|0\rangle_B$ και $|1\rangle_B$. Η σχέση 1.8 μπορεί να γραφτεί:

$$\langle M_A \rangle = \text{Tr}(M_A \rho_A), \quad (1.9)$$

όπου $\rho_A = |a|^2 |0\rangle\langle 0| + |b|^2 |1\rangle\langle 1|$ και το $\text{Tr}(\cdot)$ δηλώνει το ίχνος του γινομένου των αντίστοιχων τελεστών. Αυτό συμβαίνει διότι το ίχνος έχει τις εξής ιδιότητες:

- $\text{Tr}(\lambda A) = \lambda \text{Tr}(A)$, όπου λ είναι ένας αριθμός.
- $\text{Tr}(A+B) = \text{Tr}(A) + \text{Tr}(B)$.
- $\text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(CAB) = \text{Tr}(BCA)$, δηλαδή είναι αναλλοίωτο στις κυκλικές μεταθέσεις.

Ο τελεστής ρ_A ονομάζεται μήτρα πυκνότητας (density matrix) για το qubit A ή αλλιώς τελεστής πυκνότητας (density operator). Για τη μήτρα πυκνότητας ρ_A ισχύουν τα εξής:

1. Ο τελεστής ρ_A είναι ερμητιανός: $\rho_A = \rho_A^\dagger$.
2. Ο τελεστής ρ_A είναι θετικός και αυτό σημαίνει ότι για κάθε κατάσταση $|\phi\rangle$ είναι:
 $\langle \phi | \rho_A | \phi \rangle \geq 0$.
3. Ισχύει ότι $\text{Tr}(\rho_A) = 1$, επειδή η κατάσταση $|\psi\rangle_{AB}$ είναι κανονικοποιημένη.

Η μήτρα πυκνότητας ρ_A είναι μία δυνατή αναπαράσταση της κατάστασης του συστήματος A. Επειδή η μέση τιμή $\langle M_A \rangle$ έχει την παραπάνω τιμή για οποιοδήποτε μετρήσιμο μέγεθος M_A που δρα στο qubit A, είναι λογικό η ρ_A να αντιπροσωπεύει μία κατανομή των δυνατών κβαντικών καταστάσεων κάθε μία από τις οποίες να εμφανίζεται με συγκεκριμένη πιθανότητα. Δηλαδή το αποτέλεσμα για την αναμενόμενη τιμή $\langle M_A \rangle$ είναι το ίδιο αν υποτεθεί ότι το qubit A

είναι σε μία από τις δύο κβαντικές καταστάσεις. Με πιθανότητα $p_0 = |a|^2$ είναι στην κβαντική κατάσταση $|0\rangle$ και με πιθανότητα $p_1 = |b|^2$ είναι στην κβαντική κατάσταση $|1\rangle$.

Αν η κατάσταση ενός μεγαλύτερου κβαντικού συστήματος είναι ακτίνα, τότε η κατάσταση του υποσυστήματος γενικότερα δεν χρειάζεται να είναι, και μπορεί να παρασταθεί από μία μήτρα πυκνότητας. Στην περίπτωση που η κατάσταση του υποσυστήματος είναι ακτίνα, τότε είναι καθαρή. Σε αντίθετη περίπτωση είναι μεικτή. Αν η κατάσταση $|\psi\rangle$ είναι καθαρή, τότε η μήτρα πυκνότητας έχει τη μορφή:

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (1.10)$$

και είναι η προβολή σε ένα μονοδιάστατο χώρο από την $|\psi\rangle$. Η καθαρή μήτρα πυκνότητας έχει την ιδιότητα:

$$\rho^2 = \rho. \quad (1.11)$$

Μία γενική μήτρα πυκνότητας μπορεί να εκφραστεί στη βάση $|a\rangle$ η οποία είναι διαγώνια ως εξής:

$$\rho = \sum_a p_a |a\rangle\langle a|, \quad (1.12)$$

όπου $0 < p_a \leq 1$ και $\sum_a p_a = 1$. Αν η κατάσταση δεν είναι καθαρή, υπάρχουν δύο ή περισσότεροι όροι στο άθροισμα και:

$$\rho^2 \neq \rho, \quad (1.13)$$

με αποτέλεσμα:

$$\text{Tr} \rho^2 = \sum_a p_a^2 < \sum_a p_a = 1. \quad (1.14)$$

Η αναμενόμενη τιμή οποιουδήποτε μετρήσιμου μεγέθους M που δρα σε ένα υποσύστημα εκφράζεται ως:

$$\langle M \rangle = \text{Tr}(M \cdot \rho) = \sum_a p_a \langle a|M|a \rangle, \quad (1.15)$$

όπου το ρ περιγράφει μία κατανομή από καθαρές καταστάσεις $|a\rangle$, στις οποίες η κατάσταση $|a\rangle$ εμφανίζεται στη συλλογή με πιθανότητα p_a .

1.4 Πιστότητα μεταβίβασης κβαντικών καταστάσεων

Η μεταβίβαση μιας κβαντικής κατάστασης από τη μία θέση στην άλλη είναι πολύ σημαντική για τα πρωτόκολλα επεξεργασίας της κβαντικής πληροφορίας [1]. Τέλεια μεταβίβαση καταστάσεων συμβαίνει όταν το τετράγωνο του μέτρου των συντελεστών a και b στην $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ για την αρχική και την τελική κατάσταση είναι ίσα. Ένα μέτρο ποσοτικοποίησης της ποιότητας της μεταβίβασης αποτελεί η πιστότητα F (fidelity). Έστω ότι εξετάζονται δύο μήτρες πυκνότητας ρ_1 και ρ_2 που αντιστοιχούν στις καταστάσεις $|\psi_1\rangle$ και $|\psi_2\rangle$ που πρέπει να συγκριθούν. Η πιστότητα της μεταβίβασης από τη μήτρα πυκνότητας ρ_1 στη ρ_2 ορίζεται ως εξής:

$$F(\rho_1, \rho_2) \equiv \left\{ \text{Tr} \left[\sqrt{\sqrt{\rho_1} \rho_2 \sqrt{\rho_1}} \right] \right\}^2, \quad (1.16)$$

όπου $\sqrt{\rho} = \sum_i \sqrt{p_i} |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ και p_i είναι η αντίστοιχη πιθανότητα για να βρίσκεται το σύστημα στην κατάσταση $|\psi_i\rangle$. Η πιστότητα είναι φραγμένη στο διάστημα $0 \leq F \leq 1$ με τα άκρα

$F=1$ αν $\rho_1 = \rho_2$, ενώ $F=0$ όταν οι καταστάσεις $|\psi_1\rangle$ και $|\psi_2\rangle$ είναι ορθογώνιες $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$. Δηλαδή όσο καλύτερη είναι η μεταβίβαση των καταστάσεων τόσο πιο κοντά είναι η τιμή της πιστότητας στη μονάδα. Στην περίπτωση που και οι δύο καταστάσεις είναι καθαρές τότε η πιστότητα (Σχέση 1.16) απλοποιείται στην εξής μορφή:

$$F(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle) = |\langle\psi_1|\psi_2(t)\rangle|^2. \quad (1.17)$$

Αντιθέτως, αν η κατάσταση $|\psi_1\rangle$ εξελίσσεται στη κατάσταση ρ_2 που είναι μεικτή, τότε η πιστότητα της μεταβίβασης 1.16 γίνεται:

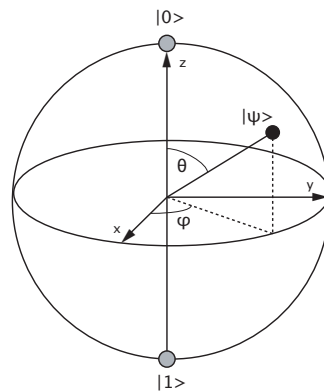
$$F = \langle\psi_1|\rho_2|\psi_1\rangle. \quad (1.18)$$

1.5 Σφαίρα του Bloch

Τα κβαντικά συστήματα που έχουν μόνο δύο γραμμικά ανεξάρτητες καταστάσεις μπορούν να περιγραφούν από διανύσματα του διςδιάστατου χώρου Hilbert H_2 [7]. Ένα qubit μπορεί να γραφτεί στη μορφή: $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ (Εξίσωση 1.5), με $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Λόγω του συνδέσμου αυτού οι 4 πραγματικές παράμετροι που καθορίζουν τα a και b γίνονται 3 και μπορούν να εκφραστούν με την βοήθεια των γωνιών γ , θ και ϕ ως εξής:

$$|\psi\rangle = e^{i\gamma} \left(\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle \right) \quad (1.19)$$

όπου $\gamma \in \mathbb{R}$, $\theta \in [0, \pi]$ και $\phi \in [0, 2\pi)$. Η συνολική φάση $e^{i\gamma}$ μπορεί να παραλειφθεί διότι δε συνεισφέρει στην πιθανότητα μέτρησης των παρατηρήσιμων μεγεθών. Με την εξίσωση 1.19 το qubit μπορεί να παρασταθεί ως σημείο σε μία μοναδιαία τριςδιάστατη σφαίρα με πολική γωνία θ και αζιμουθιακή γωνία ϕ , όπως αυτή που απεικονίζεται στο σχήμα 1.1.

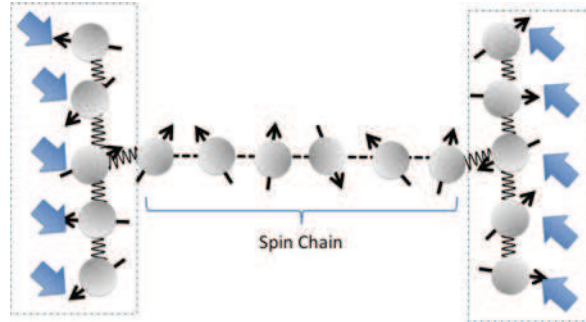


Σχήμα 1.1: Σφαίρα του Bloch.

Αυτή η σφαίρα ονομάζεται σφαίρα του Bloch (Bloch sphere) και ένα qubit περιγράφεται από το διάνυσμα: $\vec{r} = (r\cos\phi\sin\theta, r\sin\phi\sin\theta, r\cos\theta)$. Για $|\vec{r}| = r = 1$ η κατάσταση του qubit είναι καθαρή, ενώ για $|\vec{r}| < 1$ η κατάσταση του qubit είναι μεικτή [6]. Όπως φαίνεται από το σχήμα 1.1 η κατάσταση $|0\rangle$ ενός spin της αλυσίδας βρίσκεται στο πάνω μέρος της σφαίρας του Bloch, ενώ η κατάσταση $|1\rangle$ στο κάτω μέρος της αλυσίδας, ενώ οι υπόλοιπες καταστάσεις βρίσκονται στο ενδιάμεσο.

1.6 Αλυσίδες spin και βάσεις καταστάσεων

Η αλυσίδα spin (spin chain) η οποία θα μελετηθεί στη συνέχεια αποτελείται από πολλά μόνιμα συζευγμένα spins με τιμή ίση με $\frac{1}{2}$ και σε αυτή την περίπτωση αποτελούν τα qubits [8]. Με $|0\rangle$ και $|1\rangle$ αντιστοιχίζεται το spin πάνω $|\uparrow\rangle$ και το spin κάτω $|\downarrow\rangle$ των καταστάσεων αντίστοιχα κατά μήκος του z-άξονα, δηλαδή $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ και $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Στο σχήμα 1.2 απεικονίζεται μία αλυσίδα spin που είναι η κεντρική οριζόντια γραμμή των qubits και οι διακεκομμένες γραμμές μεταξύ τους συμβολίζουν τις μόνιμες αλληλεπιδράσεις τους.



Σχήμα 1.2: Απεικόνιση δύο κβαντικών καταχωρητών (κάθετες συστοιχίες από qubits) με ελεγχόμενα πεδία σε κάθε qubit (βέλη block) και σύνδεση των πλήρως εναλλασσόμενων δεσμών (κυματοειδείς γραμμές) με μία αλυσίδα spin (οριζόντια συστοιχία από qubits) με μόνιμες αλληλεπιδράσεις οι οποίες συμβολίζονται με διακεκομμένες γραμμές.

Οι κβαντικοί καταχωρητές φαίνονται στο σχήμα 1.2 (κάθετες συστοιχίες από qubits), όπου τα βέλη block αντιπροσωπεύουν τους ελέγχους που αντιστοιχούν στα qubits. Ο κβαντικός καταχωρητής είναι υψηλά ελεγχόμενος, με τους ελέγχους να βρίσκονται όχι μόνο σε κάθε qubit, αλλά και στις μεταξύ των qubits αλληλεπιδράσεις. Κάθε ένα από τα βέλη block απεικονίζει για παράδειγμα τα ηλεκτρόδια, τις άκρες των ινών ή την εφαρμογή των κλασσικών πεδίων στα qubits. Τα βέλη block συνδέονται στο τέλος με διακριτά μακροσκοπικά στοιχεία ελέγχου, τα οποία είναι συνήθως κλειδιά ή ψηφία προσβάσιμα σε έναν προγραμματιστή ή ένα πειραματικό και είναι πολύ μεγαλύτερα από τα qubits που ελέγχουν. Κάθε κβαντικός καταχωρητής αποτελείται από στοιχεία που ονομάζονται διαχωριστές, ώστε να υπάρχει αρκετός χώρος να φιλοξενηθούν όλοι οι μακροσκοπικοί έλεγχοι που εισέρχονται σε αυτόν. Το ίδιο συμβαίνει και σε κάθε μικρή συλλογή από qubits. Οι διαχωριστές είναι περιοχές χωρίς ελέγχους που μεταφέρουν τις καταστάσεις των qubits μεταξύ των καταχωρητών. Αν μία γραμμή με qubits είναι χωρίς ελέγχους, τότε τουλάχιστον οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ τους πρέπει να είναι μόνιμες, ώστε οι καταστάσεις να περνούν από αυτούς και για αυτό το λόγο χρησιμοποιούνται αλυσίδες spin.

Οι αλυσίδες spin ταξινομούνται σε αρκετές κατηγορίες ανάλογα με διάφορα χαρακτηριστικά τους. Οι γραμμικές αλυσίδες χωρίζονται σε:

- περιοδικές αλυσίδες
- μη περιοδικές αλυσίδες

με βάση το αν υπάρχει σύζευξη μεταξύ του τελευταίου και του πρώτου spin ή όχι αντίστοιχα. Επίσης, μπορούν να χωριστούν σχετικά με το αν ο συνολικός αριθμός των spins από τα οποία αποτελούνται είναι:

- περιττός
- άρτιος.

Έστω ότι μελετάται ανοικτή αλυσίδα με N spins παρουσία αλληλεπιδράσεων μεταξύ των spins στις x , y και z διευθύνσεις (XXZ μοντέλο) και χωρίς μαγνητικό πεδίο [9]. Τότε η Χαμιλτονιανή που περιγράφει το σύστημα γράφεται ως εξής:

$$\mathbf{H}_{\text{XXZ}} = \sum_{i=1}^{N-1} \left[J(\mathbf{S}_i^x \mathbf{S}_{i+1}^x + \mathbf{S}_i^y \mathbf{S}_{i+1}^y) + J\Delta \mathbf{S}_i^z \mathbf{S}_{i+1}^z \right] \quad (1.20)$$

με $\Delta \neq 1$ επειδή το μοντέλο δεν είναι ισотροπικό. Για τους όρους με τις αλληλεπιδράσεις στις x και y διευθύνσεις όταν δρουν σε κάποιες καταστάσεις δίνουν τα εξής αποτελέσματα:

$$\begin{cases} J(\mathbf{S}_i^x \mathbf{S}_{i+1}^x + \mathbf{S}_i^y \mathbf{S}_{i+1}^y) | \uparrow_i \downarrow_{i+1} \rangle = +\frac{J}{2} | \downarrow_i \uparrow_{i+1} \rangle \\ J(\mathbf{S}_i^x \mathbf{S}_{i+1}^x + \mathbf{S}_i^y \mathbf{S}_{i+1}^y) | \downarrow_i \uparrow_{i+1} \rangle = +\frac{J}{2} | \uparrow_i \downarrow_{i+1} \rangle \\ J(\mathbf{S}_i^x \mathbf{S}_{i+1}^x + \mathbf{S}_i^y \mathbf{S}_{i+1}^y) | \uparrow_i \uparrow_{i+1} \rangle = 0 \\ J(\mathbf{S}_i^x \mathbf{S}_{i+1}^x + \mathbf{S}_i^y \mathbf{S}_{i+1}^y) | \downarrow_i \downarrow_{i+1} \rangle = 0 \end{cases} \quad (1.21)$$

ενώ ο όρος με τις αλληλεπιδράσεις των spins στη z διεύθυνση δίνει αντίστοιχα για τις ίδιες καταστάσεις:

$$\begin{cases} J\Delta \mathbf{S}_i^z \mathbf{S}_{i+1}^z | \uparrow_i \uparrow_{i+1} \rangle = +\frac{J\Delta}{4} | \uparrow_i \uparrow_{i+1} \rangle \\ J\Delta \mathbf{S}_i^z \mathbf{S}_{i+1}^z | \downarrow_i \downarrow_{i+1} \rangle = +\frac{J\Delta}{4} | \downarrow_i \downarrow_{i+1} \rangle \\ J\Delta \mathbf{S}_i^z \mathbf{S}_{i+1}^z | \uparrow_i \downarrow_{i+1} \rangle = -\frac{J\Delta}{4} | \uparrow_i \downarrow_{i+1} \rangle \\ J\Delta \mathbf{S}_i^z \mathbf{S}_{i+1}^z | \downarrow_i \uparrow_{i+1} \rangle = -\frac{J\Delta}{4} | \downarrow_i \uparrow_{i+1} \rangle \end{cases} \quad (1.22)$$

Τα συστήματα των εξισώσεων 1.21 και 1.22 δίνουν αυτές τις τιμές, διότι γίνεται η αντικατάσταση $\mathbf{S}_i^j = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}_i^j$ για $j = x, y, z$ για το i -οστό spin, όπου $\boldsymbol{\sigma}^j$ είναι ο πίνακας του Pauli για την j διεύθυνση (Σχέση 2.2).

Η Χαμιλτονιανή $\mathbf{H}_{\text{XXZ}}$ μετατίθεται με τον συνολικό αριθμό των spins στη z διεύθυνση $\mathbf{S}^z = \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i^z$, δηλαδή $[\mathbf{H}_{\text{XXZ}}, \mathbf{S}^z] = 0$, οπότε το σύστημα είναι αμετάβλητο κατά την περιστροφή του γύρω από τον z άξονα. Αυτό σημαίνει ότι κάθε ιδιοκατάσταση της Χαμιλτονιανής $\mathbf{H}_{\text{XXZ}}$ έχει σταθερό αριθμό spins προς τα πάνω και ακόμα είναι ιδιοκατάσταση του τελεστή $\mathbf{S}^z$. Για παράδειγμα, για $N=4$ spins η Χαμιλτονιανή $\mathbf{H}_{\text{XXZ}}$ γράφεται υπό μορφή πίνακα ως εξής για τις 2^4 διαφορετικές καταστάσεις: $\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} a_3 \\ b_3 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} a_4 \\ b_4 \end{pmatrix}$ με $a_i, b_i = 0, 1$:

	$ 0000\rangle$	$ 0001\rangle$	$ 0010\rangle$	$ 0100\rangle$	$ 1000\rangle$	$ 0011\rangle$	$ 0101\rangle$	$ 0110\rangle$	$ 1001\rangle$	$ 1010\rangle$	$ 1100\rangle$	$ 1110\rangle$	$ 1101\rangle$	$ 1011\rangle$	$ 0111\rangle$	$ 1111\rangle$
$\langle 0000 $	$\frac{3J\Delta}{4}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\langle 0001 $	0	$+\frac{J\Delta}{4}$	$\frac{J}{2}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\langle 0010 $	0	$\frac{J}{2}$	$-\frac{J\Delta}{4}$	$\frac{J}{2}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\langle 0100 $	0	0	$\frac{J}{2}$	$-\frac{J\Delta}{4}$	$\frac{J}{2}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\langle 1000 $	0	0	0	$+\frac{J}{2}$	$+\frac{J\Delta}{4}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\langle 0011 $	0	0	0	0	0	$+\frac{J\Delta}{4}$	$\frac{J}{2}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\langle 0101 $	0	0	0	0	0	$\frac{J}{2}$	$-\frac{3J\Delta}{4}$	$\frac{J}{2}$	$\frac{J}{2}$	0	0	0	0	0	0	0
$\langle 0110 $	0	0	0	0	0	0	$\frac{J}{2}$	$-\frac{J\Delta}{4}$	0	$\frac{J}{2}$	0	0	0	0	0	0
$\langle 1001 $	0	0	0	0	0	0	$\frac{J}{2}$	0	$-\frac{J\Delta}{4}$	$\frac{J}{2}$	0	0	0	0	0	0
$\langle 1010 $	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{J}{2}$	$\frac{J}{2}$	$-\frac{3J\Delta}{4}$	$\frac{J}{2}$	0	0	0	0	0
$\langle 1100 $	0	0	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{J}{2}$	$\frac{J\Delta}{4}$	0	0	0	0	0
$\langle 1110 $	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	$+\frac{J\Delta}{4}$	$\frac{J}{2}$	0	0	0
$\langle 1101 $	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{J}{2}$	$-\frac{J\Delta}{4}$	$\frac{J}{2}$	0	0
$\langle 1011 $	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{J}{2}$	$-\frac{J\Delta}{4}$	$\frac{J}{2}$	0
$\langle 0111 $	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{J}{2}$	$+\frac{J\Delta}{4}$	0
$\langle 1111 $	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{3J\Delta}{4}$

Σχήμα 1.3: Η Χαμιλτονιανή $\mathbf{H}_{\text{XXZ}}$ γραμμένη υπό μορφή πίνακα για $N=4$ spins για όλες τις δυνατές βάσεις καταστάσεων.

Ο πίνακας 1.3 αποτελείται από $N+1$ ανεξάρτητους υπόχωρους (blocks), με μη μηδενικά στοιχεία στη διαγώνιό του, που ο καθένας από αυτούς έχει σταθερό αριθμό από spins με φορά προς τα πάνω. Οι υπόχωροι είναι ανεξάρτητοι μεταξύ τους, διότι οι υπόλοιποι υπόχωροι έχουν μηδενικά στοιχεία, ως συνέπεια του νόμου διατήρησης του συνολικού S_z που αναφέρθηκε προηγουμένως. Για τα επόμενα κεφάλαια θα χρησιμοποιηθεί μόνο ο τέταρτος υπόχωρος καταστάσεων.

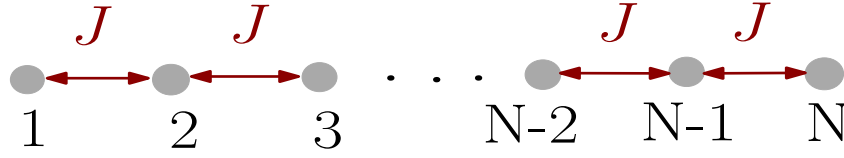
Κεφάλαιο 2

Μελέτη της τέλειας μεταβίβασης των καταστάσεων σε αλυσίδες spin από την πρώτη στην τελευταία θέση

Στο Κεφάλαιο 2 αναλύεται η πλήρης μεταβίβαση των καταστάσεων σε ανοικτές αλυσίδες από την πρώτη στη Ν-οστή θέση. Συγκεκριμένα, εξηγούνται το μοντέλο μεταβίβασης καταστάσεων που προτάθηκε από τον Bose [10] στο οποίο όλες οι συζεύξεις έχουν την ίδια τιμή με την επιβολή μαγνητικού πεδίου (Ενότητα 2.1), η τέλεια μεταβίβαση των καταστάσεων σε κατοπτρικά συμμετρικές αλυσίδες spin, όπου οι συζεύξεις μεταξύ των spins και το μαγνητικό πεδίο που εφαρμόζεται σε αυτά είναι συμμετρικά (Ενότητα 2.2) και η τέλεια μεταβίβαση των καταστάσεων όταν υπάρχουν αλληλεπιδράσεις των spins και πέρα από τους πρώτους γείτονες (Ενότητα 2.3).

2.1 Μελέτη της πλήρους μεταβίβασης των κβαντικών καταστάσεων σε αλυσίδα spin σύμφωνα με τον Bose

Η μελέτη της μεταβίβασης κβαντικών καταστάσεων σε αλυσίδες spin ξεκίνησε από τον Bose το 2003 [10]. Ο Bose εξέτασε την απλούστερη ανοικτή αλυσίδα spin και μέσω αυτής εξήγαγε ένα απλοϊκό πρωτόκολλο για την κβαντική επικοινωνία. Υπέθεσε ότι όλες οι συζεύξεις J_i μεταξύ του i -οστού και του $(i+1)$ -οστού spin στην αλυσίδα είναι ισотροπικές, ότι είναι δηλαδή ίσες και το μαγνητικό πεδίο ότι είναι ομοιόμορφο. Οι συζεύξεις J θεωρούνται θετικές $J > 0$ και άρα η αλυσίδα spin είναι σιδηρομαγνητική. Επειδή οι συζεύξεις J έχουν όλες την ίδια τιμή υπάρχει καθολική συμμετρία ως προς το μέσο της αλυσίδας spin. Επίσης, το μαγνητικό πεδίο h θεωρείται θετικό. Στο σχήμα 2.1 απεικονίζεται η ανοικτή αλυσίδα με N spins που μελέτησε ο Bose σε μαγνητικό πεδίο h και με ομοιόμορφες συζεύξεις J μεταξύ των πρώτων γειτόνων των spins.



Σχήμα 2.1: Ανοικτή αλυσίδα με N spins και αλληλεπιδράσεις μόνο με τους πρώτους γείτονες J με την παρουσία ομοιόμορφου μαγνητικού πεδίου h .

Η Χαμιλτονιανή της αλυσίδας spin που μελέτησε ο Bose είναι:

$$\mathbf{H}_B = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N-1} (\sigma_i^x \cdot \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \cdot \sigma_{i+1}^y + \sigma_i^z \cdot \sigma_{i+1}^z) - h \sum_{i=1}^N \sigma_i^z, \quad (2.1)$$

όπου $\sigma_i^x, \sigma_{i+1}^x$ είναι οι πίνακες spin του Pauli για το i -οστό και το $(i+1)$ -οστό spin αντίστοιχα στη x-διεύθυνση και $\sigma_i^y, \sigma_{i+1}^y$ είναι οι πίνακες για την y-διεύθυνση και $\sigma_i^z, \sigma_{i+1}^z$ για τη z-διεύθυνση αντίστοιχα. Οι πίνακες του Pauli είναι $\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ και $\sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Η σχέση μεταξύ των spins και των πινάκων του Pauli είναι:

$$\mathbf{S}^j = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}^j \Rightarrow \boldsymbol{\sigma}^j = 2\mathbf{S}^j, \quad (2.2)$$

για $j=x, y, z$. Η Χαμιλτονιανή $\mathbf{H}_B$ (Σχέση 2.1) τότε γράφεται:

$$\mathbf{H}_B = -2J \sum_{i=1}^{N-1} (\mathbf{S}_i^x \cdot \mathbf{S}_{i+1}^x + \mathbf{S}_i^y \cdot \mathbf{S}_{i+1}^y + \mathbf{S}_i^z \cdot \mathbf{S}_{i+1}^z) - h \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i^z. \quad (2.3)$$

Οι τελεστές ανάβασης και κατάβασης ορίζονται ως εξής [11]: $\alpha_i^\dagger = \mathbf{S}_i^x + i\mathbf{S}_i^y$ και $\alpha_i = \mathbf{S}_i^x - i\mathbf{S}_i^y$ αντίστοιχα και υπακούουν στις σχέσεις:

$$\{\alpha_i, \alpha_i^\dagger\} = 1, \{\alpha_i, \alpha_i\} = \{\alpha_i^\dagger, \alpha_i^\dagger\} = 0, \quad (2.4)$$

$$[\alpha_i, \alpha_j] = [\alpha_i, \alpha_j^\dagger] = 0, i \neq j. \quad (2.5)$$

Επομένως, $\mathbf{S}_i^x = \frac{\alpha_i + \alpha_i^\dagger}{2}$ και $\mathbf{S}_i^y = \frac{\alpha_i^\dagger - \alpha_i}{2i}$. Επίσης, είναι: $\mathbf{S}_i^z = \alpha_i^\dagger \alpha_i - \frac{1}{2}$ [12]. Η Χαμιλτονιανή $\mathbf{H}_B$ (Σχέση 2.3) τότε γράφεται:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_B = & -J \sum_{i=1}^{N-1} \alpha_i \alpha_{i+1}^\dagger - J \sum_{i=1}^{N-1} \alpha_{i+1} \alpha_i^\dagger - 2J \sum_{i=1}^{N-1} \alpha_i^\dagger \alpha_i \alpha_{i+1}^\dagger \alpha_{i+1} + J \sum_{i=1}^{N-1} \alpha_i^\dagger \alpha_i + \\ & J \sum_{i=1}^{N-1} \alpha_{i+1}^\dagger \alpha_{i+1} - \frac{J}{2}(N-1) - 2h \sum_{i=1}^N \alpha_i^\dagger \alpha_i + hN. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Ο μετασχηματισμός Jordan-Wigner είναι:

$$c_i = e^{(\pi i \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_j^\dagger \alpha_j)} \alpha_i, \quad c_i^\dagger = \alpha_i^\dagger e^{(-\pi i \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_j^\dagger \alpha_j)}, \quad (2.7)$$

όπου $c_i^\dagger$ και c_i είναι οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής φερμιονίου στη θέση i αντίστοιχα. Εύκολα αποδεικνύεται ότι: $\alpha_i^\dagger \alpha_i = c_i^\dagger c_i$, οπότε:

$$\alpha_i = e^{(-\pi i \sum_{j=1}^{i-1} c_j^\dagger c_j)} c_i, \quad \alpha_i^\dagger = c_i^\dagger e^{(\pi i \sum_{j=1}^{i-1} c_j^\dagger c_j)}. \quad (2.8)$$

Οι φερμιονικοί τελεστές c_i και $c_i^\dagger$ υπακούουν στις γνωστές σχέσεις αντιμετάθεσης:

$$\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \{c_i, c_j\} = 0, \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0 \quad (2.9)$$

Είναι

$$\begin{aligned} \alpha_i \alpha_{i+1}^\dagger &= e^{(-\pi i \sum_{j=1}^{i-1} c_j^\dagger c_j)} c_i c_{i+1}^\dagger e^{(\pi i \sum_{j=1}^i c_j^\dagger c_j)} \Rightarrow \\ \alpha_i \alpha_{i+1}^\dagger &= c_i e^{(-\pi i \sum_{j=1}^{i-1} c_j^\dagger c_j)} e^{(\pi i \sum_{j=1}^i c_j^\dagger c_j)} c_{i+1}^\dagger \Rightarrow \\ \alpha_i \alpha_{i+1}^\dagger &= c_i e^{(\pi i c_i^\dagger c_i)} c_{i+1}^\dagger \Rightarrow \\ \alpha_i \alpha_{i+1}^\dagger &= c_i (1 - 2c_i^\dagger c_i) c_{i+1}^\dagger \Rightarrow \\ \alpha_i \alpha_{i+1}^\dagger &= -(1 - 2c_i^\dagger c_i) c_i c_{i+1}^\dagger \Rightarrow \\ \alpha_i \alpha_{i+1}^\dagger &= -c_i c_{i+1}^\dagger \Rightarrow \\ \boxed{\alpha_i \alpha_{i+1}^\dagger} &= \boxed{c_{i+1}^\dagger c_i} \end{aligned} \quad (2.10)$$

καθώς επίσης και:

$$\begin{aligned} \alpha_{i+1} \alpha_i^\dagger &= (\alpha_i \alpha_{i+1}^\dagger)^\dagger \Rightarrow \\ \boxed{\alpha_{i+1} \alpha_i^\dagger} &= \boxed{c_i^\dagger c_{i+1}} \end{aligned} \quad (2.11)$$

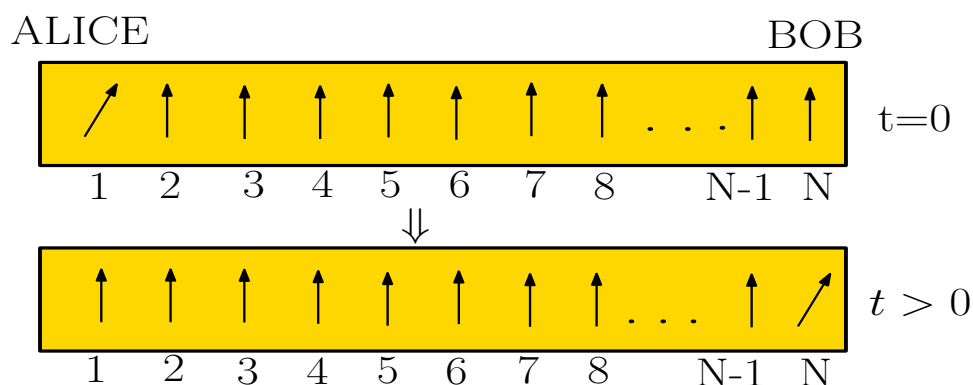
Επομένως, η Χαμιλτονιανή $\mathbf{H}_B$ με τη χρήση του μετασχηματισμού Jordan Wigner γράφεται:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_B &= -J \sum_{i=1}^{N-1} c_{i+1}^\dagger c_i - J \sum_{i=1}^{N-1} c_i^\dagger c_{i+1} - 2J \sum_{i=1}^{N-1} c_i^\dagger c_i c_{i+1}^\dagger c_{i+1} + J \sum_{i=1}^{N-1} c_i^\dagger c_i + J \sum_{i=1}^{N-1} c_{i+1}^\dagger c_i - \\ &\frac{J}{2}(N-1) - 2h \sum_{i=1}^N c_i^\dagger c_i + hN. \end{aligned} \quad (2.12)$$

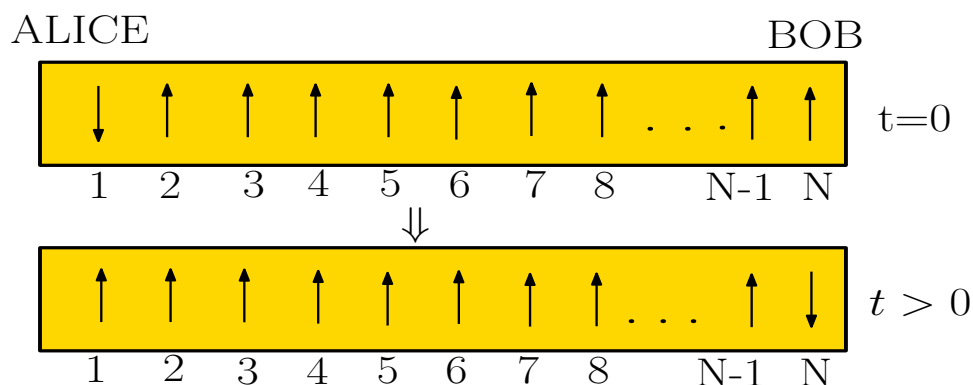
Στην αρχή η αλυσίδα spin βρίσκεται σε μία απλή κατάσταση, όπως αυτή στην οποία όλα τα spins είναι προς τα πάνω, δηλαδή στην $|0\rangle = |000\dots 0\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \dots \otimes |0\rangle$. Η κατάσταση $|0\rangle$ δηλώνει την κατάσταση που το αντίστοιχο spin είναι ευθυγραμμισμένο κατά μήκος του z-άξονα με φορά προς τα πάνω [8]. Η θεμελιώδης κατάσταση του σιδηρομαγνήτη με την εφαρμογή έστω και ενός αδύναμου μαγνητικού πεδίου, είναι μία σπασμένη κατάσταση συμμετρίας στην οποία όλα τα spins ευθυγραμμίζονται στην κατεύθυνση του πεδίου. Επιπλέον, η θεμελιώδης ενέργεια του σιδηρομαγνήτη θεωρείται μηδενική $E_0 = 0$. Για να υπάρξει επικοινωνία η Alice τοποθετεί μία αυθαίρετη κβαντική κατάσταση στο ένα άκρο της αλυσίδας spin.

Εξαιτίας της χρονικής εξέλιξης της αλυσίδας αυτή η κατάσταση διασκορπίζεται και διαδίδεται κατά μήκος της και ως αποτέλεσμα η κατάσταση του spin στο άκρο του Bob να διαφέρει ανάλογα με το χρόνο. Ο Bob επιλέγει τη χρονική στιγμή t_0 για να λάβει την κατάσταση της Alice, ώστε η κατάσταση στο άκρο του να είναι όσο το δυνατόν πιο κοντά σε αυτή που μετέδωσε η Alice. Αυτή η κατάσταση είναι η εξής $|j\rangle = |00\dots 010\dots 0\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \dots \otimes |0\rangle \otimes |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes \dots \otimes |0\rangle$, όπου $j=1,2,\dots,s,\dots,r,\dots,N$, είναι η κατάσταση στην οποία το spin στην j-οστή θέση είναι στην κατάσταση $|1\rangle$, δηλαδή έχει φορά προς τα κάτω και όλα τα άλλα spins έχουν φορά προς τα πάνω.

Στο σχήμα 2.2 απεικονίζεται η ανοικτή αλυσίδα με N spins που μελέτησε ο Bose σε μαγνητικό πεδίο h στις βάσεις $\{|0\rangle = |000\dots 0\rangle, |1\rangle = |100\dots 0\rangle, \dots, |N\rangle = |000\dots 1\rangle\}$ επειδή το αρχικό spin είναι στραμμένο, ενώ στο σχήμα 2.3 απεικονίζεται η αλυσίδα, που είναι ίδια με την προηγούμενη με τη διαφορά ότι το αρχικό spin έχει φορά προς τα κάτω και για αυτό το λόγο η βάση καταστάσεων που χρησιμοποιείται είναι η εξής: $\{|1\rangle = |100\dots 0\rangle, |2\rangle = |010\dots 0\rangle, \dots, |N\rangle = |000\dots 1\rangle\}$, όταν η Alice βρίσκεται στην πρώτη θέση και ο Bob στην τελευταία. Αυτό που έχει μελετήσει ο Bose είναι η πλήρης μεταβίβαση των καταστάσεων από την Alice στον Bob ύστερα από πεπερασμένο χρόνο t .



Σχήμα 2.2: Η αλυσίδα spin με ομοιόμορφες συζεύξεις J μεταξύ των πρώτων γειτόνων και μαγνητικό πεδίο h την χρονική στιγμή $t=0$ (πάνω μέρος) και μετά από χρόνο $t>0$ (κάτω μέρος) για τη βάση καταστάσεων $\{|0\rangle = |000\dots 0\rangle, |1\rangle = |100\dots 0\rangle, \dots, |N\rangle = |000\dots 1\rangle\}$.



Σχήμα 2.3: Η αλυσίδα spin με ομοιόμορφες συζεύξεις J μεταξύ των πρώτων γειτόνων και μαγνητικό πεδίο h την χρονική στιγμή $t=0$ (πάνω μέρος) και μετά από χρόνο $t>0$ (κάτω μέρος) για τη βάση καταστάσεων $\{|1\rangle = |100\dots 0\rangle, |2\rangle = |010\dots 0\rangle, \dots, |N\rangle = |000\dots 1\rangle\}$.

Στη βάση των καταστάσεων $\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |N\rangle\}$ η Χαμιλτονιανή $\mathbf{H}_B$ γράφεται σε μορφή

πίνακα:

$$\begin{aligned}
 H_B &= \begin{pmatrix} \langle 1|H_B|1\rangle & \langle 1|H_B|2\rangle & \langle 1|H_B|3\rangle & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \langle 1|H_B|N\rangle \\ \langle 2|H_B|1\rangle & \langle 2|H_B|2\rangle & & & & & & \\ \langle 3|H_B|1\rangle & & \cdot & & & & & \\ \cdot & & & \cdot & & & & \\ \cdot & & & & \cdot & & & \\ \cdot & & & & & \cdot & & \\ \langle N|H_B|1\rangle & & & & & & \langle N-1|H_B|N\rangle & \langle N|H_B|N\rangle \end{pmatrix} \Rightarrow \\
 H_B &= \begin{pmatrix} -\frac{J}{2}(N-3) + h(N-2) & -J & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ -J & -\frac{J}{2}(N-5) + h(N-2) & -J & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -J - \frac{J}{2}(N-3) + h(N-2) \end{pmatrix} \\
 &\quad (2.13)
 \end{aligned}$$

Επομένως, η Χαμιλτονιανή H_B γράφεται τελικά:

$$\begin{aligned}
 H_B &= -J \sum_{j=1}^{N-1} |j\rangle\langle j+1| - J \sum_{j=1}^{N-1} |j+1\rangle\langle j| - \frac{J}{2}(N-5) \sum_{j=2}^{N-1} |j\rangle\langle j| - \frac{J}{2}(N-3)|1\rangle\langle 1| - \\
 &\quad \frac{J}{2}(N-3)|N\rangle\langle N| + h(N-2) \sum_{j=1}^N |j\rangle\langle j| \quad (2.14)
 \end{aligned}$$

Η Χαμιλτονιανή μπορεί επίσης να υπολογιστεί από τη δράση των πινάκων του Pauli πάνω στις αντίστοιχες καταστάσεις χωρίς τη χρήση του μετασχηματισμού Jordan-Wigner.

Ο Bob υπέθεσε ότι ο αποστολέας της κατάστασης Alice βρίσκεται στο πρώτο spin και ο παραλήπτης της κατάστασης Bob βρίσκεται στο N-οστό spin. Για να ξεκινήσει η μεταβίβαση, η Alice απλώς τοποθετεί την κατάσταση που θέλει να διαδοθεί στον Bob τη χρονική στιγμή $t=0$. Η αρχική κατάσταση της Alice είναι:

$$|\psi_{in}\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle. \quad (2.15)$$

Έτσι, η κατάσταση της συνολικής αλυσίδας τη χρονική στιγμή $t=0$ είναι:

$$|\Psi(0)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle. \quad (2.16)$$

Η χρονική εξέλιξη της αλυσίδας spin γράφεται:

$$|\Psi(t)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2} \sum_{j=1}^N \langle j|e^{-iH_B t}|1\rangle|j\rangle. \quad (2.17)$$

Η κατάσταση του N-οστού spin είναι τις πιο πολλές φορές μία μεικτή κατάσταση, με μήτρα πυκνότητας:

$$\rho_{out}(t) = P(t)|\psi_{out}(t)\rangle\langle\psi_{out}(t)| + (1 - P(t))|0\rangle\langle 0|, \quad (2.18)$$

όπου

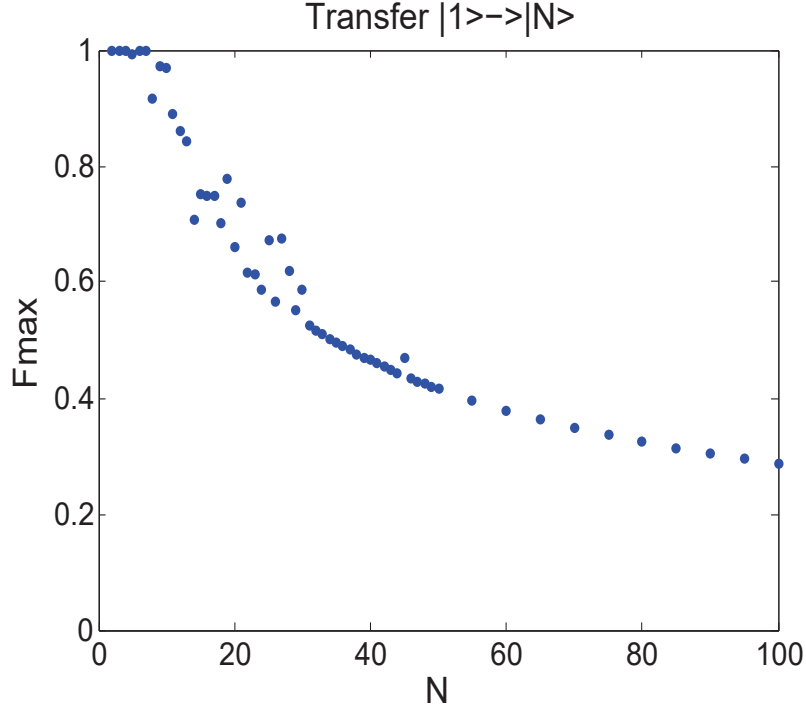
$$|\psi_{out}(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{P(t)}} \left(\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi} \sin\frac{\theta}{2} f_{r,s}^N(t)|1\rangle \right), \quad (2.19)$$

με $P(t) = \cos^2\frac{\theta}{2} + \sin^2\frac{\theta}{2} |f_{r,s}^N(t)|^2$ λόγω κανονικοποίησης και το μέγεθος $f_{1,N}(t) = \langle \mathbf{N} | e^{-i\mathbf{H}_B t} | \mathbf{1} \rangle$ είναι το πλάτος μετάβασης για τη μεταβίβαση από το πρώτο στο χρονικά εξελιγμένο N-οστό spin. Η πιστότητα της κβαντικής επικοινωνίας μέσω του καναλιού προκύπτει από το μέσο όρο όλων των καθαρών αρχικών καταστάσεων $|\psi_{in}\rangle$ στη σφαίρα του Bloch $(\frac{1}{4\pi} \int \langle \psi_{in} | \rho_{out}(t_0) | \psi_{in} \rangle)$ σύμφωνα με τον ορισμό που έδωσε ο Bose όταν η αρχική κατάσταση είναι στραμμένη:

$$F = \frac{|f_{r,s}^N(t_0)| \cos\gamma}{3} + \frac{|f_{r,s}^N(t_0)|^2}{6} + \frac{1}{2}, \quad (2.20)$$

όπου $\gamma = \arg\{f_{r,s}^N(t_0)\}$.

Για τις αλυσίδες spin σύμφωνα με το απλουστευμένο παράδειγμα του Bose υπολογίζεται αριθμητικά η πιστότητα για spins από N=2 μέχρι N=80 για τη μετάβαση $|1\rangle \rightarrow |N\rangle$ με J=1 και h=1. Για N>80 η πιστότητα έχει πάντα τιμή μικρότερη από $\frac{2}{3}$ και η μεταβίβαση των καταστάσεων κβαντικά δεν έχει νόημα σύμφωνα με τον Bose [13]. Ο Bose υπέθεσε ότι η βέλτιστη χρονική στιγμή t^* που γίνεται η μετάβαση ανήκει σε ένα πεπερασμένο όμως μεγάλο χρονικό διάστημα μήκους $T_{max} = 4000/J$, δηλαδή $T_{max} = 4000$. Το διάστημα όμως μέσα στο οποίο ανήκει η t^* διαφέρει ανάλογα με τον αριθμό των spins N. Για τον υπολογισμό της πιστότητας σύμφωνα με τη σχέση 1.17 η μετάβαση $|1\rangle \rightarrow |N\rangle$ μπορεί να γίνει πλήρως για N=2, N=3 και N=4, ενώ προσεγγίζει τη μονάδα για N=5, N=6 και N=7. Στο σχήμα 2.4 απεικονίζεται η μέγιστη τιμή της πιστότητας F_{max} συναρτήσει του αριθμού των spins N για τη μετάβαση $|1\rangle \rightarrow |N\rangle$ σύμφωνα με τη σχέση 1.17, όπου οι συζεύξεις έχουν την ίδια τιμή J=1 και έχει μηδενιστεί το μαγνητικό πεδίο h=0 για το χρονικό διάστημα $[0, 4000]$.



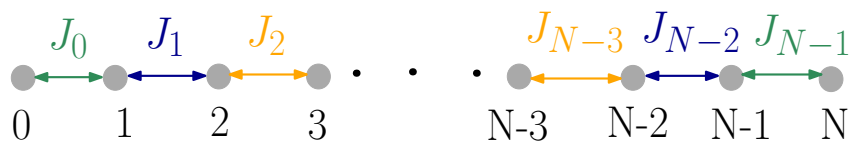
Σχήμα 2.4: Γραφική παράσταση της μέγιστης πιστότητας F_{max} συναρτήσει του αριθμού των spins N για τη μετάβαση $|1\rangle \rightarrow |N\rangle$ σύμφωνα με το μοντέλο του Bose για $J=1$ και $h=0$ για το χρονικό διάστημα $[0, 4000]$ για $N \leq 100$.

2.2 Πλήρης μεταβίβαση καταστάσεων σε κατοπτρικά συμμετρική αλυσίδα spin

Για να μεταφερθεί τέλεια η κατάσταση $|0\rangle = |100\dots 0\rangle$ στην κατάσταση $|N\rangle = |00\dots 001\rangle$ σε μία μονοδιάστατη ανοικτή αλυσίδα με $N+1$ spins και αλληλεπιδράσεις μόνο με τους πρώτους γείτονες των spins πρέπει η αλυσίδα να είναι κατοπτρικά συμμετρική (mirror symmetric) [14]. Για τις συζεύξεις και για το μαγνητικό πεδίο που εφαρμόζεται στα qubits της αλυσίδας ισχύουν τα εξής:

$$J_i = J_{N-1-i}, \quad h_i = h_{N-i}. \quad (2.21)$$

Η κατοπτρικά συμμετρική αλυσίδα spin απεικονίζεται στο σχήμα 2.5:



Σχήμα 2.5: Κατοπτρικά συμμετρική ανοικτή αλυσίδα με $N+1$ spins και αλληλεπιδράσεις μόνο με τους πρώτους γείτονες J_i με την παρουσία μαγνητικού πεδίου h_i .

Η Χαμιλτονιανή της κατοπτρικά συμμετρικής αλυσίδας $\mathbf{H}_{\text{ms}}$ γράφεται:

$$\mathbf{H}_{\text{ms}} = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{N-1} J_i \boldsymbol{\sigma}_i^x \cdot \boldsymbol{\sigma}_{i+1}^x + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{N-1} J_i \boldsymbol{\sigma}_i^y \cdot \boldsymbol{\sigma}_{i+1}^y + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N h_i (\boldsymbol{\sigma}_i^z + 1). \quad (2.22)$$

Επειδή όλες οι συζεύξεις J_i θεωρούνται θετικές, το σύστημα είναι αντισιδηρομαγνητικό. Στη βάση $\{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |N\rangle\}$ η Χαμιλτονιανή $\mathbf{H}_{\text{ms}}$ γράφεται σε μορφή πίνακα ως εξής:

$$\mathbf{H}_{\text{ms}} = \begin{pmatrix} \langle 0 | \mathbf{H}_{\text{ms}} | 0 \rangle & \langle 0 | \mathbf{H}_{\text{ms}} | 1 \rangle & \langle 0 | \mathbf{H}_{\text{ms}} | 2 \rangle & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \langle 0 | \mathbf{H}_{\text{ms}} | N \rangle \\ \langle 1 | \mathbf{H}_{\text{ms}} | 0 \rangle & \langle 1 | \mathbf{H}_{\text{ms}} | 1 \rangle & & & & & & \\ \langle 2 | \mathbf{H}_{\text{ms}} | 0 \rangle & & \cdot & & & & & \\ \cdot & & & \cdot & & & & \\ \cdot & & & & \cdot & & & \\ \cdot & & & & & \cdot & & \\ \langle N | \mathbf{H}_{\text{ms}} | 0 \rangle & & & & & & \langle N-1 | \mathbf{H}_{\text{ms}} | N \rangle & \langle N | \mathbf{H}_{\text{ms}} | N \rangle \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\mathbf{H}_{\text{ms}} = \begin{pmatrix} h_0 & J_0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ J_0 & h_1 & J_1 & & & & \\ 0 & J_1 & h_2 & J_2 & & & \\ \cdot & & \cdot & & & & \\ \cdot & & & \cdot & & & \\ \cdot & & & & h_1 & J_0 \\ 0 & & & & J_0 & h_0 \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

Το πρόβλημα ιδιοτιμών - ιδιοανυσμάτων που πρέπει να λυθεί είναι $\mathbf{H}_{\text{ms}} |x_s\rangle = x_s |x_s\rangle$, όπου $s=0,1,\dots,N$ και $|x_s\rangle = (x_{1s}, \dots, x_{js}, \dots, x_{Ns})^T$. Οι ιδιοτιμές x_s είναι πραγματικές και μη εκφυλισμένες, δηλαδή $x_s \neq x_t$ αν $s \neq t$ για θετικές συζεύξεις J_i . Ακόμα, για τις συνιστώσες των ιδιοανυσμάτων x_s για αυτά που είναι άρτια ισχύει ότι $x_{is} = x_{N-i,s}$ και για αυτά που είναι περιττά τότε $x_{is} = -x_{N-i,s}$ λόγω της κατοπτρικά συμμετρικής ιδιότητας.

Σε αυτό το σημείο χρησιμοποιείται ο εξής πίνακας της Χαμιλτονιανής για την ανοικτή αλυσίδα spin:

$$J = \begin{pmatrix} h_0 & J_0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ J_0 & h_1 & J_1 & & & & \\ 0 & J_1 & h_2 & J_2 & & & \\ \cdot & & \cdot & & & & \\ \cdot & & & \cdot & & & \\ \cdot & & & & h_{N-1} & J_{N-1} \\ 0 & & & & J_{N-1} & h_N \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

χωρίς η αλυσίδα spin να είναι υποχρεωτικά κατοπτρικά συμμετρική. Τα ιδιοανύσματα $|x_s\rangle$ του πίνακα J εκφράζονται στη βάση $|i\rangle$ ως εξής:

$$|x_s\rangle = \sum_{i=0}^N W_{si} |i\rangle. \quad (2.25)$$

Η βάση $|i\rangle$ δίνεται από τα διανύσματα $|i\rangle = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^T$, όπου $i=1,2,\dots,N$ και στην i -οστή θέση το spin είναι προς τα κάτω. Είναι $W_{si} = W_{s0} X_i(x_s)$, όπου $X_0(x_s) = 1$. Ορίζεται ότι

$\sqrt{w_s} = W_{s0}$ οπότε η σχέση 2.25 γίνεται:

$$|x_s\rangle = \sum_{i=0}^N \sqrt{w_s} X_i(x_s) |i\rangle, \quad (2.26)$$

όπου $X_i(x_s)$ είναι ένα ορθογώνιο πολυώνυμο. Η εξίσωση Schroedinger γράφεται:

$$J|i\rangle \equiv J_{i+1}|i+1\rangle + h_i|i\rangle + J_i|i-1\rangle \Rightarrow$$

$$J_{i+1}X_{i+1}(x) + h_iX_i(x) + J_iX_{i-1}(x) = x \cdot X_i(x), \quad (2.27)$$

όπου $X_{-1} = 0$. Επειδή οι βάσεις $|i\rangle$ και $|x_s\rangle$ είναι ορθογώνιες και οι συντελεστές $X_i(x_s)$ είναι πραγματικοί, αυτά τα στοιχεία σχηματίζουν ένα ορθογώνιο πίνακα και έτσι ισχύουν οι αντίστροφες σχέσεις:

$$|i\rangle = \sum_{s=0}^N \sqrt{w_s} X_i(x_s) |x_s\rangle. \quad (2.28)$$

Επειδή η βάση $|i\rangle$ είναι ορθοκανονική ισχύει ότι: $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$, άρα:

$$\sum_{s=0}^N w_s X_i(x_s) X_j(x_s) = \delta_{ij}. \quad (2.29)$$

Επομένως, τα πολυώνυμα $X_i(x)$ είναι ορθογώνια στο πεπερασμένο σύνολο των ιδιοτιμών x_s του πίνακα J με βάρος w_s . Από τις ιδιοτιμές $x_s, s=0,1,...,N$ σχηματίζεται το χαρακτηριστικό πολυώνυμο $P_{N+1}(x)$ βαθμού (N+1):

$$P_{N+1} = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_N) \quad (2.30)$$

το οποίο είναι ορθογώνιο σε όλα τα $X_i(x), i=0,1,...,N$ λόγω της σχέσης 2.29. Σύμφωνα με τη θεωρία των ορθογώνιων πολυωνύμων [15] τα διακριτά βάρη w_s εκφράζονται ως εξής:

$$w_s = \frac{\sqrt{h_N}}{X_N(x_s) P'_{N+1}(x_s)}, \quad s = 0, 1, \dots, N, \quad (2.31)$$

όπου $\sqrt{h_N} = J_1 J_2 \dots J_N$ και $P'_{N+1}(x)$ είναι η παράγωγος του $P_{N+1}(x)$ ως προς x. Αν οι ιδιοτιμές αριθμηθούν κατά αύξουσα τιμή ως εξής:

$$x_0 < x_1 < \dots < x_N \quad (2.32)$$

διαπιστώνεται ότι:

$$P'_{N+1}(x_s) = (-1)^{N+s} |P'_{N+1}(x_s)|. \quad (2.33)$$

Οι ιδιότητες των κατοπτρικά συμμετρικών αλυσίδων (συνθήκες 2.21) ισοδυναμούν με την απαίτηση ο πίνακας J να είναι αναλλοίωτος υπό την επίδραση του πίνακα ανάκλασης R:

$$R = \begin{pmatrix} 0 & & & 1 \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & 1 & & \\ 1 & & & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.34)$$

ότι δηλαδή $JR=RJ$. Για τον πίνακα R ισχύουν ότι $R|i\rangle = |N-i\rangle$ και $R^2 = 1$. Επειδή οι πίνακες J και R μετατίθενται μπορούν να διαγωνιοποιηθούν ταυτόχρονα και επειδή οι ιδιοκαταστάσεις $|x_s\rangle$ είναι μη εκφυλισμένες προκύπτει ότι:

$$R|x_s\rangle = \epsilon_s |x_s\rangle = \epsilon_s \sum_{i=0}^N \sqrt{w_s} X_n(x_s) |i\rangle \quad (2.35)$$

με $\epsilon_s = \pm 1$. Λόγω της εξίσωσης 2.2 είναι:

$$\begin{aligned} R|x_s\rangle &= \sum_{i=0}^N \sqrt{w_s} X_i(x_s) |N-i\rangle \Rightarrow \\ R|x_s\rangle &= \sum_{i=0}^N \sqrt{w_s} X_{N-i}(x_s) |i\rangle. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Με το συνδυασμό των εξισώσεων 2.35 και 2.36 είναι:

$$X_{N-i}(x_s) = \epsilon_s X_i(x_s). \quad (2.37)$$

Λόγω της κατοπτρικά συμμετρικής ιδιότητας τα βάρη δίνονται από τη σχέση:

$$w_s = \frac{\sqrt{h_N}}{|P'_{N+1}(x_s)|} \quad (2.38)$$

Συγκρίνοντας την εξίσωση 2.38 με τη γενική εξίσωση 2.37 χρησιμοποιώντας τη σχέση ορθογωνιότητας ισχύει ότι:

$$X_N(x_s) = (-1)^{N+s} \quad (2.39)$$

που είναι ισοδύναμη συνθήκη με το να είναι ο πίνακας J κατοπτρικά συμμετρικός. Θέτοντας $n=0$ στην εξίσωση 2.37 είναι:

$$\epsilon_s = (-1)^{N+s} \quad (2.40)$$

και η ακόλουθη ιδιότητα των ορθογωνίων πολυωνύμων σχετίζεται με τους πίνακες Jacobi που είναι κατοπτρικά συμμετρικοί:

$$X_{N-i}(x_s) = (-1)^{N+s} X_N(x_s). \quad (2.41)$$

Σε αυτό το σημείο θα αποδειχθεί ότι για να γίνεται τέλεια η μετάβαση από το πρώτο στο τελευταίο spin θα πρέπει να ισχύει η σχέση 2.39 [16]. Σε κάποιο χρόνο t ισχύει ότι:

$$e^{-itJ} |0\rangle = e^{i\phi} |N\rangle \quad (2.42)$$

Σύμφωνα με τη σχέση 2.28 η εξίσωση 2.42 είναι ισοδύναμη με την εξής:

$$X_N(x_s) = e^{-i\phi} e^{-itx_s}, \quad s = 0, 1, \dots, N. \quad (2.43)$$

Επειδή το πολώνυμο $X_N(x)$ είναι πραγματικό, από την εξίσωση 2.43 προκύπτει ότι:

$$X_N(x_s) = \pm 1. \quad (2.44)$$

Από την άλλη πλευρά, τα ορθογώνια πολυώνυμα $X_i(x)$ εναλλάσσουν διαδοχικά τα πρόσημά τους [17]. Κάθε μηδέν του πολυωνύμου $X_N(x)$ βρίσκεται μεταξύ δύο διαδοχικών μηδενικών x_s του πολυωνύμου $X_{N+1}(x)$. Αυτό είναι δυνατό μόνο αν εναλλάσσονται οι τιμές ± 1 στην εξίσωση 2.44. Τότε είναι:

$$X_N(x_s) = (-1)^{N+s}, \quad s = 0, 1, \dots, N, \quad (2.45)$$

λαμβάνοντας υπόψη τις εξισώσεις 2.36 και 2.37. Από τις εξισώσεις 2.29 και 2.45 ισοδύναμη συνθήκη είναι η εξής:

$$e^{-i\phi} e^{-itx_s} = e^{i\pi s} e^{i\phi + \pi(N+2G_s)} \quad (2.46)$$

όπου G_s είναι αυθαίρετοι ακέραιοι. Κατάλληλη προϋπόθεση για τη διαφορά των διαδοχικών ενεργειών είναι:

$$x_{s+1} - x_s = \frac{\pi}{T} M_s \quad (2.47)$$

όπου M_s είναι θετικοί αριθμοί ανά δύο μονούς. Οι εξισώσεις 2.41 και 2.47 αποτελούν τις απαραίτητες και επαρκείς συνθήκες για την τέλεια μεταβίβαση των καταστάσεων $|0\rangle \rightarrow |N\rangle$.

Επίσης, ο χρόνος στον οποίο γίνεται η τέλεια μετάβαση πρέπει να είναι πολλαπλάσιο του π . Για τις κατοπτρικά συμμετρικές αλυσίδες η Χαμιλτονιανή τους $\mathbf{H}_{ms}$ μετατίθεται με τον τελεστή συμμετρίας:

$$S = \sum_{i=0}^N |i\rangle \langle N+1-i|. \quad (2.48)$$

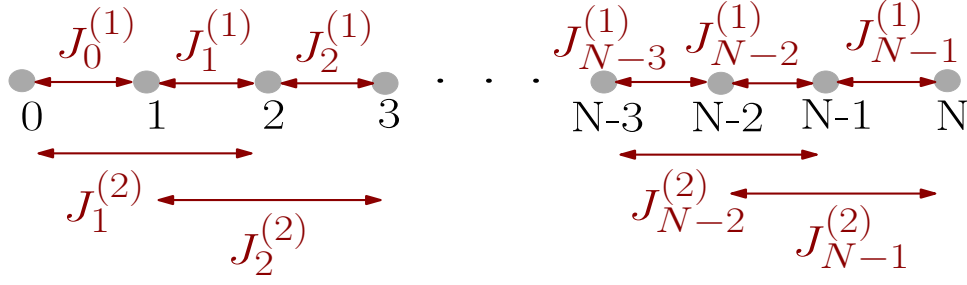
Για αυτό η Χαμιλτονιανή $\mathbf{H}_{ms}$ υποδιαιρείται σε συμμετρικούς και αντισυμμετρικούς υπόχωρους με ιδιοανύσματα $|\lambda_i^s\rangle$ και $|\lambda_i^\alpha\rangle$ αντίστοιχα [14]. Μία απαραίτητη και επαρκής συνθήκη για τέλεια μεταβίβαση καταστάσεων σε μία κατοπτρικά συμμετρική ανοικτή αλυσίδα είναι ότι θα πρέπει να υπάρχει ένας χρόνος t_0 και μία φάση ϕ ώστε να ικανοποιούνται οι σχέσεις $e^{-it_0\lambda_i^s} = e^{i\phi}$ και $e^{-it_0\lambda_i^\alpha} = -e^{i\phi}$, για όλα τα ιδιοανύσματα $\langle \lambda_i | 0 \rangle \neq 0$. Για αυτή την απόδειξη αρχικά γράφεται η χρονική εξέλιξη:

$$e^{-i\mathbf{H}_{ms}t_0} |0\rangle = \sum_i e^{-i\lambda_i^s t_0} \alpha_i^s |\lambda_i^s\rangle + e^{-i\lambda_i^\alpha t_0} \alpha_i^\alpha |\lambda_i^\alpha\rangle = e^{i\phi} \left(\sum_i \alpha_i^s |\lambda_i^s\rangle - \alpha_i^\alpha |\lambda_i^\alpha\rangle \right) = e^{i\phi} S |0\rangle. \quad (2.49)$$

Από τη σχέση 2.49 προκύπτουν οι απαιτούμενες συνθήκες για $\alpha_i \neq 0$. Όλες οι αρχικές καταστάσεις $|i\rangle$ μεταφέρονται στις συμμετρικά αντίθετες καταστάσεις $S|i\rangle = |N+1-i\rangle$. Αν η μεταβίβαση των καταστάσεων συμβαίνει σε χρόνο t_0 τότε από τη συμμετρία υπάρχει αναβίωση (revival) της κατάστασης του αρχικού spin σε χρόνο $2nt_0$ για ακέραιο n και τέλεια μεταβίβαση καταστάσεων για όλους τους χρόνους $(2n+1)t_0$.

2.3 Πλήρης μεταβίβαση των καταστάσεων με αλληλεπιδράσεις των spins πέρα από τους πρώτους γείτονες

Έστω ανοικτή αλυσίδα με $N+1$ spins τα οποία αλληλεπιδρούν με τους M γείτονες από δεξιά και τους M γείτονες από αριστερά αντίστοιχα [18]. Στο σχήμα 2.6 απεικονίζεται η ανοικτή αλυσίδα με αλληλεπιδράσεις μόνο με τους πρώτους και τους δεύτερους γείτονες.



Σχήμα 2.6: Ανοικτή αλυσίδα με $N+1$ spins με αλληλεπιδράσεις μόνο μεταξύ των πρώτων και των δεύτερων γειτόνων των spins και μαγνητικό πεδίο h_i για $0 \leq i \leq N$.

Η Χαμιλτονιανή $\mathbf{H}^{(M)}$ της αλυσίδας είναι:

$$\mathbf{H}^{(M)} = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{k=1}^M J_{i+k-1} (\sigma_i^x \sigma_{i+k}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+k}^y) + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N h_i (\sigma_i^z + 1), \quad (2.50)$$

όπου h_i είναι το μαγνητικό πεδίο για το i -οστό spin και οι συζεύξεις J_{i+k-1} είναι όλες θετικές. Η δράση της Χαμιλτονιανής $\mathbf{H}^{(M)}$ στις καταστάσεις $|\mathbf{i}\rangle$ είναι:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{(M)} |\mathbf{i}\rangle = & J_{i+M-1}^{(M)} |\mathbf{i} + \mathbf{M}\rangle + J_{i+M-2}^{(M-1)} |\mathbf{i} + \mathbf{M} - \mathbf{1}\rangle + \dots + J_i^{(1)} |\mathbf{i} + \mathbf{1}\rangle + h_i |\mathbf{i}\rangle + \\ & J_{i-1}^{(1)} |\mathbf{i} - \mathbf{1}\rangle + \dots + J_{i-M-1}^{(M)} |\mathbf{i} - \mathbf{M}\rangle. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Οι συνθήκες που ισχύουν είναι $J_i^{(k)} = 0$ για $i \leq k-1$ και $J_{N+1}^{(k)} = 0$.

Η εξίσωση που πρέπει να λυθεί είναι:

$$\mathbf{H}^{(M)} |\mathbf{i}\rangle = Q_M(\bar{J}) |\mathbf{i}\rangle, \quad (2.52)$$

όπου Q_M είναι ένα πολυώνυμο βαθμού $M < N$ σε ένα τριδιαγώνιο πίνακα $\bar{J}$ με συζεύξεις μόνο μεταξύ των πρώτων γειτόνων και επιτόπιους όρους μη μηδενικούς. Δηλαδή ο πίνακας $\bar{J}$ έχει παρόμοια μορφή με τον πίνακα J (πίνακας 2.23). Αν η μεταβίβαση είναι τέλεια και γίνεται μετά από χρόνο t με το ένα spin πάνω και όλα τα άλλα κάτω τότε θα πρέπει να ισχύει η συνθήκη:

$$e^{-it\mathbf{H}^{(M)}} |0\rangle = e^{i\phi} |N\rangle, \quad (2.53)$$

όπου ϕ είναι κάποια φάση. Με τη χρησιμοποίηση της σχέσης 2.25 η εξίσωση 2.53 γίνεται:

$$e^{-i\phi} e^{-itQ_M(\bar{x}_s)} = \bar{X}_N(\bar{x}_s) \quad (2.54)$$

Επειδή το δεξιό μέλος της εξίσωσης 2.54 παίρνει μόνο πραγματικές τιμές πρέπει:

$$\bar{X}_N(\bar{x}_s) = \pm 1, \quad s = 1, 2, \dots, N. \quad (2.55)$$

Έστω $\{p_k\}$ μία ακολουθία από ορθογώνια πολυώνυμα, για $y_1 < y_2 < \dots < y_i$ και $z_1 < z_2 < \dots < z_{i-1}$ είναι:

$$y_1 < z_1 < y_2 < z_2 < \dots < z_{i-1} < y_i, \quad (2.56)$$

μία ιδιότητα που ονομάζεται αλληλεπικάλυση των μηδενικών των p_i και p_{i-1} [17]. Εφαρμόζοντας αυτό το αποτέλεσμα στο $\bar{P}_{N+1}$ και $\bar{X}_N$ παρατηρείται ένα μηδέν στο $\bar{X}_N$ μεταξύ κάθε

ζεύγους $(\bar{x}_{s-1}, \bar{x}_s)$, $s=1, 2, \dots, N$ και το πρόσημο του x_N πρέπει να εναλλάσσεται με τις διαδοχικές ιδιοτιμές $\bar{x}_s$. Για να ικανοποιείται αυτό πρέπει $\bar{X}_N(\bar{x}_s) = (-1)^{N+s}$ (Σχέσεις 2.36 και 2.33). Δηλαδή πρέπει ο πίνακας J να είναι κατοπτρικά συμμετρικός. Απαραίτητη συνθήκη για να γίνεται τέλεια μεταβίβαση των κβαντικών καταστάσεων είναι να ικανοποιείται η συνθήκη $JR=RJ$. Αυτό φυσικά συνεπάγεται ότι το πολυώνυμο $Q_M(\bar{J})$ μετατίθεται με τον πίνακα R . Για τις συζεύξεις και το μαγνητικό πεδίο αντίστοιχα είναι:

$$J_i^{(k)} = J_{N-i+k}^{(k)}, \quad k = 1, 2, \dots, M \quad (2.57)$$

$$h_i = h_{N-i}, \quad k \leq i \leq N. \quad (2.58)$$

Η συνθήκη για τέλεια μεταβίβαση των καταστάσεων 2.54 λόγω της σχέσης 2.39 γίνεται:

$$e^{-i\phi} e^{-itQ_M(\bar{x}_s)} = (-1)^{N+s}. \quad (2.59)$$

Αυτό μεταφράζεται ως εξής:

$$tQ_M(\bar{x}_s) = -\phi + \pi(N + s + 2L_s), \quad s = 0, 1, \dots, N, \quad (2.60)$$

όπου L_s είναι τυχαίοι ακέραιοι που εξαρτώνται από το s . Η εξίσωση 2.60 οδηγεί σε περιορισμούς για το φάσμα του J και τους συντελεστές του Q_M και μαζί με την κατοπτρικά συμμετρική ιδιότητα του $\bar{J}$ παρέχει τις απαραίτητες και επαρκείς συνθήκες για την τέλεια μεταβίβαση των καταστάσεων.

Κεφάλαιο 3

Μελέτη της πλήρους μεταβίβασης των καταστάσεων σε τυχαίες θέσεις των γραμμικών αλυσίδων spin με τη μέθοδο Nelder-Mead

Στο Κεφάλαιο 3 αναλύεται η μεταβίβαση των καταστάσεων για τυχαίες θέσεις με αλληλεπιδράσεις μόνο με τους πρώτους γείτονες με τη βοήθεια της μεθόδου Nelder-Mead (Ενότητα 3.1) για τις ανοικτές (Ενότητα 3.2) και για τις κλειστές αλυσίδες (Ενότητα 3.3). Και στις δύο περιπτώσεις οι αλυσίδες είναι αντισιδηρομαγνητικές. Οι αλληλεπιδράσεις των spins είναι μόνο μεταξύ των πρώτων γειτόνων και δεν υπάρχει αλληλεπίδραση του συστήματος με το περιβάλλον. Οι αριθμητικοί υπολογισμοί με τη μέθοδο Nelder-Mead γίνονται για να βρεθεί πότε η μεταβίβαση των καταστάσεων είναι τέλεια για συζεύξεις που εν γένει είναι διαφορετικές μεταξύ τους μεγιστοποιώντας την πιστότητα F . Έτσι, ορίζονται κάποιες συνθήκες. Τέλος, στην ενότητα 3.4 αναφέρονται οι εφαρμογές που έχουν οι αλυσίδες spin στην τεχνολογία.

3.1 Μέθοδος Nelder-Mead

Η μεγιστοποίηση της πιστότητας και η εύρεση των συζεύξεων J_i των spins καθώς και του χρόνου t για τις οποίες αυτό μπορεί να επιτευχθεί μπορεί να γίνει με την εφαρμογή της μεθόδου Nelder-Mead [19]. Η μέθοδος Nelder-Mead είναι μία τεχνική βελτιστοποίησης βοηθώντας στο πρόβλημα εύρεσης σημείων της βέλτιστης τιμής μιας αντικειμενικής συνάρτησης $f(x)$ στην περίπτωση που αυτή δε μπορεί να βρεθεί αναλυτικά.

Στη μέθοδο Nelder-Mead χρησιμοποιείται ένα πολύεδρο που ονομάζεται simplex και χρησιμοποιείται για την εύρεση της βέλτιστης λύσης. Για αυτό η μέθοδος Nelder-Mead ονομάζεται και μέθοδος αναζήτησης simplex. Ανάλογα με τις διαστάσεις του χώρου (αριθμός παραμέτρων) το simplex έχει διαφορετική μορφή:

- Για τη μία διάσταση είναι γραμμή.
- Για τις δύο διαστάσεις είναι ένα τρίγωνο.
- Για τις τρεις διαστάσεις είναι ένα τετράεδρο.

Δηλαδή αν ο χώρος είναι N -διαστάσεων τότε το simplex είναι ένα πολύεδρο με $N+1$ κορυφές.

Ο αλγόριθμος ξεκινά με ένα τυχαίο simplex στο χώρο και σε κάθε επανάληψη γίνεται προσπάθεια να αναδιαμορφωθεί ή να μετακινηθεί μία κορυφή για την εύρεση της βέλτιστης λύσης. Οι τελευταίες επαναλήψεις του αλγορίθμου συνεπάγονται τη συρρίκνωση προς το εσωτερικό για την εύρεση του καλύτερου σημείου. Στο τέλος, επιστρέφονται οι κορυφές του simplex που αποδίδουν την βέλτιστη τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης $f(x)$.

Γίνεται η υπόθεση ότι ο χώρος είναι N -διαστάσεων, άρα το simplex αποτελείται από τα σημεία $x_1, x_2, \dots, x_{N+1}$. Η συνάρτηση που χρειάζεται να βελτιστοποιηθεί (να μεγιστοποιηθεί στη συγκεκριμένη περίπτωση) είναι η $f(x_1, x_2, \dots, x_{N+1})$ ($F(J_1, J_2, \dots, t)$ στις περιπτώσεις που θα μελετηθούν). Στην αρχή όλα τα σημεία ταξινομούνται έτσι ώστε η τιμή της συνάρτησης f για το πρώτο σημείο να είναι η χαμηλότερη και για το τελευταίο σημείο η υψηλότερη. Το πρώτο σημείο (χειρότερη τιμή) συμβολίζεται με x_h , το δεύτερο (δεύτερη χειρότερη τιμή) με x_s και το τελευταίο (καλύτερη τιμή) με x_l αντίστοιχα. Στη συνέχεια, υπολογίζεται η μέση τιμή από όλα τα σημεία εκτός από το πρώτο (x_h):

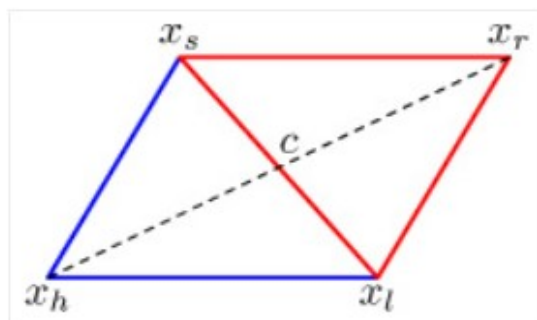
$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i \neq h} x_i. \quad (3.1)$$

Υστερα, πραγματοποιείται ο μετασχηματισμός με έναν από τους παρακάτω τρόπους:

- Ανάκλαση. Αυτός είναι ο πρώτος τρόπος μετασχηματισμού που δοκιμάζεται. Υπολογίζεται το ανακλώμενο σημείο ως εξής:

$$x_r = \bar{x} + \alpha(c - x_h), \quad (3.2)$$

όπου το α ονομάζεται παράμετρος ανάκλασης και ισούται συνήθως με τη μονάδα. Το σημείο x_r βρίσκεται στη γραμμή που ενώνει τα σημεία c και x_h όμως είναι μακριά από το σημείο x_h . Για ένα διδιάστατο πρόβλημα η ανάκλαση παριστάνεται στο σχήμα 3.1:



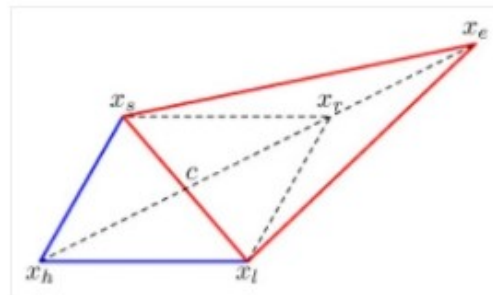
Σχήμα 3.1: Ανάκλαση σε διδιάστατο πρόβλημα για τη μέθοδο Nelder-Mead.

Αν $f(x_s) < f(x_r) < f(x_l)$ τότε το x_r είναι καλύτερο από το δεύτερο χειρότερο σημείο, όχι όμως από το τρέχον βέλτιστο σημείο και τότε αντικαθίσταται το x_h από το x_r στο simplex. Στη συνέχεια, γίνεται η επόμενη επανάληψη.

- Διεύρυνση. Αν το ανακλώμενο σημείο είναι καλύτερο από το τρέχον βέλτιστο σημείο $f(x_r) > f(x_l)$ γίνεται προσπάθεια να διερευνηθεί η πιθανότητα περαιτέρω. Το διευρυνόμενο σημείο ορίζεται ως:

$$x_e = \bar{x} + \gamma(x_r - c), \quad (3.3)$$

όπου το γ ονομάζεται παράμετρος διεύρυνσης και τις περισσότερες φορές ισούται με 2. Για ένα δισδιάστατο πρόβλημα η διεύρυνση παριστάνεται στο σχήμα 3.2:



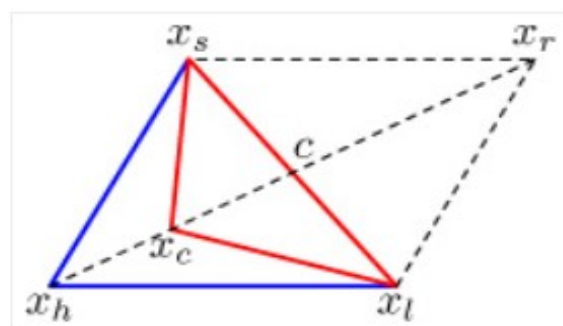
Σχήμα 3.2: Διεύρυνση σε δισδιάστατο πρόβλημα για τη μέθοδο Nelder-Mead.

Το x_h αντικαθίσταται με το καλύτερο από τα δύο σημεία: x_e και x_l στο simplex. Αυτό ονομάζεται “greedy optimization” και έχει αντικατασταθεί το χειρότερο σημείο με το καλύτερο από τις δύο επιλογές που υπήρχαν. Σε μία παραλλαγή που ονομάζεται “greedy expansion” αντικαθίσταται το x_h από το x_e εφόσον $f(x_e) > f(x_l)$. Αυτό γίνεται ανεξάρτητα από το αν το σημείο x_e είναι καλύτερο ή χειρότερο από το σημείο x_r .

- Συστολή. Γίνεται η υπόθεση ότι το ανακλώμενο σημείο είναι χειρότερο από το σημείο x_s . Σε αυτή την περίπτωση η διεύθυνση που ορίζεται από το x_r δεν είναι ιδανική για τη μετακίνηση. Έτσι, καταλήγει να συσταλεί το simplex. Το σημείο συστολής ορίζεται ως:

$$x_c = \bar{x} + \beta(x_h - c), \quad (3.4)$$

όπου το β ονομάζεται παράμετρος συστολής και συνήθως ισούται με 0.5. Για ένα διδιάστατο πρόβλημα η συστολή παριστάνεται στο σχήμα 3.3:



Σχήμα 3.3: Συστολή σε δισδιάστατο πρόβλημα για τη μέθοδο Nelder-Mead.

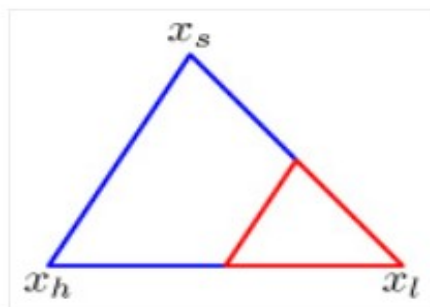
Αν $f(x_c) > f(x_h)$ αυτό σημαίνει ότι το σημείο που συστέλλεται είναι καλύτερο από το τρέχον χειρότερο και τότε αντικαθίσταται το σημείο x_h από το σημείο x_c στο simplex. Ωστόσο, αν δεν είναι αυτή η περίπτωση τότε μένει η τελευταία λύση: η συρρίκνωση σύστολης.

- Συρρίκνωση συστολής. Σε αυτή την περίπτωση ξαναορίζεται όλο το simplex. Κρατάται μόνο το καλύτερο σημείο x_l και ορίζονται όλα τα άλλα σε σχέση με αυτό και τα προη-

γούμενα σημεία. Το j -οστό καινούργιο σημείο ορίζεται ως εξής:

$$x_j = x_l + \delta(x_j - x_l), \quad (3.5)$$

όπου το δ ονομάζεται παράμετρος συρρίκνωσης και τις περισσότερες φορές ισούται με 0.5. Ουσιαστικά, με αυτό τον ορισμό κάθε σημείο του simplex μετακινείται προς το τρέχον καλύτερο σημείο. Για ένα δισδιάστατο πρόβλημα η συρρίκνωση συστολής παριστάνεται στο σχήμα 3.4:



Σχήμα 3.4: Συρρίκνωση συστολής σε δισδιάστατο πρόβλημα για τη μέθοδο Nelder-Mead.

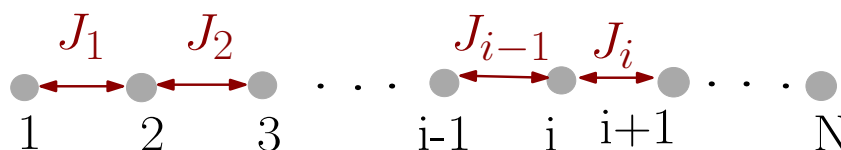
Αυτός ο μετασχηματισμός είναι ο πιο χρονοβόρος σε σχέση με τους προηγούμενους, επειδή αντικαθίστανται πολλαπλά όλα τα σημεία που ανήκουν στο simplex εκτός εκτός από ένα. Ωστόσο, στην πράξη η συρρίκνωση συστολής εφαρμόζεται σπάνια, με αποτέλεσμα σε πολλές εφαρμογές της μεθόδου Nelder-Mead να παραλείπεται αυτό το βήμα, κάνοντας συστολή αντίστοιχα.

Τερματισμός: Ο τερματισμός συνήθως υλοποιείται όταν:

- Ένας δεδομένος αριθμός επαναλήψεων επιτυγχάνεται.
- Η τρέχουσα βέλτιστη λύση φτάνει σε κάποιο προκαθορισμένο επιθυμητό όριο.

3.2 Πλήρης μεταβίβαση των καταστάσεων σε ανοικτές αλυσίδες spin

Η πλήρης μεταβίβαση των κβαντικών καταστάσεων (full state transfer) σε τυχαίες θέσεις σε ανοικτές αλυσίδες (open chains) έχει μελετηθεί πλήρως και για περιττό και για άρτιο αριθμό spins. Έχουν γίνει αριθμητικοί υπολογισμοί ώστε να βρεθούν οι βέλτιστοι χρόνοι και οι αντίστοιχες τιμές των συζεύξεων μεταξύ των spins. Στο σχήμα 3.5 απεικονίζεται η ανοικτή αλυσίδα που μελετήθηκε με N spins.



Σχήμα 3.5: Γραμμική ανοικτή αλυσίδα με N spins με αλληλεπιδράσεις μόνο μεταξύ των πρώτων γειτόνων χωρίς την εφαρμογή μαγνητικού πεδίου.

Η Χαμιλτονιανή της ανοικτής αλυσίδας spin $\mathbf{H}_{\text{op}}$ γράφεται:

$$\mathbf{H}_{\text{op}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-1} J_i \boldsymbol{\sigma}_i^x \cdot \boldsymbol{\sigma}_{i+1}^x + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-1} J_i \boldsymbol{\sigma}_i^y \cdot \boldsymbol{\sigma}_{i+1}^y. \quad (3.6)$$

Όλες οι τιμές των συζεύξεων J_i είναι θετικές, οπότε η αλυσίδα είναι αντισιδηρομαγνητική. Με το συμβολισμό J_i εννοείται η σύζευξη μεταξύ του i -οστού και του $(i+1)$ -οστού spin. Σε όλη την ενότητα έχει θεωρηθεί η σύμβαση ότι $|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ και $|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, οπότε στην αρχική κατάσταση της αλυσίδας το ένα spin έχει προς τα πάνω και όλα τα άλλα προς τα κάτω. Η Χαμιλτονιανή $\mathbf{H}_{\text{op}}$ (Σχέση 3.6) σε μορφή πίνακα για τα N spins στη βάση $\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |N\rangle\}$ γράφεται:

$$\mathbf{H}_{\text{op}} = \begin{pmatrix} \langle 1|\mathbf{H}_{\text{op}}|1\rangle & \langle 1|\mathbf{H}_{\text{op}}|2\rangle & \langle 1|\mathbf{H}_{\text{op}}|3\rangle & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \langle 1|\mathbf{H}_{\text{op}}|N\rangle \\ \langle 2|\mathbf{H}_{\text{op}}|1\rangle & \langle 2|\mathbf{H}_{\text{op}}|2\rangle & & & & & & & \\ \langle 3|\mathbf{H}_{\text{op}}|1\rangle & & & & & & & & \\ \cdot & & & \cdot & & & & & \\ \cdot & & & & \cdot & & & & \\ \cdot & & & & & \cdot & & & \\ \langle N|\mathbf{H}_{\text{op}}|1\rangle & & & & & & \langle N|\mathbf{H}_{\text{op}}|N-1\rangle & \langle N|\mathbf{H}_{\text{op}}|N\rangle \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\mathbf{H}_{\text{op}} = \begin{pmatrix} 0 & J_1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ J_1 & 0 & J_2 & 0 & 0 & & & & \\ 0 & J_2 & 0 & J_3 & & & & & \\ 0 & 0 & J_3 & 0 & & & & & \\ \cdot & & & \cdot & & & & & \\ \cdot & & & & \cdot & & & & \\ \cdot & & & & & \cdot & & & \\ 0 & & & & & J_{N-1} & & & \\ & & & & & J_{N-1} & & & 0 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Αυτή η μορφή του τριδιαγώνιου πίνακα (Σχέση 3.7) ονομάζεται πίνακας Jacobi. Λύνοντας την εξίσωση Schrodinger $\mathbf{H}_{\text{op}}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$, όπου $|\Psi\rangle$ είναι η κυματοσυνάρτηση του συστήματος και E η συνολική του ενέργεια, βρίσκονται οι ρίζες του προβλήματος που είναι οι ιδιοτιμές της ενέργειας και τα αντίστοιχα ιδιοανύσματα που αντιστοιχούν σε αυτές. Το ιδιοάνυσμα που αντιστοιχεί στην i -οστή ιδιοτιμή της ενέργειας E_i είναι $|u_i\rangle = (u_{1i}, u_{2i}, \dots, u_{Ni})^T$. Επειδή το φάσμα ιδιοτιμών του συστήματος που μελετάται είναι διακριτό όλες οι συνιστώσες u_{jk} των ιδιοανυσμάτων $|u_k\rangle$ είναι πραγματικές. Η Χαμιλτονιανή $\mathbf{H}_{\text{op}}$ είναι ένας ερμητιανός πίνακας και για αυτό οι συζεύξεις J_i , αλλά και οι λύσεις του συστήματος E_i είναι πραγματικές.

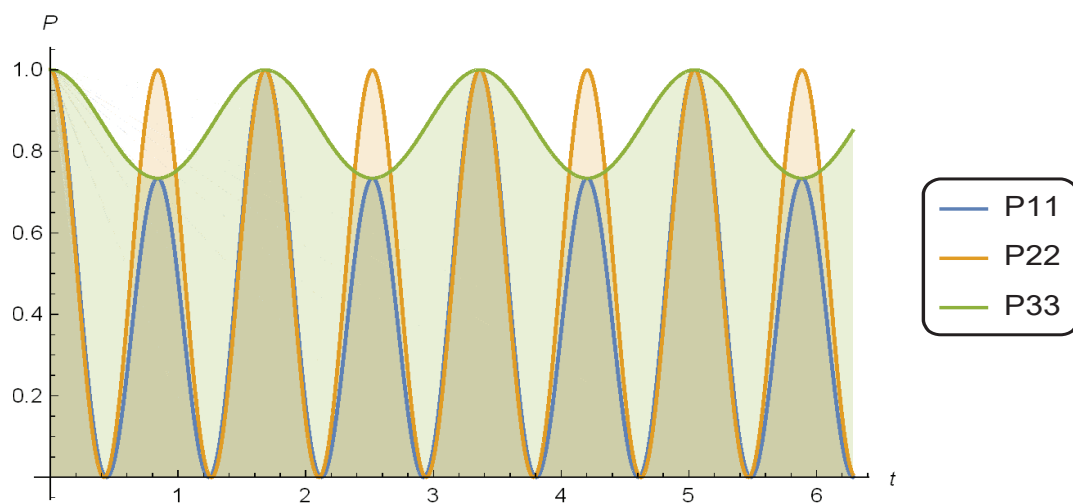
Οι εξισώσεις που προκύπτουν από την εξίσωση Schroedinger για τις ενέργειες E_i είναι οι εξής:

$$\left\{ \begin{array}{l} J_1 u_{2i} = E_i u_{1i} \\ J_1 u_{1i} + J_2 u_{3i} = E_i u_{2i} \\ J_2 u_{2i} + J_3 u_{4i} = E_i u_{3i} \\ \quad \quad \quad \cdot \\ \quad \quad \quad \cdot \\ \quad \quad \quad \cdot \\ J_{N-1} u_{N-1,i} = E_i u_{Ni} \end{array} \right. \quad (3.8)$$

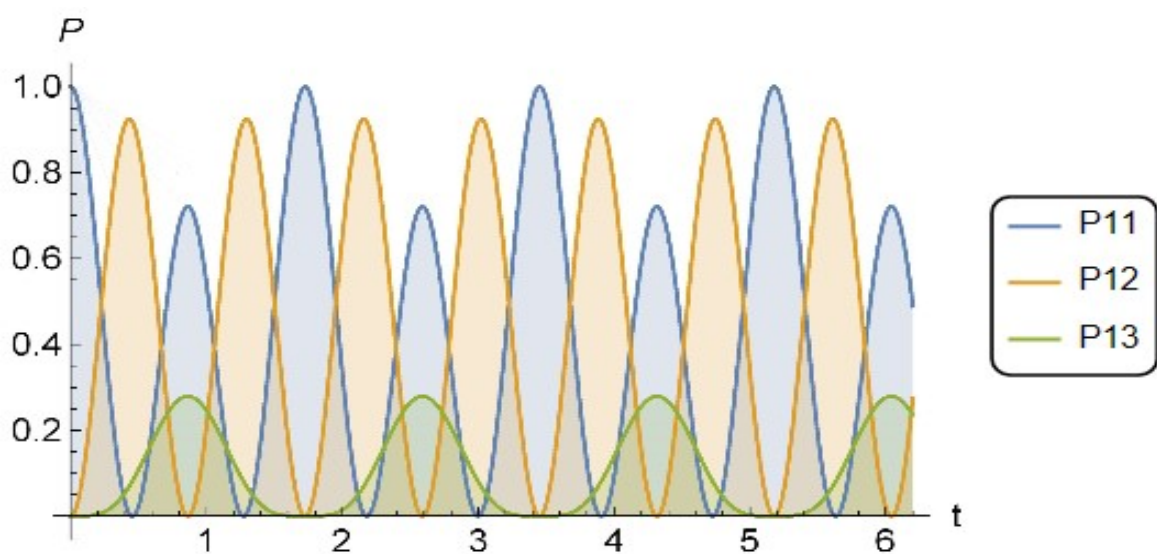
Παίρνοντας όλες τις συνιστώσες του ιδιοανύσματος i θετικές και θέτοντας με s_j το αντίστοιχο πρόσημο της συνιστώσας u_{ji} του ιδιοανύσματος $|u_i\rangle$, τότε το σύστημα των εξισώσεων 3.8 γίνεται:

$$\left\{ \begin{array}{l} J_1 u_{2i} s_2 = E_i u_{1i} s_1 \\ J_1 u_{1i} s_1 + J_2 u_{3i} s_3 = E_i u_{2i} s_2 \\ J_2 u_{2i} s_2 + J_3 u_{4i} s_4 = E_i u_{3i} s_3 \\ \quad \quad \quad \cdot \\ \quad \quad \quad \cdot \\ \quad \quad \quad \cdot \\ J_{N-1} u_{N-1,i} s_{N-1} = E_i u_{Ni} s_N \end{array} \right. \quad (3.9)$$

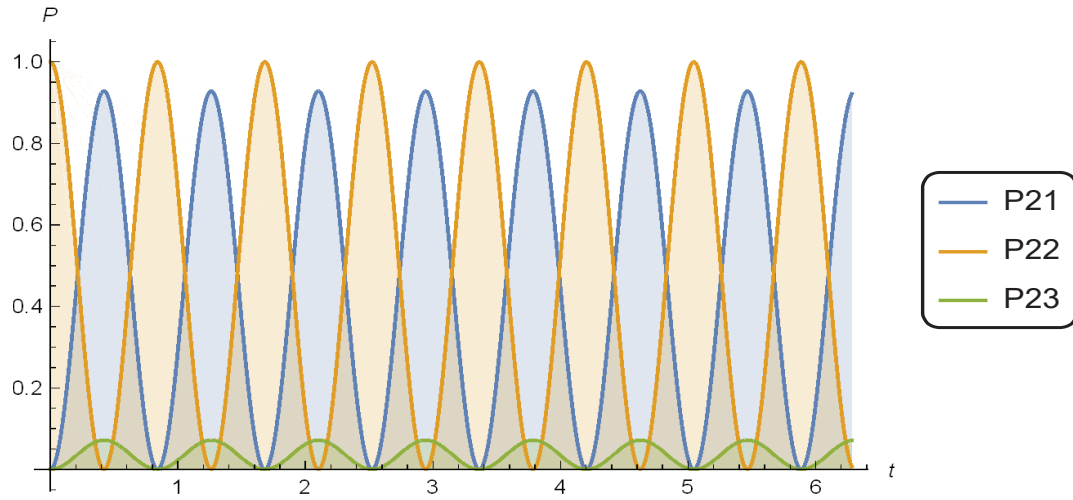
Στα σχήματα 3.6, 3.7, 3.8 και 3.9 απεικονίζεται η πιστότητα F (ή αντίστοιχα η πιθανότητα P λόγω των καθαρών καταστάσεων) συναρτήσει του χρόνου t για διάφορες μεταβάσεις για αριθμό spins $N=3$ με $J_1 = 3.6$ και $J_2 = 1.0$ που έχουν επιλεγθεί τυχαία. Παρατηρείται ότι οι αναβιώσεις (ή αλλιώς revivals, δηλαδή οι μεταβάσεις $|i\rangle \rightarrow |i\rangle$) υλοποιούνται σε όλες τις περιπτώσεις, ενώ οι υπόλοιπες μεταβάσεις όχι.



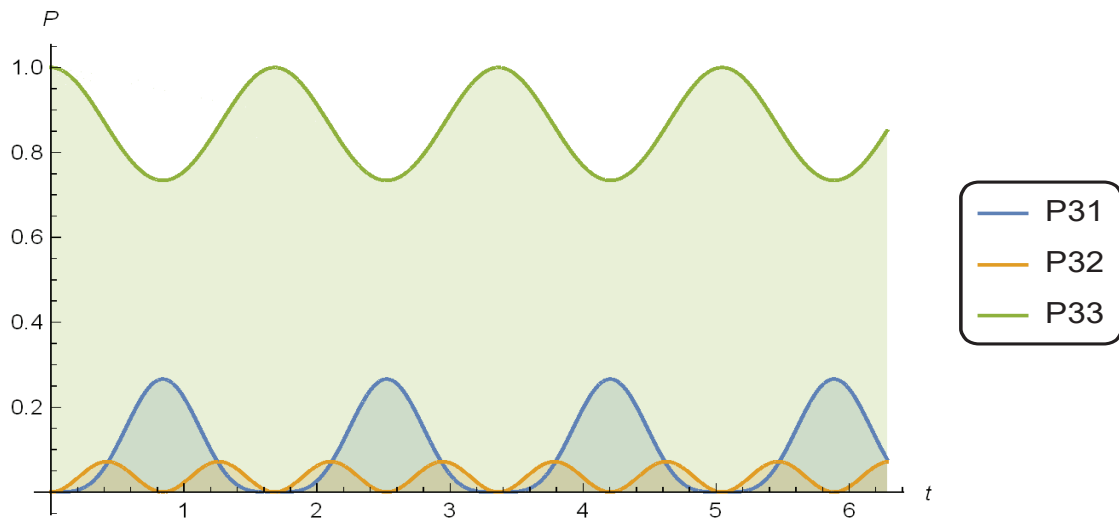
Σχήμα 3.6: Πιστότητα F (ή αλλιώς πιθανότητα P) συναρτήσει του χρόνου t για spins $N=3$ για τις μεταβάσεις $|1\rangle \rightarrow |1\rangle$, $|2\rangle \rightarrow |2\rangle$ και $|3\rangle \rightarrow |3\rangle$ (revivals) όταν $J_1 = 3.6$ και $J_2 = 1.0$.



Σχήμα 3.7: Πιστότητα F (ή αλλιώς πιθανότητα P) συναρτήσει του χρόνου t για spins $N=3$ για τις μεταβάσεις $|1\rangle \rightarrow |1\rangle$, $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ και $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$ όταν $J_1 = 3.6$ και $J_2 = 1.0$.



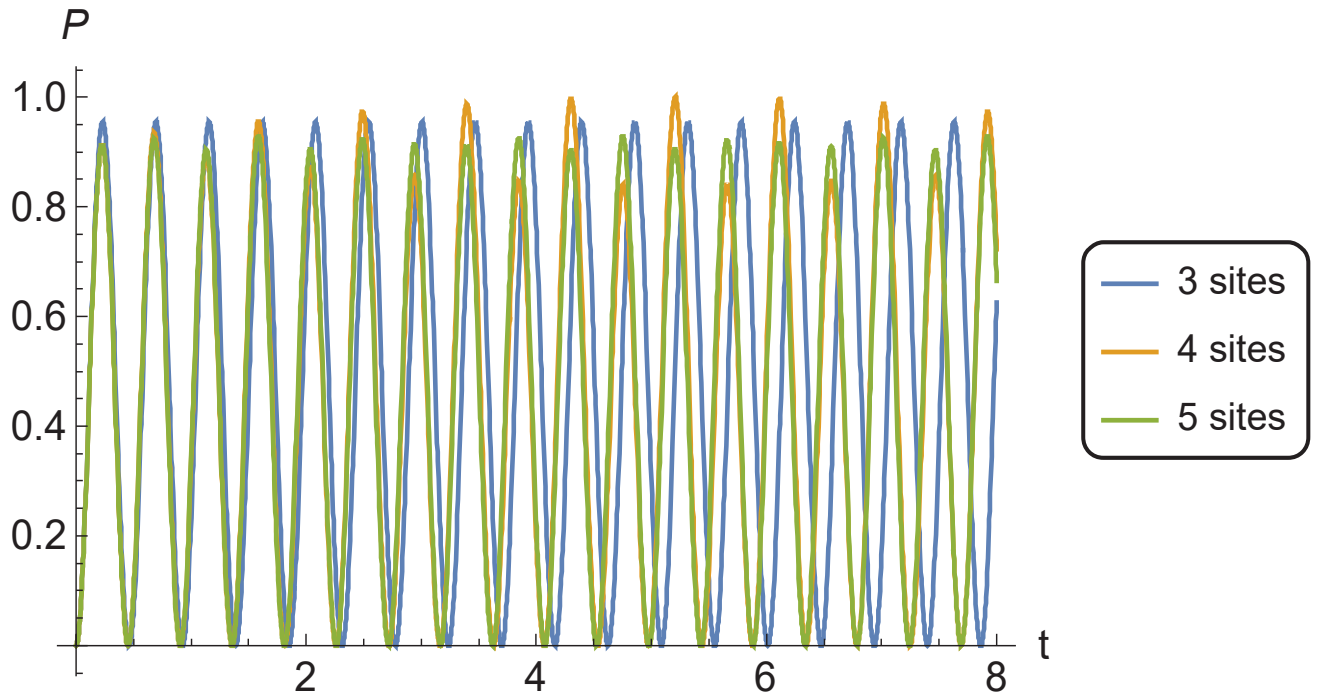
Σχήμα 3.8: Πιστότητα F (ή αλλιώς πιθανότητα P) συναρτήσει του χρόνου t για spins $N=3$ για τις μεταβάσεις $|2\rangle \rightarrow |1\rangle$, $|2\rangle \rightarrow |2\rangle$ και $|2\rangle \rightarrow |3\rangle$ όταν $J_1 = 3.6$ και $J_2 = 1.0$.



Σχήμα 3.9: Πιστότητα F (ή αλλιώς πιθανότητα P) συναρτήσει του χρόνου t για spins $N=3$ για τις μεταβάσεις $|3\rangle \rightarrow |1\rangle$, $|3\rangle \rightarrow |2\rangle$ και $|3\rangle \rightarrow |3\rangle$ όταν $J_1 = 3.6$ και $J_2 = 1.0$.

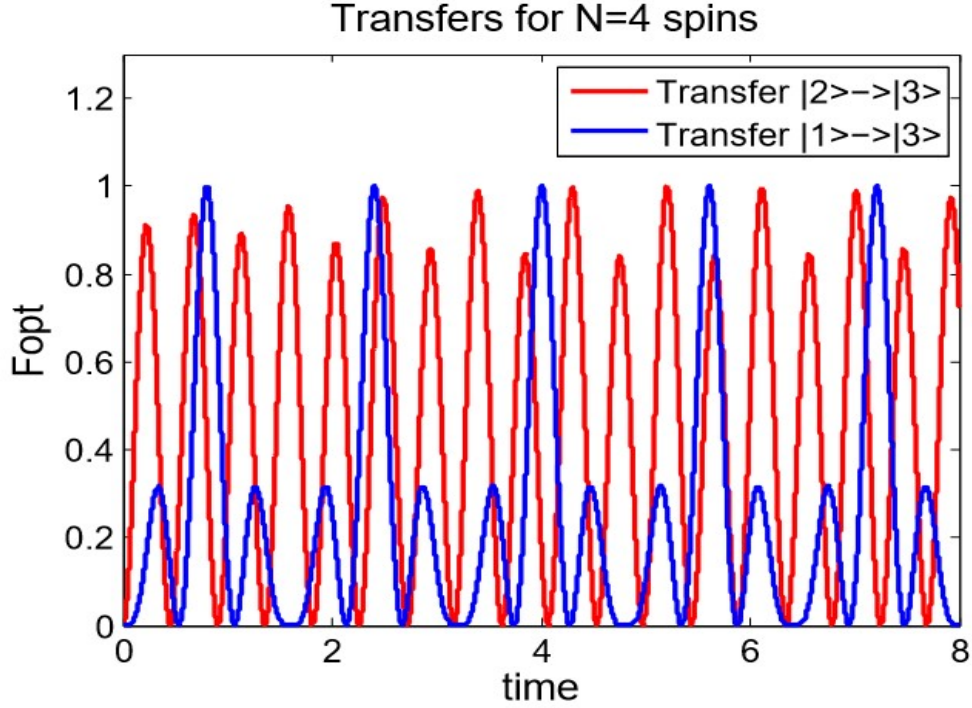
Στο σχήμα 3.18 απεικονίζεται η πιστότητα F συναρτήσει του χρόνου t για τη μετάβαση

$|2\rangle \rightarrow |3\rangle$ στα $N=3$, $N=4$ και $N=5$ spins αντίστοιχα. Για τα $N=3$ spins είναι $J_1 = J_3 = 2.2679$, $J_2 = 4.5799$, για τα $N=4$ spins είναι $J_1 = J_3 = 2.2679$, $J_2 = 4.5799$, $J_4 = 7.1493$ και για τα $N=5$ spins είναι $J_1 = J_3 = 2.2679$, $J_2 = 4.5799$, $J_4 = 7.1493$, $J_5 = 1.0$. Παρατηρείται ότι για παρόμοιες τιμές στα J_i δεν είναι όλες οι μεταβάσεις τέλειες για διαφορετικό αριθμό spins N .



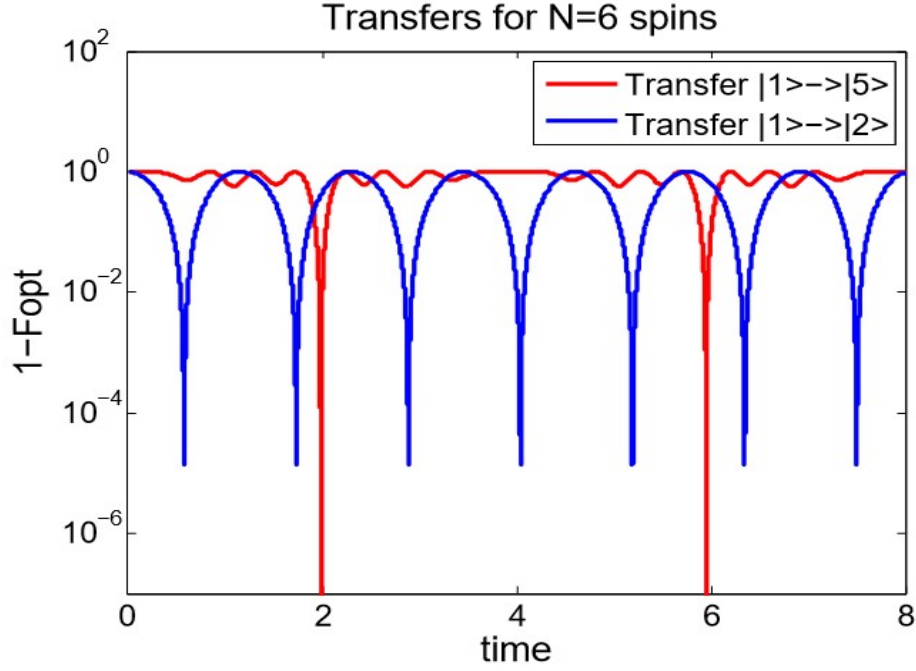
Σχήμα 3.10: Πιστότητα F (ή αλλιώς πιθανότητα P) συναρτήσει του χρόνου t για spins $N=3$, $N=4$ και $N=5$ για τη μετάβαση $|2\rangle \rightarrow |3\rangle$. Είναι $J_1 = 1.447$, $J_2 = 6.6378$ για $N=3$, $J_1 = J_3 = 1.447$, $J_2 = 6.6378$ για $N=4$ και $J_1 = J_3 = 1.447$, $J_2 = 6.6378$, $J_4 = 1.0$ για $N=5$ spins.

Επίσης, στο σχήμα 3.11 απεικονίζεται η μέγιστη πιστότητα F_{max} συναρτήσει του χρόνου t για $N=4$ spins για τις μεταβάσεις $|2\rangle \rightarrow |3\rangle$ και $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$ για τιμές συζεύξεων $J_1 = J_3 = 1.4470$, $J_2 = 6.6378$ και $J_1 = 6.1978$, $J_2 = 3.7187$, $J_3 = 4.9582$ αντίστοιχα από τη βελτιστοποίηση με τη χρησιμοποίηση της μεθόδου Nelder - Mead. Επειδή στη μετάβαση $|2\rangle \rightarrow |3\rangle$ οι συζεύξεις J_1 και J_3 ισούνται παρατηρείται τοπική συμμετρία.



Σχήμα 3.11: Πιστότητα F συναρτήσει του χρόνου t για $N=4$ spins τις μεταβάσεις $|2\rangle \rightarrow |3\rangle$ και $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$ για $J_1 = J_3 = 1.4470$, $J_2 = 6.6378$ και $J_1 = 6.1978$, $J_2 = 3.7187$, $J_3 = 4.9582$ αντίστοιχα.

Στο σχήμα 3.12 απεικονίζεται το ημιλογαριθμικό γράφημα $1-F_{opt}$ συναρτήσει του χρόνου t για $N=6$ spins για τις μεταβάσεις $|1\rangle \rightarrow |5\rangle$ και $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ αντίστοιχα που η πρώτη μπορεί να είναι πλήρης ενώ η δεύτερη όχι, χρησιμοποιώντας τη μέθοδο βελτιστοποίησης Nelder - Mead.



Σχήμα 3.12: Ημιλογαριθμικό γράφημα τις ποσότητας $1-F_{opt}$ συναρτήσει του χρόνου t για $N=6$ spins για τις μεταβάσεις $|1\rangle \rightarrow |5\rangle$ και $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ αντίστοιχα.

Όπως φαίνεται και από το σχήμα 3.12 μετάβαση που έχει ελάχιστη τιμή μέχρι περίπου 10^{-5} για το μέγεθος $1-F_{opt}$ ύστερα από τη βελτιστοποίηση με τη βοήθεια της μεθόδου Nelder - Mead δε θεωρείται πλήρης και ως έχει τιμή ελάχιστη κοντά στο μηδέν. Αυτό συμβαίνει διότι η πληροφορία μεταφέρεται διαδοχικά πολλές φορές καθώς υπάρχουν αρκετοί διάδρομοι μεταφορών στους κβαντικούς επεξεργαστές. Έτσι, αυξάνεται το σφάλμα με αυτό τον τρόπο και προκειμένου να ελαχιστοποιηθεί το σφάλμα τέλεια θεωρείται η μεταβίβαση στην οποία το μέγεθος $1-F_{opt}$ παίρνει ελάχιστη τιμή της τάξης του 10^{-8} και κάτω. Για παράδειγμα, στα ηχητικά σήματα δεν παρατηρείται πόλωση, εφόσον ταξιδεύουν στην ίδια διεύθυνση με αυτή που κινούνται, οπότε σφάλμα αυτής της τάξης δημιουργεί μεγάλο πρόβλημα στη μεταβίβαση.

Τα αποτελέσματα της έρευνας έδειξαν ότι για μονό αριθμό spins όπως $N=3, 5, \dots$ μπορεί να γίνει σε όλες τις περιπτώσεις τέλεια μεταβίβαση των καταστάσεων από το πρώτο στο τελευταίο spin $|1\rangle \rightarrow |N\rangle$, από το δεύτερο στο προτελευταίο spin $|2\rangle \rightarrow |N-1\rangle$ και αυτό συνεχίζεται συμμετρικά για αριθμό spins μέχρι 10 ($N \leq 10$). Για άρτιο αριθμό spins όπως $N=4, 6, \dots$ μπορούν να γίνουν πάντα πλήρως οι μεταβάσεις που προαναφέρθηκαν, καθώς επίσης και η πλήρης μεταβίβαση των καταστάσεων από την πρώτη στην προτελευταία θέση $|1\rangle \rightarrow |N-1\rangle$ για αριθμό spins μέχρι 10 και η μετάβαση $|1\rangle \rightarrow |6\rangle$ για $N=8$. Επιπλέον, τα revivals δηλαδή οι μεταβάσεις $|i\rangle \rightarrow |i\rangle$, για $1 \leq i \leq N$ μετά από χρόνο t γίνονται πάντα τέλεια και για άρτιο και για μονό αριθμό N . Οι συζεύξεις J_i σε κάποιες περιπτώσεις προκύπτουν να έχουν ίδια τιμή (τοπικές συμμετρίες). Για παράδειγμα για $N=4$ στην πλήρη μετάβαση $|1\rangle \rightarrow |4\rangle$ πρέπει υποχρεωτικά $J_1 = J_3$. Υπάρχουν όμως και περιπτώσεις όπου ορισμένες συζεύξεις J_i έχουν τιμές που είναι πολλαπλάσιο κάποιων άλλων συζεύξεων. Για παράδειγμα, για $N=4$ για την πλήρη μετάβαση $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$ πρέπει υποχρεωτικά $J_1 = aJ_2$ και $J_3 = bJ_2$, όπου $a = \frac{m^2 + n^2}{m^2 - n^2}$ και $b = \sqrt{a^2 - 1}$ με τους αριθμούς m και n να είναι ακέραιοι. Οπότε οι αριθμοί a και b είναι ρητοί.

Ακόμα, το χρονικό διάστημα μέσα στο οποίο γίνεται τέλεια μεταβίβαση των καταστάσεων σε πολλές περιπτώσεις είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του π .

Ο πίνακας της Χαμιλτονιανής για την ανοικτή αλυσίδα που μελετάται έχει ορισμένα χαρακτηριστικά. Αρχικά, το χαρακτηριστικό πολυώνυμό του από την επίλυση της εξίσωσης Schroedinger γράφεται πάντα:

$$E^N - E^{N-2}f_1(J_i) + E^{N-4}f_2(J_i) + \dots + f_N(J_i) = 0, \quad (3.10)$$

όπου $f(J_i)$ είναι μία τυχαία συνάρτηση του J_i , για κάθε N . Επιπλέον, οι ιδιοτιμές της ενέργειας E_i είναι πάντα συμμετρικές ως προς τη μηδενική. Οι ενέργειες E_i είναι αριθμημένες με το δείκτη i ξεκινώντας από αυτή με τη μικρότερη τιμή και καταλήγοντας σε αυτή με την υψηλότερη, ώστε

$$E_1 = -E_N, E_2 = -E_{N-1}, E_3 = -E_{N-2}, \dots \quad (3.11)$$

Για τις μεταβάσεις που είναι πλήρεις πρέπει η πιστότητα των μεταβάσεων πρέπει να ισούται υποχρεωτικά με τη μονάδα. Για παράδειγμα η πιστότητα για την πλήρη μετάβαση $|m\rangle \rightarrow |n\rangle$ σε χρόνο t είναι:

$$F = |\langle n|m(t)\rangle|^2 = 1. \quad (3.12)$$

Ακόμα, το γινόμενο $E_i t^*$, όπου t^* το χρονικό διάστημα μέσα στο οποίο γίνεται τέλεια μεταβίβαση, χρειάζεται να είναι ακέραιο ή ημιακέραιο πολλαπλάσιο του π . Αυτό σημαίνει ότι ο λόγος των ενεργειών είναι ρητός. Επίσης, οι συνιστώσες u_{mi} και u_{ni} του ιδιοανύσματος $|u_i\rangle$ για τη μετάβαση $|m\rangle \rightarrow |n\rangle$ είναι ίσες κατά απόλυτη τιμή για όλα τα ιδιοανύσματα με $1 \leq i \leq N$: $|u_{mi}| = |u_{ni}| \Rightarrow u_{mi} = u_{ni}$ ή $u_{mi} = -u_{ni}$.

Έστω ότι μελετάται η πλήρης μετάβαση από το πρώτο στο m -οστό spin $|1\rangle \rightarrow |m\rangle$. Με τη βοήθεια του συστήματος των εξισώσεων 3.9 γίνεται αντικατάσταση του u_{2i} στη δεύτερη εξίσωση και μετά του u_{3i} στην τρίτη εξίσωση και αυτό συνεχίζεται μέχρι την m -οστή εξίσωση. Τα αποτελέσματα των αντικαταστάσεων είναι με τη σειρά τα εξής:

$$\begin{aligned} u_{2i} &= \frac{E_i s_1}{J_1} u_{1i} \\ u_{3i} &= \frac{E_i^2 J_1^2 s_1 s_2}{J_1 J_2} u_{1i} \\ &\vdots \\ &\vdots \\ &\vdots \end{aligned}$$

$$u_{mi} = \frac{(E_i^{m-1} - E_{i,m \geq 3}^{m-3} \sum_{i=1}^{m-2} J_i^2 + E_{i,m \geq 5}^{m-5} \sum_{i \neq k} \sum_{i=1}^{m-2} J_i^2 J_k^2 + \dots) \prod_{i=1}^{m-1} s_i}{\prod_{i=1}^{m-1} J_i} u_{1i} \quad (3.13)$$

Όταν γίνεται πλήρης μεταβίβαση πρέπει $|u_{1i}| = |u_{mi}|$, οπότε $u_{1i} = u_{mi}$ ή $u_{1i} = -u_{mi}$. Τότε, η εξίσωση του συστήματος 3.13 γράφεται:

$$E_i^{m-1} - E_i^{m-3} \sum_{i=1}^{m-2} J_i^2 + \dots + \prod_{i=1}^{m-1} J_i = 0 \quad (3.14)$$

όταν $u_{1i} = u_{mi}$ και

$$E_i^{m-1} - E_i^{m-3} \sum_{i=1}^{m-2} J_i^2 + \dots - \prod_{i=1}^{m-1} J_i = 0 \quad (3.15)$$

όταν $u_{1i} = -u_{mi}$. Επομένως για τη μεταβίβαση από το πρώτο στο m-οστό spin σε ανοικτή αλυσίδα πρέπει να ικανοποιούνται οι συνθήκες 3.14 και 3.15 για όλα τα i.

Έστω ότι η αρχική κατάσταση είναι:

$$|1\rangle = \sum_{i=1}^N u_{i1} |\epsilon_i\rangle. \quad (3.16)$$

Με τη χρονική εξέλιξη γίνεται:

$$|1(t)\rangle = \sum_{i=1}^N u_{i1} e^{-iE_i t} |\epsilon_i\rangle. \quad (3.17)$$

Έστω ότι η τελική κατάσταση είναι η $|m\rangle$. Είναι:

$$\langle m|1(t)\rangle = \sum_{i=1}^N u_{1i} u_{mi} e^{-iE_i t} = u_{11} u_{m1} e^{-iE_1 t} + u_{12} u_{m2} e^{-iE_2 t} + \dots + u_{1N} u_{mN} e^{-iE_N t} \quad (3.18)$$

Η πιστότητα για αυτή τη μετάβαση δίνεται από τη σχέση $F = |\langle m|1(t)\rangle|^2$. Οι ενέργειες E_i είναι αντίθετες σύμφωνα με τις σχέσεις 3.11, δηλαδή $E_1 = -E_N, E_2 = -E_{N-1}, \dots$. Όταν η μετάβαση είναι τέλεια τότε:

$$\left\{ \begin{array}{l} |u_{11} u_{m1}| = |u_{1N} u_{mN}| \\ |u_{12} u_{m2}| = |u_{1,N-1} u_{m,N-1}| \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{array} \right. \quad (3.19)$$

ώστε η σχέση 3.18 να είναι μία σειρά από ημίτονα και συνημίτονα και να μπορούν για συγκεκριμένα χρονικά να διαστήματα να έχουν άθροισμα ίσο με τη μονάδα. Όταν το m είναι περιττό τότε:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{11} u_{m1} = u_{1N} u_{mN} \\ u_{12} u_{m2} = u_{1,N-1} u_{m,N-1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{array} \right. \quad (3.20)$$

και τότε η σχέση 3.18 γίνεται για N άρτιο:

$$\langle m|1(t)\rangle = 2 \left(\pm u_{11} u_{m1} \cos(E_1 t) \pm u_{12} u_{m2} \cos(E_2 t) \pm \dots \pm u_{1, \frac{N}{2}} u_{m, \frac{N}{2}} \cos\left(E_{\frac{N}{2}} t\right) \right) \quad (3.21)$$

και για N περιττό:

$$\langle m|1(t)\rangle = 2 \left(\pm u_{11} u_{m1} \cos(E_1 t) \pm u_{12} u_{m2} \cos(E_2 t) \pm \dots \pm u_{1, \frac{N-1}{2}} u_{m, \frac{N-1}{2}} \cos\left(E_{\frac{N-1}{2}} t\right) \right) +$$

$$u_{1, \frac{N+1}{2}} u_{m, \frac{N+1}{2}} e^{-iE_{\frac{N+1}{2}} t} \quad (3.22)$$

Όταν το m είναι ζυγό τότε:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{11}u_{m1} = -u_{1N}u_{mN} \\ u_{12}u_{m2} = -u_{1,N-1}u_{m,N-1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{array} \right. \quad (3.23)$$

και τότε η σχέση 3.18 γίνεται για N άρτιο:

$$\langle \mathbf{m} | \mathbf{1}(t) \rangle = 2i \left(\pm u_{11}u_{m1} \sin(E_1 t) \pm u_{12}u_{m2} \sin(E_2 t) \pm \dots \pm u_{1, \frac{N+1}{2}} u_{m, \frac{N+1}{2}} \sin \left(E_{\frac{N+1}{2}} t \right) \right) \quad (3.24)$$

και για N περιττό:

$$\langle \mathbf{m} | \mathbf{1}(t) \rangle = 2 \left(\pm u_{11}u_{m1} \sin(E_1 t) \pm u_{12}u_{m2} \sin(E_2 t) \pm \dots \pm u_{1, \frac{N-1}{2}} u_{m, \frac{N-1}{2}} \sin \left(E_{\frac{N-1}{2}} t \right) \right) + u_{1, \frac{N+1}{2}} u_{m, \frac{N+1}{2}} e^{-iE_{\frac{N+1}{2}} t} \quad (3.25)$$

Λόγω των αθροισμάτων 3.21 και 3.24 για τις ενέργειες E_i είναι $E_i t = n\pi$ ή $E_i t = (2n+1)\frac{\pi}{2}$, όπου n είναι ακέραιος, ανάλογα με το αν η σχέση περιέχει συνημίτονα ή ημίτονα αντίστοιχα για την εύρεση του ακροτάτου.

Για παράδειγμα για N=6 η μετάβαση $|1\rangle \rightarrow |4\rangle$ δε γίνεται. Αν υποθεθεί ότι η μετάβαση γίνεται, τότε $u_1 = u_4$ ή $u_1 = -u_4$ (συνθήκες παραλληλίας). Η σχέση μεταξύ των συντελεστών u_1 και u_4 από το σύστημα εξισώσεων 3.8 είναι:

$$u_4 = \frac{E^3 - J_1^2 E - J_2^2 E}{J_1 J_2 J_3} \psi_1 \quad (3.26)$$

και εφαρμόζοντας τις συνθήκες της παραλληλίας η εξίσωση 3.26 γίνεται:

$$E^3 - E(J_1^2 + J_2^2) \pm J_1 J_2 J_3 = 0. \quad (3.27)$$

Για ευκολία ορίζονται τα εξής:

$$\alpha = J_1^2 + J_2^2 \quad (3.28)$$

$$c = J_1 J_2 J_3 \quad (3.29)$$

Για να γίνεται η μετάβαση επιλέγεται $E_1 = 1$ και $t = \frac{\pi}{2}$, ώστε το $\sin E_1 t$ στον πρώτο όρο της εξίσωσης 3.24 να ισούται με τη μονάδα. Για να μεγιστοποιείται η πιστότητα F θα πρέπει και η ενέργεια E_2 να ισούται με μονό αριθμό. Θα δειχθεί ότι η E_3 δε μπορεί να είναι μονός αριθμός, οπότε ότι δε μπορεί να γίνει η μετάβαση. Αντικαθιστώντας την τιμή $E_1 = 1$ στην εξίσωση 3.27 αυτή γίνεται:

$$1 - \alpha \pm c = 0 \quad (3.30)$$

και αντίστοιχα την τιμή $E_2 = M$ είναι:

$$M^3 - M\alpha \pm c = 0. \quad (3.31)$$

Συνδυάζοντας τις εξισώσεις 3.30 και 3.31 προκύπτει ότι:

$$c = M(1 \pm M). \quad (3.32)$$

Όπως φαίνεται δηλαδή από τη σχέση 3.32 το c είναι ζυγός αριθμός. Από τον τύπο του Vieta για το γινόμενο των ριζών μιας εξίσωσης [20] ο σταθερός της όρος προς τον συντελεστή του μεγιστοβάθμιου όρου ισούται με το γινόμενο των ριζών της. Οπότε στο παράδειγμα που μελετάται είναι:

$$\frac{c}{1} = E_1 E_2 E_3 \quad (3.33)$$

Η ενέργεια E_3 για να γίνει η μετάβαση πρέπει να είναι μονός αριθμός, ενώ σύμφωνα με την εξίσωση 3.33 είναι ζυγός αριθμός. Οπότε, η μετάβαση $|1\rangle \rightarrow |4\rangle$ δε μπορεί να γίνει.

Αντιθέτως, η μετάβαση $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$ για $N=4$ μπορεί να γίνει τέλεια. Η σχέση μεταξύ των συντελεστών u_1 και u_3 από το σύστημα εξισώσεων 3.8 είναι:

$$u_3 = \frac{E^2 - J_1^2}{J_1 J_2} \psi_1 \quad (3.34)$$

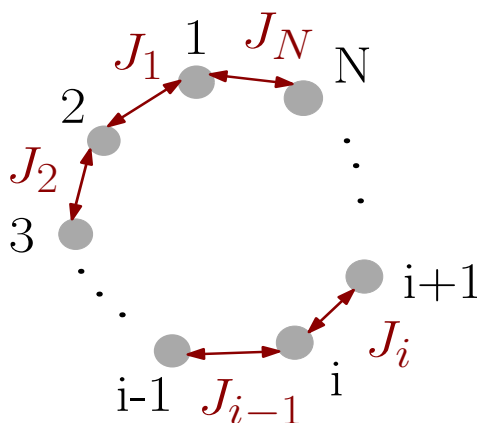
και εφαρμόζοντας τις συνθήκες της παραλληλίας η εξίσωση 3.34 τότε:

$$E^2 - J_1^2 \pm J_1 J_2 = 0, \quad (3.35)$$

οι οποίες έχουν δύο ρίζες η κάθε μία. Οπότε το σύστημα έχει συνολικά τέσσερις διαφορετικές ρίζες που ικανοποιούν τις εξισώσεις Schrodinger για $N=4$. Επομένως, η μετάβαση $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$ μπορεί να γίνει τέλεια.

3.3 Πλήρης μεταβίβαση των καταστάσεων σε κλειστές αλυσίδες spin

Στη συνέχεια, μελετήθηκαν οι κλειστές αλυσίδες spin (closed spin chains - rings) και βρέθηκαν αριθμητικές λύσεις για διάφορα spins N για όλες τις πιθανές μεταβάσεις των καταστάσεων. Στο σχήμα 3.13 απεικονίζεται η κλειστή αλυσίδα που μελετήθηκε με N spins.



Σχήμα 3.13: Γραμμική κλειστή αλυσίδα με N spins με αλληλεπιδράσεις μόνο μεταξύ των πρώτων γειτόνων και χωρίς την εφαρμογή μαγνητικού πεδίου.

Η Χαμιλτονιανή της κλειστής αλυσίδας spin $\mathbf{H}_{cl}$ γράφεται:

$$\mathbf{H}_{cl} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N J_i \boldsymbol{\sigma}_i^x \cdot \boldsymbol{\sigma}_{i+1}^x + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N J_i \boldsymbol{\sigma}_i^y \cdot \boldsymbol{\sigma}_{i+1}^y \quad (3.36)$$

Στις κλειστές αλυσίδες ισχύει ότι $N+1 \equiv 1$ λόγω της περιοδικότητας, όπου N είναι ο συνολικός αριθμός spins για την κάθε αλυσίδα. Και σε αυτή την περίπτωση έχει θεωρηθεί ότι $|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ και $|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Η Χαμιλτονιανή $\mathbf{H}_{cl}$ στη βάση $\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |N\rangle\}$ γράφεται σε μορφή πίνακα:

$$\mathbf{H}_{cl} = \begin{pmatrix} \langle 1|\mathbf{H}_{cl}|1\rangle & \langle 1|\mathbf{H}_{cl}|2\rangle & \langle 1|\mathbf{H}_{cl}|3\rangle & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \langle 1|\mathbf{H}_{cl}|N\rangle \\ \langle 2|\mathbf{H}_{cl}|1\rangle & \langle 2|\mathbf{H}_{cl}|2\rangle & & & & & & & \\ \langle 3|\mathbf{H}_{cl}|1\rangle & & & & & & & & \\ \cdot & & \cdot & & & & & & \\ \cdot & & & \cdot & & & & & \\ \cdot & & & & \cdot & & & & \\ \langle N|\mathbf{H}_{cl}|1\rangle & & & & & \langle N|\mathbf{H}_{cl}|N-1\rangle & \langle N-1|\mathbf{H}_{cl}|N\rangle & \langle N|\mathbf{H}_{cl}|N\rangle \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\mathbf{H}_{cl} = \begin{pmatrix} 0 & J_1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & J_N \\ J_1 & 0 & J_2 & 0 & 0 & & & & \\ 0 & J_2 & 0 & J_3 & & & & & \\ 0 & 0 & J_3 & 0 & & & & & \\ \cdot & & & \cdot & & & & & \\ \cdot & & & & \cdot & & & & \\ \cdot & & & & & \cdot & & & \\ 0 & & & & & & 0 & J_{N-1} & \\ J_N & & & & & & J_{N-1} & 0 & \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

Για την i -οστή λύση της ενέργειας E_i οι εξισώσεις είναι:

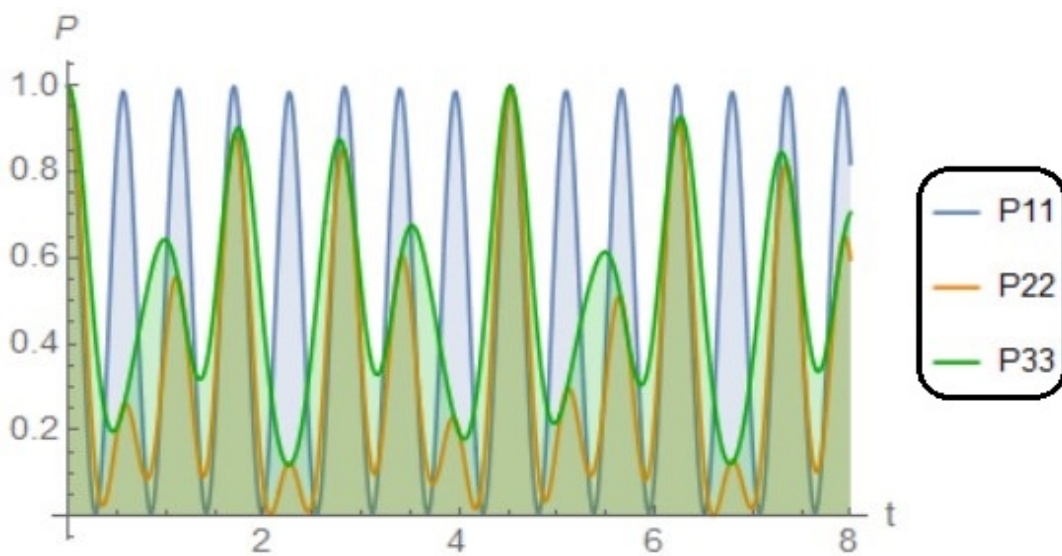
$$\begin{cases} J_N u_{Ni} + J_1 u_{2i} = E_i u_{1i} \\ J_1 u_{1i} + J_2 u_{3i} = E_i u_{2i} \\ J_2 u_{2i} + J_3 u_{4i} = E_i u_{3i} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ J_N u_{1i} + J_{N-1} u_{N-1,i} = E_i u_{Ni} \end{cases} \quad (3.38)$$

Θεωρώντας ότι όλες τις συνιστώσες του ιδιοανύσματος i είναι θετικές και συμβολίζοντας με s_j το αντίστοιχο πρόσημο της συνιστώσας u_{ji} του ιδιοανύσματος $|u_i\rangle$ το σύστημα των εξισώσεων

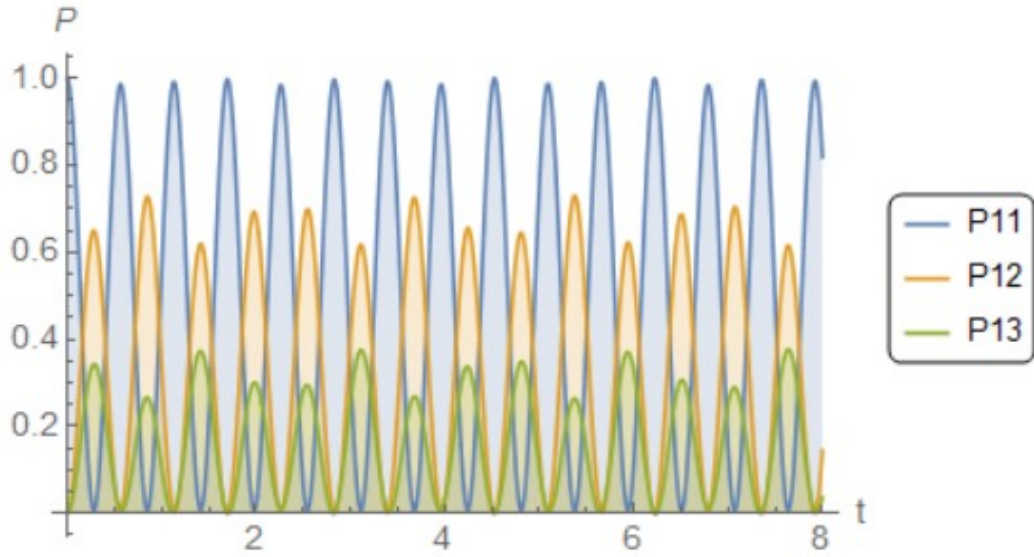
3.38 γίνεται:

$$\left\{ \begin{array}{l} J_N u_{N,i} s_N + J_1 u_{2,i} s_2 = E_i u_{1,i} s_1 \\ J_1 u_{1,i} s_1 + J_2 u_{3,i} s_3 = E_i u_{2,i} s_2 \\ J_2 u_{2,i} s_2 + J_3 u_{4,i} s_4 = E_i u_{3,i} s_3 \\ \quad \quad \quad \cdot \\ \quad \quad \quad \cdot \\ \quad \quad \quad \cdot \\ J_N u_{1,i} s_1 + J_{N-1} u_{N-1,i} s_{N-1} = E_i u_{N,i} s_N \end{array} \right. \quad (3.39)$$

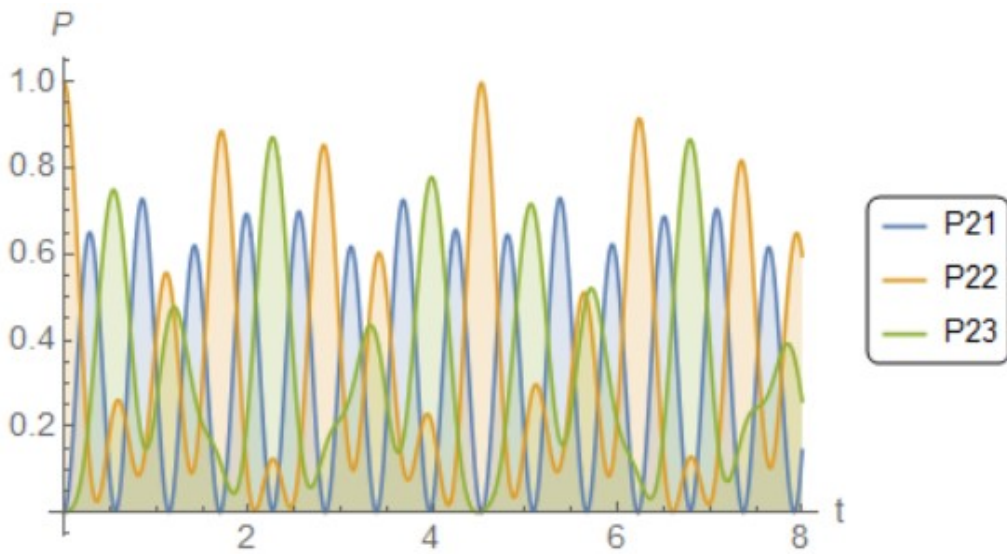
Στα σχήματα 3.14, 3.15, 3.16 και 3.17 απεικονίζεται η πιστότητα συναρτήσει του χρόνου t για όλες τις πιθανές μεταβάσεις για αριθμό spins $N=3$ με $J_1 = 4.5$, $J_2 = 1.0$ και $J_3 = 3.2$ που επιλέχθηκαν τυχαία. Παρατηρείται ότι οι αναβιώσεις (revivals) υλοποιούνται σε όλες τις περιπτώσεις, ενώ οι υπόλοιπες μεταβάσεις όχι.



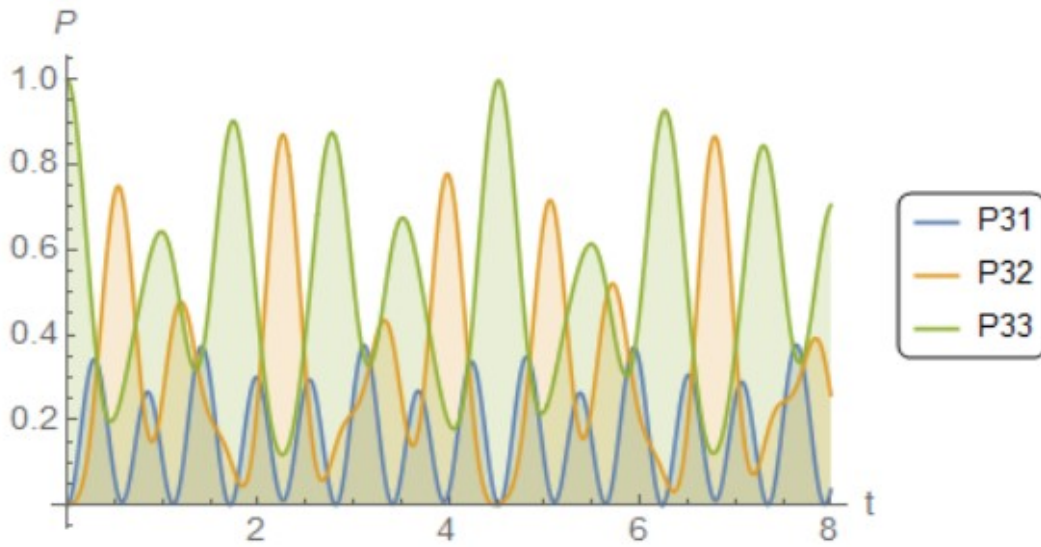
Σχήμα 3.14: Πιστότητα F (ή αλλιώς πιθανότητα P) συναρτήσει του χρόνου t για spins $N=3$ για τις μεταβάσεις $|1\rangle \rightarrow |1\rangle$, $|2\rangle \rightarrow |2\rangle$ και $|3\rangle \rightarrow |3\rangle$ όταν $J_1 = 4.5$, $J_2 = 1.0$ και $J_3 = 3.2$.



Σχήμα 3.15: Πιστότητα F (ή αλλιώς πιθανότητα P) συναρτήσει του χρόνου t για spins $N=3$ για τις μεταβάσεις $|1\rangle \rightarrow |1\rangle$, $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ και $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$ όταν $J_1 = 4.5$, $J_2 = 1.0$ και $J_3 = 3.2$.

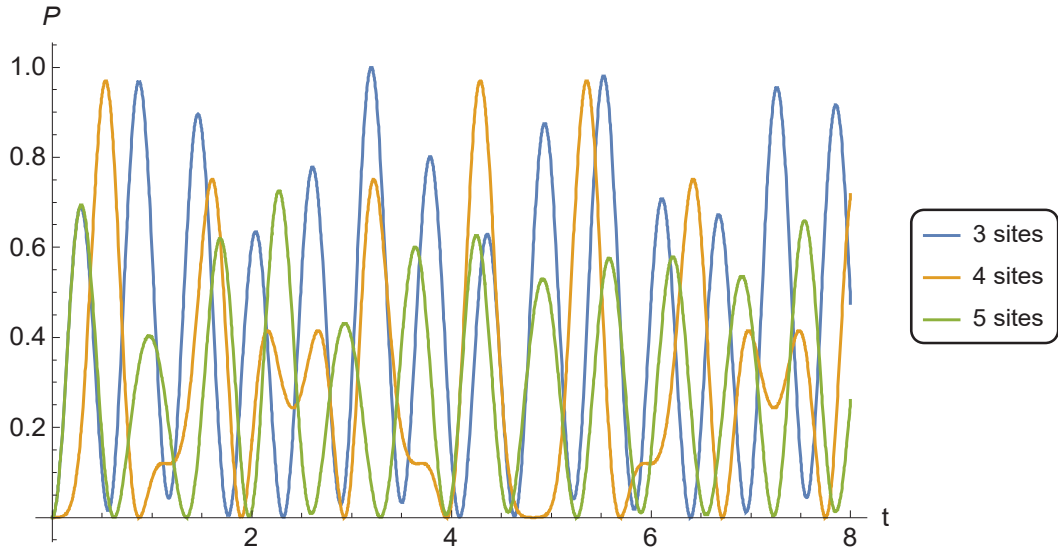


Σχήμα 3.16: Πιστότητα F (ή αλλιώς πιθανότητα P) συναρτήσει του χρόνου t για spins $N=3$ για τις μεταβάσεις $|2\rangle \rightarrow |1\rangle$, $|2\rangle \rightarrow |2\rangle$ και $|2\rangle \rightarrow |3\rangle$ όταν $J_1 = 4.5$, $J_2 = 1.0$ και $J_3 = 3.2$.



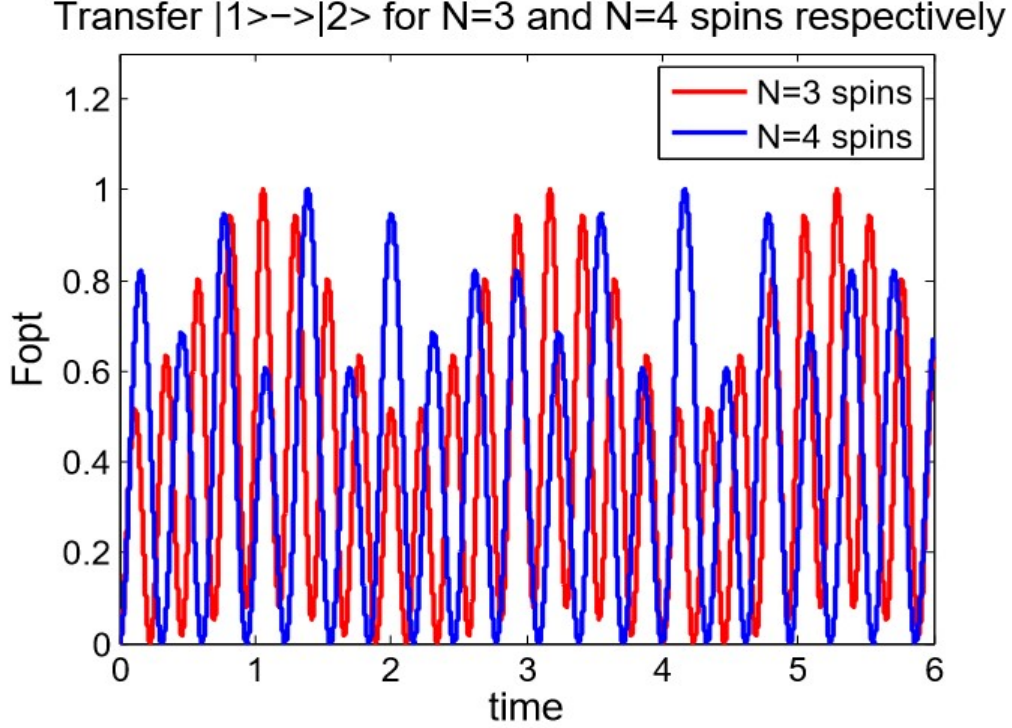
Σχήμα 3.17: Πιστότητα F (ή αλλιώς πιθανότητα P) συναρτήσει του χρόνου t για spins $N=3$ για τις μεταβάσεις $|3\rangle \rightarrow |1\rangle$, $|3\rangle \rightarrow |2\rangle$ και $|3\rangle \rightarrow |3\rangle$ όταν $J_1 = 4.5$, $J_2 = 1.0$ και $J_3 = 3.2$.

Στο σχήμα 3.18 απεικονίζεται η πιστότητα F συναρτήσει του χρόνου t για τη μετάβαση $|2\rangle \rightarrow |3\rangle$ για $N = 3, 4$ και 5 spins αντίστοιχα. Για $N=3$ spins είναι $J_1 = J_3 = 2.2679$ και $J_2 = 4.5799$, για $N=4$ spins είναι $J_1 = J_3 = 2.2679$, $J_2 = 4.5799$ και $J_4 = 7.1493$ και στα $N=5$ spins είναι $J_1 = J_3 = 2.2679$, $J_2 = 4.5799$, $J_4 = 7.1493$ και $J_5 = 1.0$. Παρατηρείται ότι για παρόμοιες τιμές στα J_i δεν είναι όλες οι μεταβάσεις τέλειες.



Σχήμα 3.18: Πιστότητα F (ή αλλιώς πιθανότητα P) συναρτήσει του χρόνου t για $N=3, 4$ και 5 spins για τη μετάβαση $|2\rangle \rightarrow |3\rangle$. Είναι $J_1 = J_3 = 2.2679$ και $J_2 = 4.5799$ για $N=3$, $J_1 = J_3 = 2.2679$, $J_2 = 4.5799$ και $J_4 = 7.1493$ για $N=4$ και $J_1 = J_3 = 2.2679$, $J_2 = 4.5799$, $J_4 = 7.1493$ και $J_5 = 1.0$ για $N=5$ spins.

Ακόμα, στο σχήμα 3.19 απεικονίζεται η μέγιστη πιστότητα F_{max} συναρτήσει του χρόνου t για τη μετάβαση $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ για $N=3$ και $N=4$ για τιμές συζεύξεων $J_1 = 9.8991$, $J_2 = J_3 = 7.6358$ και $J_1 = 9.1488$, $J_2 = J_4 = 2.8791$, $J_3 = 2.1653$ αντίστοιχα, από τη βελτιστοποίηση με τη χρησιμοποίηση της μεθόδου Nelder - Mead. Παρατηρείται ότι και οι δύο μεταβάσεις είναι πλήρεις για τις συγκεκριμένες τιμές συζεύξεων.



Σχήμα 3.19: Πιστότητα F συναρτήσει του χρόνου t για τη μετάβαση $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ για $N=3$ και $N=4$ spins για $J_1 = 9.8991$, $J_2 = J_3 = 7.6358$ και $J_1 = 9.1488$, $J_2 = J_4 = 2.8791$ και $J_3 = 2.1653$.

Από τη μελέτη προκύπτει ότι για περιττό αριθμό spins δε γίνεται καμία μετάβαση, εκτός από την περίπτωση όπου $N=3$ και τότε όλες οι μεταβάσεις μπορούν να είναι τέλειες. Αντιθέτως, για άρτιο αριθμό spins μπορούν να γίνουν πλήρως όλες οι μεταβάσεις. Επομένως, σε αντίθεση με τις ανοικτές αλυσίδες (Ενότητα 3.2) οι κλειστές αλυσίδες συνεισφέρουν καλύτερα στην πλήρη μεταβίβαση, διότι στις κλειστές αλυσίδες με άρτιο αριθμό spins ή $N=3$ μπορούν να γίνουν όλες οι μεταβάσεις, ενώ στις ανοικτές όχι. Ακόμα χρειάζεται να επισημανθεί ότι επειδή σε ορισμένες μεταβάσεις οι συζεύξεις έχουν την ίδια τιμή υπάρχουν τοπικές συμμετρίες, όπως και στην περίπτωση των ανοικτών αλυσίδων.

Η Χαμιλτονιανή του συστήματος στις κλειστές αλυσίδες H_{cl} έχει ορισμένες ιδιότητες. Αρχικά, το χαρακτηριστικό της πολωνύμο γράφεται πάντα:

$$E^N - E^{N-2}f_1(J_i) + E^{N-4}f_2(J_i) + \dots + f_N(J_i) = 0, \quad (3.40)$$

όπου $f(J_i)$ είναι μία τυχαία συνάρτηση του J_i . Ακόμα, οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι απολύτως συμμετρικές ως προς τη μηδενική όταν ο αριθμός των spins είναι ζυγός, ενώ μη συμμετρικές όταν ο αριθμός των spins είναι περιττός.

Για τις μεταβάσεις που είναι πλήρεις απαιτείται η πιστότητα των μεταβάσεων να ισούται με τη μονάδα. Ακόμα, το γινόμενο $E_i t^*$ είναι ακέραιο ή ρητό πολλαπλάσιο του π , με αποτέλεσμα οι λόγοι των ενεργειών να είναι ρητοί αριθμοί. Το γινόμενο $E_i t^*$ είναι ρητό πολλαπλάσιο του π μόνο για αλυσίδα με $N=3$. Επίσης, για την τέλεια μετάβαση $|m\rangle \rightarrow |n\rangle$ είναι $|u_{mi}| = |u_{ni}|$, με $1 \leq i \leq N$ για το ιδιοάνυσμα $|u_i\rangle$.

Υπάρχει άμεση συσχέτιση των κλειστών και των ανοικτών αλυσίδων με τη χρήση του μετασχηματισμού Householder [21]. Με την εφαρμογή του υπολογίζεται ένας τριδιαγώνιος πίνακας H' που είναι όμοιος με το δοσμένο πίνακα H μέσω του πολλαπλασιασμού των πινάκων

$H' = PHP$. Ο πίνακας P ονομάζεται πίνακας Householder και κατασκευάζεται μέσω του μετασχηματισμού $P = I - 2u \cdot u^T$, όπου I είναι ο ταυτοτικός πίνακας και u ένα μοναδιαίο διάνυσμα. Ο πίνακας Householder P έχει τις εξής ιδιότητες:

- Είναι ερμητιανός: $P^\dagger = P$
- Είναι μοναδιακός: $P^{-1} = P^\dagger$
- Έχει την ιδιότητα: $P^2 = I$ (προκύπτει από τις δύο προηγούμενες συνθήκες).
- Έχει ιδιοτιμές ± 1 . Αυτό συμβαίνει επειδή αν $u_\perp$ είναι το ορθογώνιο διάνυσμα στο u τότε $Pu_\perp = u_\perp$ με ιδιοτιμή $+1$ και πολλαπλότητα $n-1$, επειδή υπάρχουν $n-1$ ορθογώνια ιδιοανύσματα κάθετα στο u . Επίσης, $Pu = -u$ με ιδιοτιμή -1 και πολλαπλότητα 1 .
- $\text{Det}(P) = -1$. Αυτό συμβαίνει επειδή η ορίζουσα ενός πίνακα είναι το γινόμενο των ιδιοτιμών του και σε αυτή την περίπτωση η μία ιδιοτιμή ισούται με -1 και οι υπόλοιπες είναι ίσες με $+1$.

Έστω ο συμμετρικός πίνακας H διάστασης $N \times N$:

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & \cdot & \cdot & H_{1N} \\ H_{21} & H_{22} & & & & \\ H_{31} & & \cdot & & & \\ \cdot & & & \cdot & & \\ \cdot & & & & \cdot & \\ H_{N1} & & & & & H_{NN} \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

Για την εφαρμογή του μετασχηματισμού Householder υπολογίζονται οι παράμετροι α και r :

$$\alpha = -\text{sgn}(H_{21}) \sqrt{\sum_{j=2}^N H_{j1}^2} \quad (3.42)$$

$$r = \sqrt{\frac{1}{2}(\alpha^2 - H_{21}\alpha)}. \quad (3.43)$$

Με τη βοήθεια των σχέσεων 3.42 και 3.43 κατασκευάζονται οι συνιστώσες του διανύσματος $|u\rangle$ ως εξής:

$$\begin{cases} u_1 = 0, \\ u_2 = \frac{H_{21} - \alpha}{2r}, \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ u_j = \frac{H_{j1}}{2r}, \quad j = 3, 4, \dots, N. \end{cases} \quad (3.44)$$

Υστερα, υπολογίζονται τα εξής:

$$P^1 = I - 2u^{(1)}(u^{(1)})^T \quad (3.45)$$

και

$$H^{(2)} = P^1 H P^1. \quad (3.46)$$

Αφού βρεθούν τα P^1 και $H^{(2)}$ η διαδικασία επαναλαμβάνεται για $k=2, 3, \dots, N-1$ ως εξής:

$$\alpha = -\text{sgn}(H_{k+1,k}^k) \sqrt{\sum_{j=k+1}^N (H_{jk}^k)^2}, \quad (3.47)$$

$$r = \sqrt{\frac{1}{2}(\alpha^2 - H_{k+1,k}^k \alpha)}, \quad (3.48)$$

$$u_1^k = u_2^k = \dots = u_k^k = 0, \quad (3.49)$$

$$u_{k+1}^k = \frac{H_{k+1,k}^k - \alpha}{2r}, \quad (3.50)$$

$$u_j^k = \frac{H_{jk}^k}{2r}, \quad \gamma \iota \alpha \quad j = k+2, k+3, \dots, N, \quad (3.51)$$

$$P^k = I - 2u^{(k)}(u^{(k)})^T, \quad (3.52)$$

$$H^{(k+1)} = P^k H^{(k)} P^k \quad (3.53)$$

Με αυτό τον τρόπο σχηματίζεται ο τριδιαγώνιος και συμμετρικός πίνακας H' . Παρατίθενται στη συνέχεια τα εξής παραδείγματα μετασχηματισμού Χαμιλτονιανών για $N=3, 4$ και 5 spins για τυχαίες συζεύξεις και επιτόπιους όρους ίσους με το μηδέν.

$$\underline{N=3}: H3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 3 \\ 1 & 0 & 2 \\ 3 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\underline{\text{Μετασχηματισμός Householder: } H3'} = \begin{pmatrix} 0 & -3.1619 & 0 \\ -3.1619 & 1.2 & -1.5998 \\ 0 & -1.5998 & -1.2 \end{pmatrix},$$

$$\underline{N=4}: H4 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 4 \\ 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 3 \\ 4 & 0 & 3 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\underline{\text{Μετασχηματισμός Householder: } H4'} = \begin{pmatrix} 0 & -4.1230 & 0 & 0 \\ -4.1230 & 0 & 3.3954 & 0 \\ 0 & 3.3954 & 0 & -1.2125 \\ 0 & 0 & -1.2125 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\underline{N=5}: H5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 5 \\ 1 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 4 \\ 5 & 0 & 0 & 4 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\underline{\text{Μετασχηματισμός Householder: } H5'} = \begin{pmatrix} 0 & -5.0987 & 0 & 0 & 0 \\ -5.0987 & 0 & 3.9413 & 0 & 0 \\ 0 & 3.9413 & 0.5931 & -2.9982 & 0 \\ 0 & 0 & -2.9982 & -1.3488 & 1.7609 \\ 0 & 0 & 0 & 1.7609 & 0.7546 \end{pmatrix}$$

3.4 Εφαρμογές των αλυσίδων spin

Οι ανοικτές και οι κλειστές αλυσίδες χρησιμεύουν για τη μεταβίβαση της πληροφορίας στους κβαντικούς επεξεργαστές. Οι κλασσικοί επεξεργαστές σταδιακά αντικαθίστανται από τους κβαντικούς λόγω αρχικά της αναγκαιότητας σμίκρυνσης του μεγέθους των τρανζίστορ και συνεπώς τη μετάβαση από τα bits στα qubits. Επιπλέον, υπερέχουν στο ότι κάνουν πιο γρήγορα τους υπολογισμούς, και συγκεκριμένα για κβαντικά προβλήματα, τα οποία στους κλασσικούς είναι αδύνατο να επιλυθούν. Τέλος, καταναλώνουν λιγότερη ενέργεια.

Βασικό στοιχείο ενός υπολογιστή είναι η Κεντρική Μονάδα Επεξεργασίας (ΚΜΕ) η οποία αποτελείται από μικροεπεξεργαστές που είναι ολοκληρωμένα κυκλώματα και ονομάζονται chips [22]. Οι πιο δημοφιλείς εταιρείες κατασκευής επεξεργαστών για τους υπολογιστές είναι η Intel και η AMD. Η Intel σχεδίασε και τον Ιανουάριο του 2018 κατάφερε να κατασκευάσει έναν υπεραγωγίμο κβαντικό επεξεργαστή chip αποτελούμενο από 49 qubits [23]. Αυτός ο επεξεργαστής λειτουργεί σε εξαιρετικά χαμηλές θερμοκρασίες και έχει σχεδιαστεί ώστε να αποθηκεύει και να επεξεργάζεται την κβαντική πληροφορία σε qubits τα οποία είναι υπεραγωγίμα κυκλώματα. Όταν η Intel ξεκίνησε την κατασκευή του συστήματος διαπιστώθηκε ότι τα qubits είναι εξαιρετικά εύθραυστα σε τέτοιο βαθμό ώστε οποιοσδήποτε θόρυβος ή ακούσια παρατήρηση αυτών να προκαλούν απώλεια των δεδομένων [24]. Επομένως, υπάρχουν ακόμα αρκετά προβλήματα που πρέπει να αντιμετωπιστούν ώστε να λειτουργεί ένας κβαντικός υπολογιστής σωστά.

Η Intel έχει κάνει επίσης πρόοδο στην έρευνα για τα spin qubits. Τα υπεραγωγίμα chips είναι σχετικά μεγάλα, ενώ τα spin qubits μπορούν να μικρογραφηθούν με την κατασκευή και χρήση των chips πυριτίου. Για αυτό είναι εφικτό να κατασκευαστούν κβαντικοί επεξεργαστές που να περιέχουν μεγάλο αριθμό από spin qubits. Η επέκταση του αριθμού των qubits είναι το κλειδί για τη δημιουργία κβαντικών υπολογιστών που να μπορούν να λύνουν με ευχέρεια πραγματικά προβλήματα. Ο λόγος για τον οποίο αυξάνεται ο αριθμός των qubits στο σύστημα είναι αναγκαίος, διότι επιτρέπει επίσης την πραγματοποίηση σημαντικών πρόσθετων εργασιών και την εξέταση πιο πολύπολοκων προβλημάτων.

Κεφάλαιο 4

Επίλογος

Ανακεφαλαιωτικά, στο Κεφάλαιο 3 βρέθηκαν αριθμητικά αποτελέσματα για αν η μεταβίβαση των καταστάσεων μπορεί να είναι τέλεια ή όχι για τις ανοικτές και για τις κλειστές αλυσίδες με N spins, καθώς και κάποιες αναλυτικές εκφράσεις για κάποιες μεταβάσεις. Οι αναγκαίες συνθήκες για να είναι τέλεια η μεταβίβαση των καταστάσεων στις ανοικτές και στις κλειστές αλυσίδες για τη μετάβαση $|m\rangle \rightarrow |n\rangle$ είναι:

- Η πιστότητα μεταβίβασης μετά από χρόνο t να ισούται με τη μονάδα και επειδή το σύστημα που μελετάται είναι κλειστό η πιστότητα απλοποιείται: $|\langle n|e^{-iHt}|m\rangle|^2 = 1$.
- Όλες οι m και n συνιστώσες του κάθε ιδιοανύσματος να είναι ίσες κατά απόλυτη τιμή, δηλαδή: $|u_{mi}| = |u_{ni}|$ για το ιδιοάνυσμα $|u_i\rangle$.
- Ισχύει το γινόμενο $E_i t^* = k\pi$, όπου t^* είναι ο βέλτιστος χρόνος που γίνεται η μετάβαση και k είναι ακέραιος ή ρητός αριθμός. Κατά συνέπεια ο λόγος $\frac{E_m}{E_n}$ είναι ρητός αριθμός.

Στη συνέχεια, αποδείχθηκε ότι μόνο για τις μεταβάσεις στις ανοικτές αλυσίδες από το πρώτο στο m -οστό spin $|1\rangle \rightarrow |m\rangle$ με $2 \leq m \leq N$ πρέπει να ικανοποιείται κάποια συγκεκριμένη συνθήκη ώστε η μεταβίβαση των καταστάσεων να είναι τέλεια. Αυτή καταλήγει σε δύο σχέσεις:

$$E^{m-1} - E^{m-3} + \dots + \prod_{i=1}^{n-1} J_i = 0$$

$$E^{m-1} - E^{m-3} + \dots - \prod_{i=1}^{n-1} J_i = 0.$$

Στο τέλος, αποδείχθηκε ότι οι ανοικτές και οι κλειστές αλυσίδες συσχετίζονται μέσω του μετασχηματισμού Householder. Με τη χρησιμοποίησή του ο πίνακας της Χαμιλτονιανής H_{cl} για τις κλειστές αλυσίδες γίνεται συμμετρικός και τριδιαγώνιος με όμοια μορφή με αυτή του πίνακα H_{op} για τις ανοικτές αλυσίδες.

Η έρευνα που έγινε αφορά μόνο την πλήρη μεταβίβαση των spins από τη μία θέση στην άλλη. Μπορεί επίσης να μελετηθεί και η μερική μεταβίβαση των καταστάσεων σε αλυσίδες spin και να βγουν συμπεράσματα για το πότε αυτή είναι εφικτή. Επιπλέον, μπορούν να μελετηθούν αλυσίδες spin που να αλληλεπιδρούν με το περιβάλλον, όπως ακριβώς συμβαίνει και στα πραγματικά συστήματα. Για την επίλυση αυτού του προβλήματος χρησιμοποιούνται μεικτές καταστάσεις αντί για καθαρές. Για παράδειγμα, το περιβάλλον αλληλεπίδρασης του συστήματος μπορεί να είναι οι φερμιονικοί ταλαντωτές που είναι μία πολύ καλή προσομοίωση, εφόσον τα αποτελέσματα από τους υπολογισμούς είναι αρκετά κοντά με τα πειραματικά που πραγματοποιούνται στα πραγματικά συστήματα για άλλα παρόμοια προβλήματα που έχουν επιλυθεί.

[25]

Βιβλιογραφία

- [1] Linda Sansoni. *Integrated devices for quantum information with polarization encoded qubits*. Springer, 2014.
- [2] Moore's law. <https://www.investopedia.com/terms/m/mooreslaw.asp>.
- [3] Abigail Beall. Inside the Weird World of Quantum Computers. <http://www.wired.co.uk/article/quantum-computing-explained>.
- [4] Christian Weedbrook, Stefano Pirandola, Raúl García-Patrón, Nicolas J Cerf, Timothy C Ralph, Jeffrey H Shapiro, and Seth Lloyd. Gaussian quantum information. *Reviews of Modern Physics*, 84(2):621, 2012.
- [5] Audretsch. *Entangled systems: new directions in quantum physics*. John Wiley & Sons, 2008.
- [6] John Preskill. Lecture notes for physics 229: Quantum information and computation. *California Institute of Technology*, 16, 1998.
- [7] Stephanie Wehner and Nelly Ng. Lecture notes: Quantum cryptography.
- [8] Georgios M Nikolopoulos, Igor Jex, et al. *Quantum state transfer and network engineering*. Springer, 2014.
- [9] Lea F Santos. Introduction to the computational analysis of static properties and dynamics of one-dimensional spin-1/2 systems. *New York*, 10016.
- [10] Sougato Bose. Quantum communication through an unmodulated spin chain. *Physical review letters*, 91(20):207901, 2003.
- [11] Max A. Metlitski. The Xy Model in One Dimension. <https://www.phas.ubc.ca/~berciu/TEACHING/PHYS503/PROJECTS/XYModel2.pdf>.
- [12] Peter Karbach and Joachim Stolze. Spin chains as perfect quantum state mirrors. *Physical Review A*, 72(3):030301, 2005.
- [13] Serge Massar and Sandu Popescu. Optimal extraction of information from finite quantum ensembles. In *Asymptotic Theory Of Quantum Statistical Inference: Selected Papers*, pages 356–364. World Scientific, 2005.
- [14] Alastair Kay. Perfect, efficient, state transfer and its application as a constructive tool. *International Journal of Quantum Information*, 8(04):641–676, 2010.
- [15] F Alberto Grünbaum. Block tridiagonal matrices and a beefed-up version of the ehrenfest urn model. In *Modern Analysis and Applications*, pages 267–277. Springer, 2009.

- [16] Luc Vinet and Alexei Zhedanov. How to construct spin chains with perfect state transfer. *Physical Review A*, 85(1):012323, 2012.
- [17] TS Chihara. An introduction to orthogonal polynomials (gordon and breach science publishers, new york, ny). Technical report, ISBN 0-677-04150-0, 1978.
- [18] Matthias Christandl, Luc Vinet, and Alexei Zhedanov. Analytic next-to-nearest-neighbor $x \times x$ models with perfect state transfer and fractional revival. *Physical Review A*, 96(3):032335, 2017.
- [19] Sachin Joglekar. Nelder-Mead Optimization. <https://codesachin.wordpress.com/2016/01/16/nelder-mead-optimization/>.
- [20] Alan Enrique Ontiveros Salazar Jubayer Nirjhor, Aditya Narayan Sharma. Vieta’s formula. <https://brilliant.org/wiki/vietas-formula/>.
- [21] Faires J. Douglas Burden, Richard L. *Numerical Analysis*. Copyrighted Material, 2004.
- [22] Tim Fisher. Central Processing Unit (CPU). <https://www.lifewire.com/what-is-a-cpu-2618150>.
- [23] Sam Jarman. Intel Unveils 49-Qubit Superconducting Chip. <http://physicsworld.com/cws/article/news/2018/jan/18/intel-unveils-49-qubit-superconducting-chip>.
- [24] Joel Hruska. Intel unveils ‘breakthrough’ quantum computer. [urlhttps://www.extremetech.com/computing/261734-intel-unveils-new-quantum-computer-declares-quantum-breakthrough](https://www.extremetech.com/computing/261734-intel-unveils-new-quantum-computer-declares-quantum-breakthrough).
- [25] Matthias Christandl, Nilanjana Datta, Artur Ekert, and Andrew J Landahl. Perfect state transfer in quantum spin networks. *Physical review letters*, 92(18):187902, 2004.

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή μου κύριο Διάκονο, καθώς και τους συνεργάτες του για τη συνεργασία και τη στήριξη.

