

# Separabilität in Quantennetzwerken

Von der Fakultät Physik der Universität Stuttgart  
zur Erlangung der Würde eines Doktors der  
Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)  
genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

**Alexander Otte**

aus Stuttgart

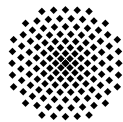
Hauptberichter:

Prof. Dr. G. Mahler

Mitberichter:

Apl. Prof. Dr. R. Friedrich

Tag der mündlichen Prüfung: 27. Juli 2001



Institut für Theoretische Physik I  
Universität Stuttgart

2001



# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>1 Gleichverteilung von Quantenzuständen</b>	<b>9</b>
1.1 Wahrscheinlichkeitsverteilung von Funktionen . . . . .	9
1.2 Gleichverteilung reiner Zustände . . . . .	11
1.2.1 Verteilung der BLOCHvektorklängen . . . . .	12
1.2.2 Verteilung der normierten Zustandsparameter . . . . .	14
1.3 Gleichverteilte Matrizen . . . . .	16
1.3.1 Unitäre Matrizen . . . . .	16
1.3.2 Hermitesche Matrizen . . . . .	18
1.4 Gleichverteilung gemischter Zustände . . . . .	18
1.4.1 Reinheits-Verteilung . . . . .	21
<b>2 Struktur des Zustandsraums</b>	<b>25</b>
2.1 Raum aller Zustände . . . . .	25
2.1.1 Zustandsbeschreibung als Information . . . . .	25
2.1.2 Dichtematrix-Beschreibung . . . . .	25
2.1.3 BLOCHvektor-Beschreibung . . . . .	27
2.1.4 Abstand zweier Dichtematrizen im BLOCHvektorbild . . . . .	28
2.1.5 Die Spur als Skalarprodukt und Abstandsmaß . . . . .	29
2.1.6 Geometrische Eigenschaften des Zustandsraums . . . . .	31
2.1.7 Typischer Abstand zweier reiner Zustände . . . . .	34
2.1.8 Wertebereich einer Dichtematrix . . . . .	34
2.1.9 Subtraktion von Dichtematrizen . . . . .	37
2.1.10 Extremalkriterium für die Subtrahierbarkeit . . . . .	42
2.2 Raum der separablen Zustände . . . . .	43
2.2.1 Definition von Verschränkung und Separabilität . . . . .	44
2.2.2 Struktur des separablen Zustandsraums . . . . .	46
2.2.3 Geometrische Deutung des separablen Zustandsraums . . . . .	48
2.2.4 Zahl der notwendigen Produktzustände der Zerlegung . . . . .	49
2.3 Raum der Diagonalzustände . . . . .	51
2.3.1 Parametrisierung . . . . .	51
2.3.2 Geometrische Darstellung . . . . .	52

<b>3</b>	<b>Separabilitätskriterien</b>	<b>55</b>
3.1	Kriterien für reine Zustände . . . . .	55
3.2	Kriterien für gemischte Zustände . . . . .	56
3.2.1	Notwendige Separabilitätskriterien . . . . .	56
3.2.2	Hinreichende Separabilitätskriterien . . . . .	61
3.2.3	Nicht operable allgemeine Separabilitätskriterien . . . . .	65
3.3	Kriterien für spezielle Zustandsklassen . . . . .	69
3.4	Separabilität in "großen" Systemen . . . . .	70
3.4.1	Verschränkung innerhalb des Gesamtsystems . . . . .	70
3.4.2	Verschränkung innerhalb eines Subsystems . . . . .	72
<b>4</b>	<b>Rekursive Entmischung</b>	<b>75</b>
4.1	Grundidee . . . . .	75
4.2	Methode der Rekursiven Entmischung . . . . .	76
4.2.1	Mathematische Beschreibung . . . . .	76
4.2.2	Geometrische Darstellung des Verfahrens . . . . .	77
4.3	Rekonstruktion des Ausgangszustands . . . . .	77
4.4	Maximale Nähe zum total gemischten Zustand . . . . .	79
4.4.1	Bedingung für die Annäherung . . . . .	79
4.4.2	Graphische Deutung . . . . .	82
4.5	Nächster reiner Produktzustand . . . . .	84
4.6	Konvergenzverhalten . . . . .	87
4.7	Fixpunkte . . . . .	88
4.8	Reduktion der Zerlegung . . . . .	94
4.9	Verfahrens-Grenzen . . . . .	96
4.10	Beispiele . . . . .	99
4.10.1	Zufälliger $5 \times 3$ Zustand . . . . .	99
4.10.2	WERNER-Zustände . . . . .	100
4.10.3	Randzustände . . . . .	104
4.10.4	Verschränkte Zustände . . . . .	106
	<b>Zusammenfassung</b>	<b>109</b>
	<b>English Overview</b>	<b>113</b>
	<b>Anhang</b>	<b>125</b>
A	Grenz-WERNER-Zustand . . . . .	125
B	Beispiel: $5 \times 3$ Zustand . . . . .	127
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>129</b>
	<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>135</b>
	<b>Index</b>	<b>136</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>139</b>

# Einleitung

Was macht die Quantenphysik so faszinierend? Seit über 100 Jahren stehen die Gesetze fest, nach denen sich die kleinsten Teilchen unserer Welt verhalten. Niemand zweifelt ernsthaft an den Aussagen der Quantentheorie, denn sie wurden in unzähligen Experimenten immer wieder aufs Neue hervorragend bestätigt. Doch auch heute noch sind die Quanten-Gesetze schwer mit dem bisherigen Bild der Welt vereinbar. In den letzten Jahren jedoch ist mit der Idee einer Informationsverarbeitung basierend auf den Grundlagen der Quantentheorie eine neue Sichtweise geschaffen worden, die zu bisher unbekanntem Einblicken in die fundamentalen Eigenschaften der Physik geführt hat.

Die Quanteninformationsverarbeitung mit der eventuellen Möglichkeit eines Quantencomputers als krönenden Höhepunkt bezieht ihre Überlegenheit gegenüber jeglicher klassischer Informationsverarbeitung aus der besonderen Struktur ihres Zustandsraums. Der Zustandsraum ist nichts anderes als die Art und Weise, wie Information über ein System dargestellt wird und er legt fest, welche prinzipiellen Möglichkeiten zur Manipulation eines Systems bestehen. Gegenüber dem klassischen Zustandsraum weist der quantenmechanische Raum zwei wesentliche Unterschiede auf: Da ist zum einen die mit der Zahl der Teilchen exponentiell ansteigende Dimension des Raums und zum anderen die Möglichkeit unitärer Operationen effektiv durchzuführen. Erst das Zusammenspiel dieser beiden außergewöhnlichen Merkmale führt zu den klassisch nicht effizient simulierbaren Vorzügen der Quanteninformationsverarbeitung.

Jeder Zustand eines physikalischen Systems kann, zumindest theoretisch, in einem im Allgemeinen sehr großen Zustandsraum dargestellt werden. Ein solcher unstrukturierter, exponentiell großer Zustandsraum ist jedoch für die Informationsverarbeitung gänzlich ungeeignet. Erst durch die Unterteilung in Subsysteme und der damit einhergehenden Aufprägung einer Struktur des Zustandsraums wird die Identifikation der Informationseinheiten – Bits im klassischen Fall, Qubits bei einer quantenmechanischen Beschreibung – ermöglicht. Es ist genau diese Einteilung in Subsysteme, welche normalerweise durch die jeweilige experimentelle Implementierung vorgegeben ist, die im Falle einer quantenmechanischen Beschreibung aufgrund der Möglichkeit der Anwendung unitärer Operationen zu den Schwierigkeiten bei der Interpretation der Quantentheorie geführt hat. Bei Systemen, die sich klassisch verhalten, kann jeder Zustand durch eine Summe der lokalen Eigenschaften der Subsysteme alleine beschrieben werden. Ein solcher Zustand "separiert" also in seine Subsysteme. Bei quantenmechanischen Systemen jedoch können Zustände auftreten, die nicht mehr durch die Summe ihrer lokalen Eigenschaften alleine darstellbar sind – es handelt sich dann um "verschränkte" Zustände. All die außergewöhnlichen Phänomene wie Quantencomputing, Quantenteleportation, SCHRÖDIN-

GER-Katzen-Gedankenexperiment sowie die Verletzungen der BELLSchen Ungleichung haben ihre Ursache in der Nicht-Separabilität vieler Quantenzustände. Es ist deshalb von außerordentlicher Bedeutung zu wissen, wann ein Zustand separabel ist und wann nicht. Diese bisher ungelöste Frage nach der Separabilität eines Zustands in einem Quantennetzwerk ist die zentrale Motivation, die dieser Abhandlung zu Grunde liegt.

Hat man ein unpräpariertes, physikalisches System vorliegen, so ist dessen Zustand unbekannt. Erst durch Messungen an dem System gewinnt man Informationen, die es einem ermöglichen, den Zustand des Systems besser festzulegen. Was aber ist ein "typischer" Messwert einer Größe an solch einem unpräparierten System? Um diese Frage zu klären, muss die Wahrscheinlichkeit für Zustände, die zu diesem Messergebnis führen, bekannt sein. Dies führt direkt zu der Frage einer Gleichverteilung auf dem Raum aller Zustände. Kapitel 1 beschäftigt sich mit der Einführung einer solchen Gleichverteilung für Quantenzustände. Insbesondere der schwierige Fall einer Verteilung für sogenannte "gemischte" Zustände führt zu physikalisch höchst interessanten Schlußfolgerungen betreffend der Entstehung von Gemischtheit, Separabilität und Verschränkung.

Die Struktur des Zustandsraums prägt die Eigenschaften der Quantensysteme. In Kapitel 2 wird deshalb diese Struktur tiefgehend untersucht, wobei sich zeigt, dass die Möglichkeit der Addition von Zuständen und die daraus resultierende Konvexität des Zustandsraums eine entscheidende Eigenschaft des Raums darstellt. Doch nicht nur die Addition, sondern auch die bisher fast unbekannt und hier ausführlich behandelte Möglichkeit der Subtraktion von Zuständen trägt wesentlich zu einem Verständnis der Struktur bei. Führt man eine Unterteilung des Gesamtraums in Subsysteme ein, so ergibt sich aufgrund der Symmetriebrechung eine Aufteilung des Gesamtraums in separable und verschränkte Zustände. Die Lage und Struktur des separablen Unterraums ist das Kernproblem der Separabilität. Mit Hilfe einer geometrischen Darstellung der Eigenschaften des separablen Raums wird eine intuitive Deutung der Fragen zur Separabilität möglich.

Möchte man für einen gegebenen Zustand feststellen, ob er separabel und damit klassisch interpretierbar ist, oder ob er verschränkt ist und damit die besonderen Eigenschaften der Quantenphysik beinhaltet, so gibt es dafür bisher kein allgemeines Verfahren. Nur für den Fall sehr kleiner Quantenzustände (zwei 2-Niveau Systeme oder ein zwei und ein 3-Niveau System) existiert bisher ein Kriterium um Separabilität eindeutig nachzuweisen. Die bisher existierenden Teillösungen zu diesem fundamentalen Problem werden in Kapitel 3 besonders in Hinblick auf eine Deutung im zuvor gewonnenen geometrischen Bild des Zustandsraums untersucht. Es zeigt sich, dass im Allgemeinen bisher nur für diejenigen Zustände eine Aussage getroffen werden kann, die entweder nahe an einem maximal verschränkten oder nahe dem völlig gemischten Zustand liegen. Im Bereich dazwischen "greifen" die bekannten Separabilitätskriterien nicht.

In Kapitel 4 wird mit der "Rekursiven Entmischung" eine völlig neuartige Methode zur Untersuchung eines Zustands auf Separabilität vorgestellt. Sie beruht auf den in den Kapiteln zuvor gewonnene Erkenntnissen über den Zustandsraum und der besonderen Lage des separablen Unterraums im Gesamtraum. Die Grundidee hinter dieser Methode ist die

Tatsache, dass Separabilität umso leichter zu erkennen ist, je näher ein Zustand am maximal gemischten Zustand liegt. Durch sukzessive Anwendung der Subtraktion wird bei der Rekursiven Entmischung der zu untersuchende Zustand immer näher an diesen Bereich herangebracht. Bei einem Nachweis von Separabilität erhält man dann nicht nur die Aussage, dass es sich um einen separablen Zustand handelt, sondern gleichzeitig liefert die Rekursive Entmischung eine explizite Zerlegung des Zustands in eine klassisch interpretierbare Summe von Zuständen. Es handelt sich bei dieser Methode um ein iteratives Verfahren, das im Rahmen der Quantenmechanik nicht auf Systeme kleiner Dimension beschränkt ist. Auch die Anzahl der Subsysteme und damit die Aufteilung des Quantennetzwerks ist prinzipiell beliebig. Anhand von Beispielen wird die praktische Anwendung und die hohe Effizienz der Rekursiven Entmischung zur Untersuchung eines Zustands auf Separabilität demonstriert.



# 1 Gleichverteilung von Quantenzuständen

Was ist ein "typischer" Zustand eines Quantensystems? Diese und weitere Fragen werden in diesem Kapitel mit der Einführung einer Gleichverteilung im HILBERTraum aufgegriffen und geklärt. Die Motivation zur Bestimmung einer solchen Gleichverteilung ist einerseits die Notwendigkeit "durchschnittliche", zufällig erzeugte Quantenzustände zu Testzwecken, wie z.B. zur Untersuchung auf Separabilität (Kapitel 3, 4), zur Verfügung zu haben, andererseits ermöglicht eine solche Verteilung, Aussagen über Mittelwerte von Zustandsgrößen wie Reinheit und Entropie zu geben (Kapitel 3.4).

## 1.1 Wahrscheinlichkeitsverteilung von Funktionen

Zur Berechnung von Verteilungen bei Zufallszahlen benötigt man einige Grundlagen der Wahrscheinlichkeitsrechnung, die für die folgenden Kapitel notwendig sind. Oftmals ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung einer einzelnen Zufallsvariablen bekannt, und es stellt sich dann die Frage nach der Wahrscheinlichkeitsverteilung einer Funktion, die von dieser Variablen abhängt. Im folgenden wird der zwei-dimensionale Fall betrachtet - die Verallgemeinerung auf mehrdimensionale Probleme ist jederzeit möglich.

Hängt eine Größe von zwei Variablen  $x$  und  $y$  ab, so muss man die Verteilung der Variablen  $x$  und  $y$  im Allgemeinen durch eine gemeinsame Wahrscheinlichkeitsfunktion  $P_{x,y} = P_{x,y}(x, y)$  beschreiben. Die unteren Indizes bedeuten dabei die Variablen, für welche die Verteilung steht, wohingegen die Variablen in runden Klammern die Variablen beinhaltet, in denen die Verteilung ausgedrückt ist. Nur für den Fall statistisch unabhängiger Variablen faktorisiert die Gesamt-Wahrscheinlichkeitsfunktion in die Wahrscheinlichkeitsfunktionen der einzelnen Variablen  $P_{x,y} = P_x P_y$ . Führt man neue Variablen (Funktionen)  $u = u(x, y)$  und  $v = v(x, y)$  ein, so berechnet sich die neue Gesamt-Wahrscheinlichkeitsfunktion zu [1]

$$P_{u,v}(u, v) = P_{x,y} \left| \frac{\partial(x, y)}{\partial(u, v)} \right|, \quad (1.1)$$

mit  $\left| \frac{\partial(x, y)}{\partial(u, v)} \right|$  als dem Betrag der JAKOBI-Determinante. Zu beachten ist, dass  $P_{u,v}$  in den Variablen  $u$  und  $v$  ausgedrückt wird. Betrachtet man den Spezialfall nur einer Funktion  $u$  und wählt deshalb  $v = y$ , so vereinfacht sich die JAKOBI-Determinante und man erhält

$$P_{u,v} = P_{x,y} \left| \frac{\partial x}{\partial u} \right|. \quad (1.2)$$

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Variablen  $u$  alleine ergibt sich damit durch Integration über alle möglichen  $v$

$$P_u(u) = \int dv P_{u,v} = \int dy P_{x,y} \left| \frac{\partial x}{\partial u} \right|. \quad (1.3)$$

Für die folgenden Beispiele einfacher algebraischer Operationen werden statistisch unabhängige Variablen  $x$  und  $y$  angenommen:

$$u = x + y \Rightarrow P_u = \int dy P_x(u - y) P_y(y) \quad (1.4)$$

$$u = xy \Rightarrow P_u = \int dy \frac{1}{|y|} P_x\left(\frac{u}{y}\right) P_y(y) \quad (1.5)$$

$$u = \frac{x}{y} \Rightarrow P_u = \int dy |y| P_x(uy) P_y(y) \quad (1.6)$$

Für den einfachen Fall einer ein-dimensionalen Funktion  $u = u(x)$  benötigt man keine Integration. Nützliche Beispiele hierzu sind:

$$u = x^2 \Rightarrow P_{u \geq 0} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{u}} P_x(\sqrt{u}) & ; \text{ falls } P_x(x) = P_x(-x) \\ \frac{1}{2\sqrt{u}} P_x(\sqrt{u}) & ; \text{ falls } P_x(x < 0) = 0 \end{cases} \quad (1.7)$$

$$u = \sqrt{|x|} \Rightarrow P_{u \geq 0} = \begin{cases} 4u P_x(u^2) & ; \text{ falls } P_x(x) = P_x(-x) \\ 2u P_x(u^2) & ; \text{ falls } P_x(x < 0) = 0 \end{cases} \quad (1.8)$$

Wie man sieht, muss, falls die Verteilung auf einen Halbraum beschränkt ist, die Normierung um einen Faktor 2 ergänzt werden.

Eine oft benötigte Operation ist die Summation von  $N$  gaußverteilten Variablen  $x_i$ ,  $P_{x_i} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x_i^2}{2\sigma^2}}$ . Mittels Integration erhält man für die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Summe

$$P_{\sum x_i} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma'} e^{-\frac{x_i^2}{2\sigma'^2}} \quad (1.9)$$

und damit wiederum eine Gaußverteilung mit neuer Standardabweichung  $\sigma' = \sqrt{N}\sigma$ . Für die allgemeine Betrachtung der Wahrscheinlichkeitsverteilung einer Summe von unabhängigen Zufallsvariablen dient der zentrale Grenzwertsatz (hier in einer einfachen Formulierung):

$$\begin{aligned} & P_{x_i} \text{ mit } \mu_{x_i} = \mu \text{ und } \sigma_{x_i} = \sigma \\ \Rightarrow & \lim_{N \rightarrow \infty} P_{\sum_{i=1}^N x_i} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\tilde{\sigma}} e^{-\frac{(x_i - \tilde{\mu})^2}{2\tilde{\sigma}^2}} \text{ mit } \tilde{\sigma} = \sqrt{N}\sigma \text{ und } \tilde{\mu} = N\mu \end{aligned} \quad (1.10)$$

Die Summe von statistisch unabhängigen Zufallsvariablen unterliegt also im Grenzwert für viele Summanden einer Normalverteilung. Physikalisch betrachtet ist der zentrale Grenzwertsatz der Grund, warum bei experimentellen Versuchen üblicherweise normalverteilte Messergebnisse auftreten.

## 1.2 Gleichverteilung reiner Zustände

In diesem Abschnitt wird gezeigt, wie man zufällige, gleichverteilte Zustände im HILBERTraum erzeugen kann. Die Anforderung an eine Gleichverteilung im HILBERTraum ist die Invarianz der Verteilung unter unitären Transformationen, d.h. die Verteilung ist unabhängig von Drehungen im Raum [2]:

$$P_{\hat{U}|\psi\rangle} = P_{|\psi\rangle} \quad (1.11)$$

Anschaulich kann man die Gleichverteilung im BLOCHvektorbild als diejenige Verteilung identifizieren, die Zustände unabhängig von ihrer BLOCHvektorrichtung mit gleicher Wahrscheinlichkeit ergibt. Es handelt sich hier also um eine radialsymmetrische Verteilung.

Im folgenden wird zur Vereinfachung bei der Herleitung nur der Fall eines zwei-dimensionalen HILBERTraums betrachtet. Eine beliebige infinitesimale Rotation erhält man dann mittels

$$\hat{U} = e^{i\varepsilon\hat{\sigma}} \approx \hat{1} + i\varepsilon\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} 1 + i\varepsilon_3 & i\varepsilon_1 - \varepsilon_2 \\ i\varepsilon_1 + \varepsilon_2 & 1 - i\varepsilon_3 \end{pmatrix}. \quad (1.12)$$

Ein (unnormierter) Zustand im HILBERTraum läßt sich mittels

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^2 (a_j + ib_j) |j\rangle \quad (1.13)$$

parametrisieren und da die Parameter voneinander unabhängig sind, faktorisiert die Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P_{|\psi\rangle} = P_{a_1} P_{a_2} P_{b_1} P_{b_2}. \quad (1.14)$$

Der transformierte Zustand  $|\psi'\rangle = \hat{U} |\psi\rangle = \sum_{j=1}^2 (a'_j + ib'_j) |j\rangle$  führt zu den neuen Parametern der Verteilung

$$\begin{aligned} a'_1 &= a_1 - b_2\varepsilon_1 - a_2\varepsilon_2 - b_1\varepsilon_3; & b'_1 &= b_1 + a_2\varepsilon_1 - b_2\varepsilon_2 + a_1\varepsilon_3 \\ a'_2 &= a_2 - b_1\varepsilon_1 + a_1\varepsilon_2 + b_2\varepsilon_3; & b'_2 &= b_2 + a_1\varepsilon_1 + b_1\varepsilon_2 + a_2\varepsilon_3 \end{aligned} \quad (1.15)$$

Die geforderte Bedingung (1.11) für eine Gleichverteilung läßt sich nun als

$$P_{a'_1} P_{a'_2} P_{b'_1} P_{b'_2} = P_{a_1} P_{a_2} P_{b_1} P_{b_2} \quad (1.16)$$

schreiben. Da es genügt, infinitesimale Änderungen anzuschauen, wird die neue Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P_{a'_1}$  um den Wert  $a_1$  herum in erster Ordnung entwickelt

$$P_{a'_1} = P_{a_1} + (a'_1 - a_1) \frac{\partial P_{a_1}}{\partial a_1}. \quad (1.17)$$

Die anderen Verteilungen werden ebenfalls um ihren Ausgangswert herum entwickelt. Setzt man diese Entwicklungen in Gleichung (1.16) ein und behält nur Ausdrücke erster Ordnung in  $\varepsilon$ , so erhält man aufgrund der Tatsache, dass die Gleichung für alle möglichen  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  und  $\varepsilon_3$  erfüllt sein muss drei Differentialgleichungen, deren einzige Lösung Gaußfunktionen der Form

$$P_{x_j} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x_j^2}{2\sigma^2}} \quad (1.18)$$

( $x_j \in \{a_1, a_2, b_1, b_2\}$ ) sind. Für  $n$ -dimensionale HILBERTräume erhält man ein entsprechendes Ergebnis, so dass man allgemein die Wahrscheinlichkeitsverteilung für unnormierte, gleichverteilte Zustände zu

$$P_{|\psi(\{x_j\})\rangle} = \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \right)^{2n} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{j=1}^{2n} x_j^2} \quad (1.19)$$

angeben kann [3]. Die Gesamtwahrscheinlichkeitsfunktion ist natürlich auf  $\int P_{|\psi\rangle} d|\psi\rangle = 1$  normiert. An dieser Lösung sieht man schön die Unabhängigkeit gegenüber Drehungen, denn  $\sum_{j=1}^{2n} x_j^2$  ist nichts anderes als die BLOCHvektorlänge, die ja unter unitären Transformationen invariant ist. Die mittels (1.19) gewonnenen Vektoren sind gleichverteilt in jede Richtung der BLOCHKugel, aber noch nicht normiert. Die Normierung kann jedoch im nachhinein erfolgen, da sie nichts an der Winkelverteilung ändert sondern nur eine Projektion auf die Oberfläche der BLOCHKugel bewirkt. In Abbildung 1.1 ist für den einfachsten Fall eines Qubits ( $n = 2$ ) die unnormierte und normierte Gleichverteilung im BLOCHvektorraum anhand von 1000 zufällig erzeugten Zuständen graphisch dargestellt.

## 1.2.1 Verteilung der BLOCHvektorlängen

Ausgehend von den Verteilungen  $P_{x_j}$  kann man durch sukzessives Vorgehen die Verteilung der BLOCHvektorlängen der unnormierten Zufallszustände berechnen.

Für die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P_{x_j^2}$  erhält man unter Benutzung von Gleichung (1.7)

$$P_{x_j^2} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{x_j}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x_j}{2\sigma^2}} & ; x_j \geq 0 \\ 0 & ; x_j < 0 \end{cases} \quad (1.20)$$

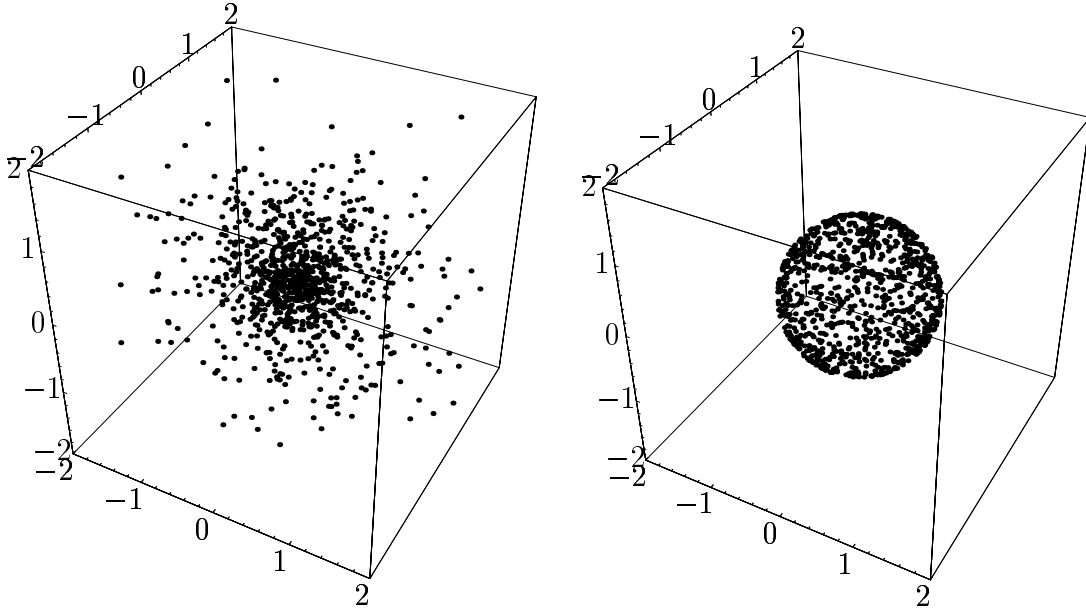


Abbildung 1.1: Unnormierte und normierte Gleichverteilung der reinen Zustände eines Qubits.

mit einem Mittelwert und einer Standardabweichung von

$$\mu_{x_j^2} = \int_0^\infty dx_j x_j P_{x_j^2} = \sigma^2, \quad (1.21)$$

$$\sigma_{x_j^2} = \sqrt{\int_0^\infty dx_j (x_j - \sigma^2)^2 P_{x_j^2}} = \sqrt{2}\sigma^2. \quad (1.22)$$

Der zentrale Grenzwertsatz (1.10) besagt nun für die Verteilung der BLOCHvektorkomponenten  $P_{\sum x_j^2}$ , dass diese für große  $n$  in eine Gaußverteilung mit Mittelwert  $\mu_{\sum x_j^2} = 2n\mu_{x_j^2} = 2n\sigma^2$  und Standardabweichung  $\sigma_{\sum x_j^2} = \sqrt{2n}\sigma_{x_j^2} = 2\sqrt{n}\sigma^2$  übergehen. Wählt man also die Standardabweichung in Gleichung (1.19) zu

$$\sigma = \frac{1}{\sqrt{2n}}, \quad (1.23)$$

so ist der BLOCHvektor für große  $n$  automatisch normiert auf den Wert für reine Zustände  $\mu_{\sum x_j^2} = 1$ .

Die Verteilung der  $x_j$  wird mit dieser Wahl der Standardabweichung zu:

$$P_{x_j}(x_j) = \sqrt{\frac{n}{\pi}} e^{-nx_j^2} \quad (1.24)$$

Um die Verteilung der BLOCHvektoren nicht nur im Grenzwert zu erhalten, muss die Summation explizit betrachtet werden. Die Addition zweier solcher Zufallsvariablen ergibt nach (1.4) und mit Festlegung von  $\sigma = \frac{1}{\sqrt{2n}}$  die Verteilung

$$P_{x_i^2+x_j^2}(x) = ne^{-nx} \quad (1.25)$$

Die  $n$ -fache Summation davon führt, wie mittels Induktion leicht zu beweisen ist, zu der Verteilungsfunktion

$$P_{\sum_{j=1}^{2n} x_j^2}(x) = \frac{1}{(n-1)!} n^n x^{n-1} e^{-nx}; \quad x \geq 0. \quad (1.26)$$

Für die BLOCHvektorlänge  $L = \sqrt{\sum_{j=1}^{2n} x_j^2}$  ergibt sich damit abschließend

$$P_L(L) = \frac{2L}{(n-1)!} n^n L^{2(n-1)} e^{-nL^2}. \quad (1.27)$$

Diese Verteilung besitzt den Mittelwert und Standardabweichung

$$\mu_L = \langle L \rangle = \frac{\Gamma(n + \frac{1}{2})}{\sqrt{n}(n-1)!}, \quad (1.28)$$

$$\sigma_L = \sqrt{1 - \frac{\Gamma(n + \frac{1}{2})^2}{n!(n-1)!}}, \quad (1.29)$$

mit den Grenzwerten  $\lim_{n \rightarrow \infty} \mu_L = 1$  und  $\lim_{n \rightarrow \infty} \sigma_L = 0$ . Für große  $n$  erhält man also, wie gewünscht, einen scharfen Peak bei  $L = 1$ .

Solche HILBERTraum-Mittelwerte lassen sich für beliebige Funktionen auf dem Raum reiner Zustände berechnen (vgl. z.B. Kapitel 3, 4).

## 1.2.2 Verteilung der normierten Zustandsparameter

Wie gezeigt wurde, läßt sich eine Gleichverteilung der Zustände im HILBERTraum durch Erzeugung von normalverteilten Parametern  $x_j$  und anschließender Normierung erreichen. Die Normierung führt allerdings dazu, dass die Parameter  $\tilde{x}_j$  (Real- und Imaginärteil) des normierten Zustands  $|\psi\rangle = \sum_j (\tilde{a}_j + i\tilde{b}_j) |j\rangle$  nicht mehr normalverteilt sind. Die Verteilung der normierten Parameter läßt sich über die Beziehung

$$\tilde{x}_j = \frac{x_j}{\sqrt{x_j^2 + \sum_{i \neq j} x_i^2}} \quad (1.30)$$

herleiten. Da  $\sum_{i \neq j} x_i^2$  als eine unabhängige Zufallsvariable aufgefaßt werden kann, erhält man nach einiger Rechnung und Zuhilfenahme der Gleichungen (1.1) und (1.26) für die Wahrscheinlichkeitsverteilung von  $\tilde{x}_j$ :

$$P_{\tilde{x}_j}(\tilde{x}_j) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{(n-1)!}{\Gamma(n - \frac{1}{2})} (1 - \tilde{x}_j^2)^{n - \frac{3}{2}} \quad (1.31)$$

In Abbildung 1.2 ist diese Verteilungsfunktion für ausgesuchte Werte von  $n$  dargestellt. Mit zunehmender Größe des HILBERTraums geht die Verteilung in eine um den Wert 0 konzentrierte Gaußfunktion über.

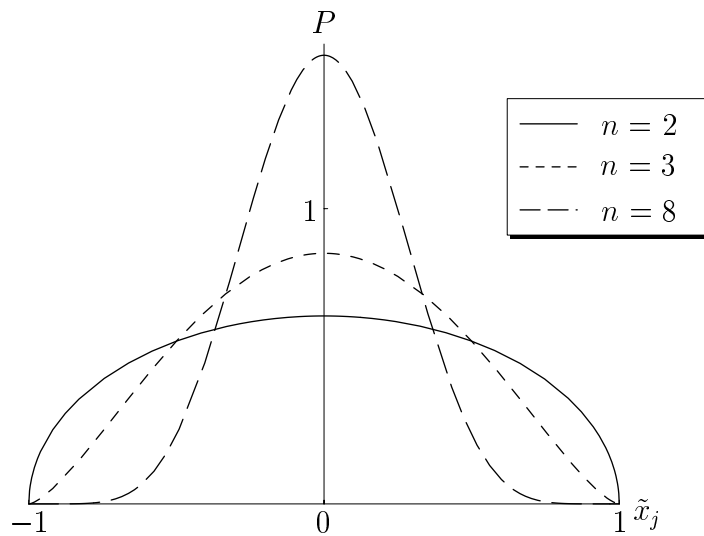


Abbildung 1.2: Wahrscheinlichkeitsverteilung der normierten Parameter  $\tilde{x}_j$  einer Zustands-Gleichverteilung im Hilbertraum der Dimension  $n$ .

Mit Hilfe dieser Verteilungsfunktion kann nun auch die Verteilung der Besetzungswahrscheinlichkeiten  $p_j = a_j^2 + b_j^2$  der reinen Zustände  $|j\rangle$  berechnet werden. Im Grenzfall von  $n \rightarrow \infty$  erhält man nach etwas Rechnung eine Exponentialverteilung mit Mittelwert  $\mu_{p_j} = \frac{1}{n}$  und Standardabweichung  $\sigma_{p_j} = \frac{1}{n}$ ,

$$P_{p_j}(p_j) = ne^{-np_j} . \quad (1.32)$$

Mit zunehmender Größe des HILBERTraums wird es also immer unwahrscheinlicher, zufällig einen Zustand, der nicht aus einer Superposition besteht, zu erhalten, da jeder Zustand  $|j\rangle$  nur mit einer sehr kleinen Wahrscheinlichkeit besetzt ist. Da die Wahrscheinlichkeiten die Forderung  $\sum p_j = 1$  erfüllen, handelt es sich bei der Exponentialverteilung um eine Gleichverteilung bezüglich des natürlichen Maßes. Hat man eine Funktion vorliegen, die nur von den Besetzungswahrscheinlichkeiten abhängt, so kann man mit Hilfe von  $P_{p_j}$  die Verteilung dieser Funktion für "typische" reine Zustände im Grenzwert eines hochdimensionalen HILBERTraums berechnen.

Für allgemeines  $n$  führt die analytische Berechnung zu unanschaulichen Ausdrücken, weshalb hier mit Abbildung 1.3 eine graphische Darstellung für kleine  $n$  gegeben wird. An dieser Grafik kann man schön den Übergang zur Exponentialverteilung für große  $n$  erkennen.

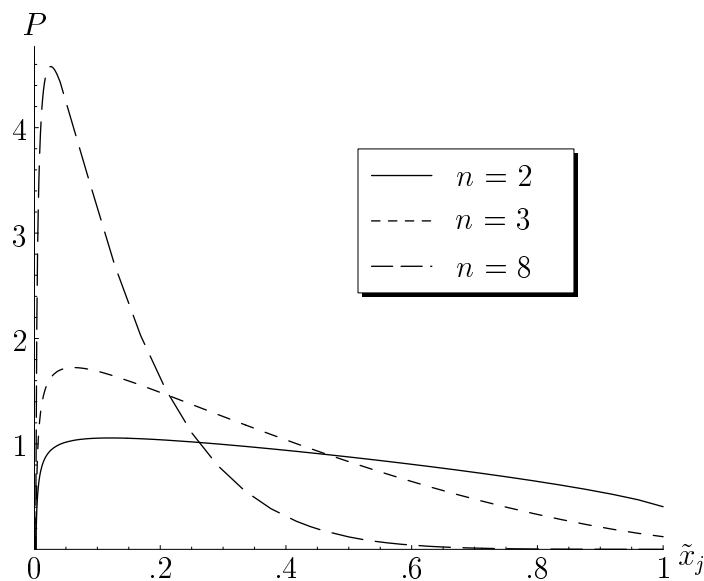


Abbildung 1.3: Wahrscheinlichkeitsverteilung der Besetzungswahrscheinlichkeit  $p_j$  für eine Zustands-Gleichverteilung im Hilbertraum der Dimension  $n$ .

## 1.3 Gleichverteilte Matrizen

### 1.3.1 Unitäre Matrizen

Neben der Erzeugung von gleichverteilten Zuständen im HILBERTraum ist es oftmals auch notwendig und wünschenswert, beliebige zufällige Bewegungen in diesem Raum beschreiben zu können. Da jeder Zeitentwicklungsoperator einer unitären Matrix entspricht, stellt sich damit die Frage nach gleichverteilten, zufälligen unitären Operatoren. Im Gegensatz zu den hermiteschen Matrizen sind die Einträge einer unitären Matrix nicht voneinander unabhängig, so dass diese Einträge nicht als statistisch unabhängige Zufallszahlen zur Parametrisierung eingesetzt werden können. Möchte man gleichverteilte unitäre Operatoren erzeugen, so muss also eine andere Parametrisierung gefunden werden, bei der die einzelnen Parameter unabhängig voneinander sind. Für den einfachsten Fall eines zwei-dimensionalen HILBERTraums ist mit den EULER-Winkeln eine solche Parametrisierung wohl bekannt. Die Verallgemeinerung auf beliebige Dimensionen führt auf die HURWITZ-Parametrisierung [4, 5, 6]. Diese Parametrisierung zerlegt eine beliebige unitäre Transformation im höherdimensionalen Raum in eine Anzahl von unitären Transformationen innerhalb zwei-dimensionaler Subräume.

In einem  $n$ -dimensionalen HILBERTraum hat die Matrix  $E^{(i,j)}(\phi, \psi, \chi)$  der elementaren

zwei-dimensionalen Rotation mit den EULER-Winkeln  $\phi, \psi$  und  $\chi$  die  $n^2$  Einträge

$$\begin{aligned}
 E_{ii}^{(i,j)} &= e^{i\psi} \cos \phi, \\
 E_{jj}^{(i,j)} &= e^{-i\psi} \cos \phi, \\
 E_{ij}^{(i,j)} &= e^{i\chi} \sin \phi, \\
 E_{ji}^{(i,j)} &= -e^{-i\chi} \sin \phi, \\
 E_{kk}^{(i,j)} &= 1, \text{ falls } k \neq i, j, \\
 E_{kl}^{(i,j)} &= 0, \text{ falls } k, l \neq i, j.
 \end{aligned} \tag{1.33}$$

Basierend auf diesen Elementarmatrizen konstruiert man die folgenden  $n - 1$  Rotationsmatrizen  $F^{(i)}$  (mit  $i = 1, \dots, n - 1$ ):

$$F^{(i)} = \left( \prod_{k=1}^{i-1} E^{(i+1-k, i+1)}(\phi_{i+1-k, i+1}, \psi_{i+1-k, i+1}, 0) \right) E^{(1, i+1)}(\phi_{1, i+1}, \psi_{1, i+1}, \chi_{i+1}) \tag{1.34}$$

Die endgültige parametrisierte unitäre Matrix erhält man nun durch Bildung des Produktes

$$U = e^{i\alpha} \prod_{j=1}^{n-1} F^{(j)}. \tag{1.35}$$

Die  $n^2$  Parameter  $\alpha, \phi_{p,q}, \psi_{r,s}$ , und  $\chi_t$  sind statistisch unabhängige Zufallsvariablen aus den Bereichen

$$\begin{aligned}
 0 &\leq \phi_{p,q} \leq \frac{\pi}{2}, \\
 0 &\leq \psi_{r,s}, \chi_t, \alpha \leq 2\pi.
 \end{aligned} \tag{1.36}$$

Für eine Gleichverteilung der unitären Matrizen müssen die Parameter  $\psi_{r,s}, \chi_t$  und  $\alpha$  nach einer konstanten Verteilung  $P = \frac{1}{2\pi}$  gewählt werden, wohingegen  $\phi_{p,q}$  als  $\phi_{p,q} = \arcsin\left(z^{\frac{1}{2p}}\right)$  zu wählen ist, mit  $z \in [0, 1)$  als einer Zufallsvariablen mit konstanter Verteilung  $P = 1[4]$ .

Die so erzeugten unitären Zufallsmatrizen können alternativ zu dem in Kapitel 1.2 beschriebenen Verfahren auch zur Erzeugung von gleichverteilten Zuständen im HILBERTraum benützt werden. Da die Anwendung einer zufälligen Rotation  $U$  auf einen festen Ausgangszustand wie z.B.  $|0\rangle$  zu einem beliebigen, zufälligen Zustand führt, kann man jede Spalte (oder Zeile) der Matrix  $U$  als einen zufällig erzeugten Zustand  $|\psi\rangle$  interpretieren. Natürlich darf immer nur eine Zeile (oder Spalte) einer Matrix  $U$  zur Erzeugung von Zufallszuständen nach dieser Methode benutzt werden, da die Zeilen (Spalten) von  $U$  orthonormal zueinander und damit nicht voneinander unabhängig sind. Zwar liefert diese Methode auch im HILBERTraum gleichverteilte Zustände, jedoch ist sie im Vergleich zu dem in Kapitel 1.2 beschriebenen Verfahren erheblich aufwendiger und damit langsamer bei einer tatsächlichen Implementierung.

### 1.3.2 Hermitesche Matrizen

Die Erzeugung von gleichverteilten hermiteschen Matrizen spielt eine wesentliche Rolle bei der Random-Matrix-Theorie und ist deshalb wohl bekannt [7]. Im folgenden wird deshalb nur das Ergebnis präsentiert. Die Einträge  $\text{Re } H_{ij}$ ,  $\text{Im } H_{ij}$  und  $H_{ii}$  einer hermiteschen Matrix  $H$  sind unabhängig voneinander (für eine Diagonalhälfte) und können somit direkt für eine Parametrisierung mit Zufallsvariablen benutzt werden. Kriterium für eine Gleichverteilung auf dem Raum der hermiteschen Matrizen ist die Invarianz unter unitären Transformationen. Die Verteilungsfunktion

$$P_H(H) = c e^{-a \text{Tr}\{H^2\}} \quad (1.37)$$

mit den Konstanten  $a$  und  $c$  erfüllt diese Voraussetzung, denn die Spur ist invariant unter Drehungen. Auf Grund dieser Verteilung können die Diagonalelemente von  $H$  mit einer Gauß-Verteilung mit Standardabweichung  $\sigma = \sqrt{2}$

$$P_{H_{ii}}(H_{ii}) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} e^{-\frac{H_{ii}^2}{4}}, \quad (1.38)$$

erzeugt werden. Für die Nebendiagonalelemente können – unter Berücksichtigung der Hermitizität – Zufallszahlen der Normalverteilung

$$P_{\text{Re } H_{ij}}(\text{Re } H_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\text{Re } H_{ij})^2}{2}}, \quad (1.39)$$

$$P_{\text{Im } H_{ij}}(\text{Im } H_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\text{Im } H_{ij})^2}{2}} \quad (1.40)$$

benutzt werden. Die mit Hilfe dieser einfachen Methode hergestellten hermiteschen Matrizen können aufgrund der Beziehung  $U = e^{-iH}$  zwar zur Erzeugung von unitären Matrizen dienen, jedoch führt dies wegen der Periodizität der komplexen Exponentialfunktion zu keiner Gleichverteilung. Der Weg über hermitesche Zufallsmatrizen ist somit keine Alternative zu dem in Kapitel 1.3.1 beschriebenen Verfahren.

## 1.4 Gleichverteilung gemischter Zustände

In Kapitel 1.2 konnte eine eindeutige Gleichverteilung für reine Zustände festgelegt werden. Das Kriterium der Invarianz unter unitären Transformationen alleine reichte für die Eindeutigkeit aus. Betrachtet man den allgemeinen Fall einer Dichtematrix  $\hat{\rho}$  (siehe Kapitel 2.1.2), die nun auch einen gemischten Zustand repräsentieren kann, so ist dies nicht mehr der Fall. Grund dafür ist die komplexere Eigenwertstruktur im Falle einer gemischten Dichtematrix. Wenn  $\hat{U}$  eine zufällige unitäre Transformation ist, dann kann eine

Gleichverteilung bezüglich aller Raumrichtungen mittels

$$\hat{\rho} = \hat{U} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 0 \end{pmatrix} \hat{U}^\dagger, \quad \text{für reine Zustände} \quad (1.41)$$

$$\hat{\rho} = \hat{U} \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix} \hat{U}^\dagger, \quad \text{für gemischte Zustände} \quad (1.42)$$

gewonnen werden. Da die Eigenwertstruktur eines reinen Zustands mit  $\lambda_i = \delta_{1i}$  festgelegt ist, ist auch die Verteilung eindeutig. Um die Verteilung gemischter Zustände festzulegen, benötigt man jedoch zusätzlich eine Verteilung der Eigenwerte  $\lambda_i$ . In [8, 9] wurde wegen  $\sum \lambda_i = 1$  das natürliche Maß als Verteilung der Eigenwerte vorgeschlagen. Dieses Maß führt zu einer Gleichverteilung über dem Raum der Eigenwerte

$$P(\lambda_1, \dots, \lambda_n) = \text{const} . \quad (1.43)$$

Dies ist mathematisch gesehen eine naheliegende Annahme, jedoch läßt sich für die Wahl dieser Verteilung keinerlei physikalische Motivation finden. Allgemein läßt sich sagen, dass bei einer gemischten Dichtematrix  $\hat{\rho}$  in einem Raum der Dimension  $n$  keine Verteilung der Eigenwerte besonders ausgezeichnet ist. Physikalisch läßt sich das verstehen, da ein gemischtes Quantensystem nicht unabhängig von seiner Umgebung ist. Als einfaches Beispiel kann hier der EPR-Zustand

$$|\text{EPR}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle) \quad (1.44)$$

angeführt werden, dessen Subsysteme im maximal gemischten Zustand sind

$$\hat{\rho}^{(1)} = \hat{\rho}^{(2)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} . \quad (1.45)$$

Mathematisch bedeutet dies, dass für jeden gemischten Zustand  $\hat{\rho}$  immer ein reiner Zustand  $|\psi\rangle$  in einem höherdimensionalen Raum existiert, welcher die Dichtematrix  $\hat{\rho}$  in einem Unterraum beinhaltet. Der Zustand  $|\psi\rangle$  läßt sich über die Spektralzerlegung von  $\hat{\rho}$  berechnen

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{r(\hat{\rho})} \sqrt{\lambda_i} |\lambda_i\rangle \otimes |i\rangle . \quad (1.46)$$

Hierbei sind  $\lambda_i$  die Eigenwerte von  $\hat{\rho}$  zu den Eigenvektoren  $|\lambda_i\rangle$ , und die Summe verläuft über alle von Null verschiedenen Eigenwerte. Die Dimension des Hilfssystems entspricht dem Rang von  $\hat{\rho}$ . Die ursprüngliche, gemischte Dichtematrix  $\hat{\rho}$  erhält man, wie gefordert, aus  $|\psi\rangle$  mittels Bildung der partiellen Spur

$$\hat{\rho} = \text{Tr}^{(2)} \{ |\psi\rangle \langle \psi| \} . \quad (1.47)$$

Der Zustand des Hilfssystems  $\hat{\rho}' = \text{Tr}^{(1)} \{ |\psi\rangle \langle \psi| \}$  besitzt genau die gleichen von Null verschiedenen Eigenwerte wie  $\hat{\rho}$ , nämlich die  $\lambda_i$ . Daran erkennt man, dass es nicht möglich ist, ein Hilfssystem zu verwenden, das eine Dimension kleiner als  $r(\hat{\rho})$  besitzt [10]. Die Wahl eines größeren Hilfssystems ist immer möglich. Die hier gezeigte Wahl von  $|\psi\rangle$  ist nicht eindeutig. Die Menge aller möglichen reinen Zustände  $|\varphi\rangle$ , die  $\hat{\rho}$  in einem Unterraum beinhalten, bekommt man durch Anwendung einer lokalen unitären Transformation  $\hat{U}$  auf das Hilfssystem von  $|\psi\rangle$

$$|\varphi\rangle = \hat{1} \otimes \hat{U} |\psi\rangle . \quad (1.48)$$

Mit dieser Erkenntnis, dass jede gemischte Dichtematrix durch Ausspüren eines angekoppelten Systems generiert werden kann, kann nun eine Gleichverteilung von gemischten Zuständen angegeben werden, die allerdings von der Größe des Gesamtsystems abhängt. Möchte man einen zufälligen, gemischten Zustand der Dimension  $n$  berechnen, so erzeugt man zuerst mit Hilfe des in Kapitel 1.2 beschriebenen Verfahrens einen zufälligen reinen Zustand  $|\psi\rangle$  der Dimension  $nm$  mit  $m \geq n$  und bildet dann die partielle Spur  $\hat{\rho} = \text{Tr}^{(2)} \{ |\psi\rangle \langle \psi| \}$  über das zusätzliche Subsystem der Dimension  $m$ . Die so erzeugte Gleichverteilung hängt nur von der Größe  $m$  des ausgespurten Systems ab. Die Verteilung der Eigenwerte eines gemischten Zustands kann deshalb als eine Signatur seiner Erzeugung aufgefasst werden. Die Messung der Eigenwertverteilung ist jedoch nicht an einem Einzelsystem möglich, sondern nur an einem hinreichend großen statistischen Ensemble. Ein einzelnes gemischtes Quantensystem verrät nichts über seine Herstellungsmethode.

Wählt man  $m < n$ , so erhält man gleichverteilte rangreduzierte Dichtematrizen, da die Eigenwerte der beiden Subsysteme identisch sind. Wie in Kapitel 2.1.6 gezeigt wird, liegen diese Zustände auf dem Rand des Zustandsraums. Die Anzahl der verschwindenden Eigenwerte beträgt  $n - m$ .

Für vollrang Matrizen, d.h. bei einer Wahl von  $m \geq n$ , kann die Verteilung der Eigenwerte der reduzierten Dichtematrix  $\hat{\rho}$  mit Hilfe der Random Matrix Theory berechnet werden [11, 12]. Die statistisch nicht unabhängigen Eigenwerte  $\lambda_i$  eines  $n$ -dimensionalen Systems, das durch Ausspüren eines anderen  $m$ -dimensionalen Systems entstanden ist – wobei das Gesamtsystem in einem zufälligen reinen Zustand ist – gehorchen der Verteilung

$$P_m(\lambda_1, \dots, \lambda_n) = C_{n,k} \delta\left(1 - \sum_{i=1}^n \lambda_i\right) \prod_{i=1}^n \theta(\lambda_i) \prod_{i=1}^n \lambda_i^{m-n} \prod_{j=1}^n \prod_{i=1}^{j-1} (\lambda_i - \lambda_j)^2 , \quad (1.49)$$

mit  $\delta(x)$  als der Deltafunktion zur Normierung auf  $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$  und  $\theta(x)$  als der HEAVISIDE-Funktion für die Positivität der Eigenwerte. Für den Spezialfall  $m = n$  stimmt

diese Eigenwertverteilung mit der Eigenwertverteilung induziert durch die HILBERT-SCHMIDT-Norm (Kapitel 2.1.5) überein [13].

In Abbildung 1.4 ist die Eigenwertverteilung eines Qubits ( $n = 2$ ) in Abhängigkeit der Größe  $m$  des ausgespurten Systems dargestellt. Wie man sieht, nimmt die Verteilung für große  $m$  zwei scharfe Peaks um den Wert  $\frac{1}{2}$  des maximal gemischten Qubits an. An der Stelle  $\lambda = \frac{1}{2}$  hat die Wahrscheinlichkeitsdichte eine Nullstelle. Das Extrema an diesem Punkt lässt sich aus der Symmetrie der Verteilung erklären. Da keiner der Eigenwerte  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$  gegenüber dem anderen ausgezeichnet ist, muss die Funktion spiegelsymmetrisch zur Achse bei  $\lambda = \frac{1}{2}$  sein.

Für den Fall  $n = 3$  ist in Abbildung 1.5 die Eigenwertverteilung graphisch dargestellt. Der maximal gemischte Zustand  $\lambda_i = \frac{1}{3}$  liegt in der Mitte des gleichseitigen Dreiecks mit den reinen Zuständen  $|i\rangle$  ( $\lambda_i = 1$ ) als Eckpunkte. Da keiner der drei Eigenwerte und auch keine Paare davon ausgezeichnet sind, erhält man drei Symmetrieachsen, die zu einer sechszähligen Symmetrie führen. Mit zunehmender Größe des ausgespurten Systems nähern sich die Maxima dem maximal gemischten Zustand in der Mitte.

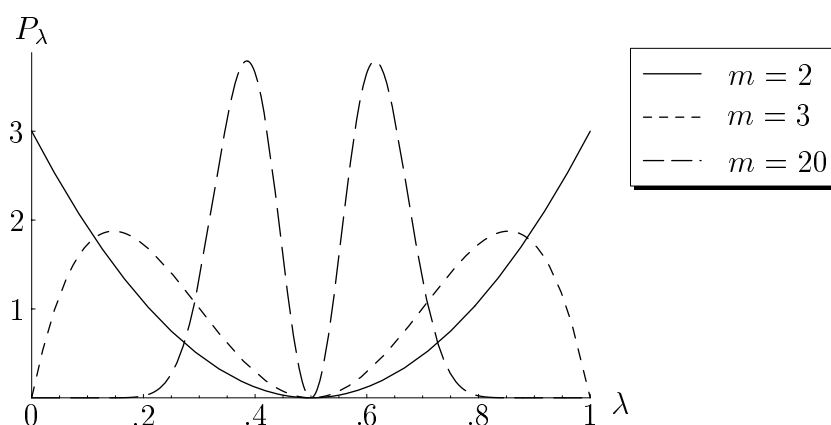


Abbildung 1.4: Verteilung der Eigenwerte  $P_\lambda$  eines zufällig erzeugten, gemischten Qubits in Abhängigkeit der Dimension  $m$  des ausgespurten Systems.

### 1.4.1 Reinheits-Verteilung

Die Reinheit eines gemischten Quantensystems kann durch die Größe  $P(\hat{\rho}) := \text{Tr}\{\hat{\rho}^2\}$ , die dem Quadrat der BLOCHvektorlänge entspricht, beschrieben werden. Für einen reinen Zustand  $|\psi\rangle$  gilt  $P(|\psi\rangle\langle\psi|) = 1$  und für den maximal gemischten Zustand  $\frac{1}{n}\hat{1}$  ergibt sich  $P(\frac{1}{n}\hat{1}) = \frac{1}{n}$ . Da die Spur invariant unter unitären Transformationen ist, gilt weiter

$$P(\hat{\rho}) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2, \quad (1.50)$$

so dass aus der Verteilung der Eigenwerte, Gleichung (1.49) mit Hilfe der in Kapitel 1.1 angegebenen Vorgehensweise die Verteilungsfunktion der Reinheit für zufällige und damit "typische" Quantenzustände analytisch hergeleitet werden kann. Da die entstehenden Ausdrücke etwas unanschaulich sind, soll hier nur für den wichtigen Fall eines 4-dimensionalen Gesamtsystems bestehend aus zwei Qubits die analytische Lösung angegeben werden:

$$P_P(P) = 3 \frac{P - P \sqrt{2P-1} + \sqrt{2}(P-1)\sqrt{P-\sqrt{2P-1}}}{\sqrt{2}\sqrt{2P-1}\sqrt{P-\sqrt{2P-1}}} \quad (1.51)$$

In Abbildung 1.6 ist die Abhängigkeit der Reinheitsverteilung für ein Qubit von der Größe  $m$  des ausgespurten Systems dargestellt [14]. Für ein Qubit ist die minimale Reinheit  $P(\hat{\rho}) = \frac{1}{2}$ . Wie man sieht, rückt das Maximum der Verteilung mit steigendem  $m$  immer näher zum minimalen Wert und gleichzeitig wird die Breite des Peaks immer schmaler. Für eine weitere Betrachtung dieses Grenzfalles und seine Auswirkungen auf die Entropie und die Verschränkung in solchen Systemen siehe Kapitel 3.4.

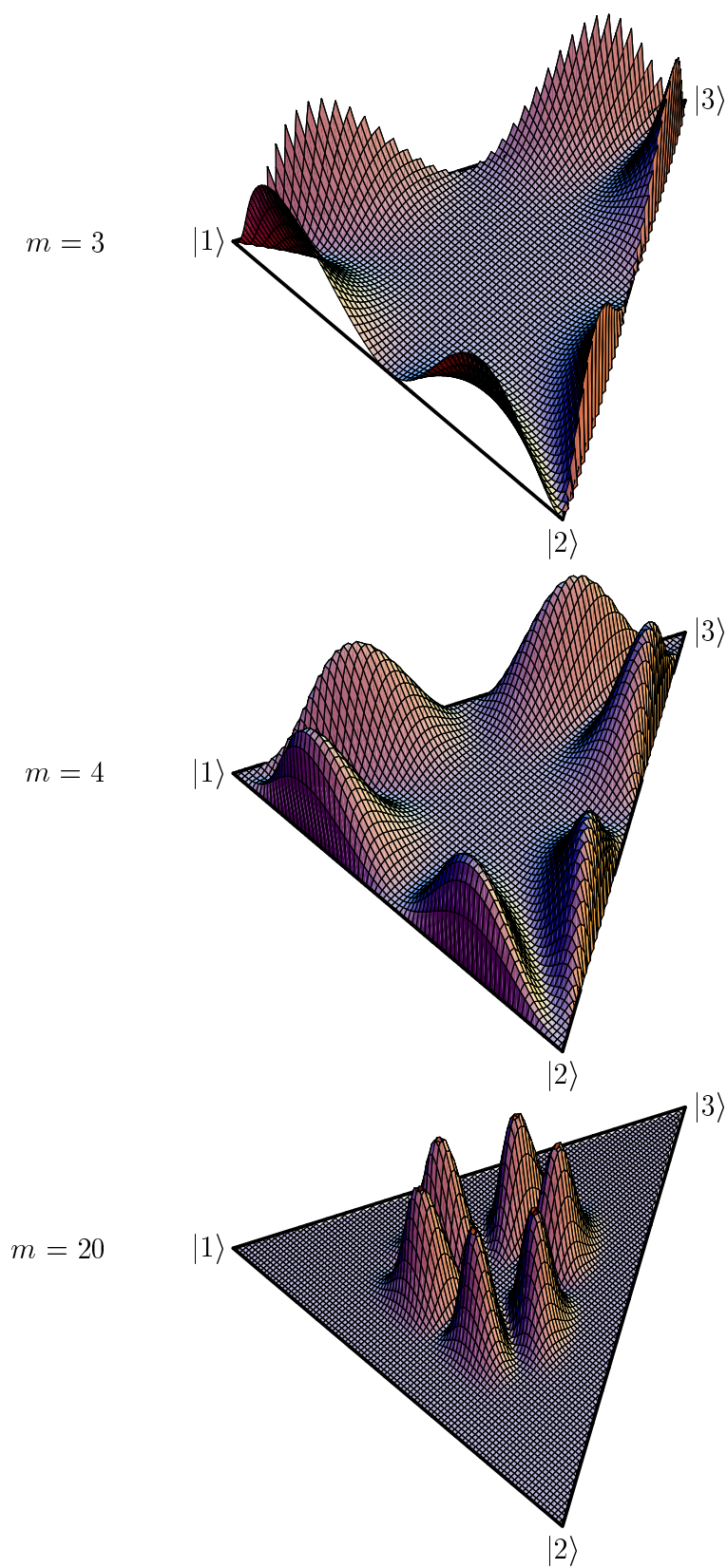


Abbildung 1.5: Verteilung der Eigenwerte  $P_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3}$  eines zufällig erzeugten, gemischten 3-Niveau Systems in Abhängigkeit der Dimension  $m$  des ausgespurten Systems. Die Eckpunkte sind die reinen Zustände  $|i\rangle$  mit  $\lambda_i = 1$  und ansonsten verschwindenden Eigenwerten.

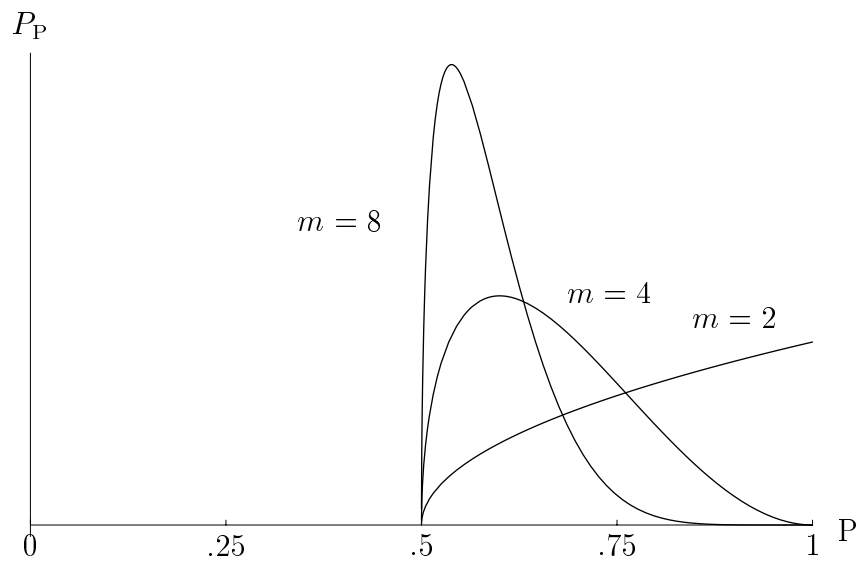


Abbildung 1.6: Verteilung der Reinheit  $P$  eines zufällig erzeugten, gemischten Qubits in Abhängigkeit der Dimension  $m$  des ausgespurten Systems.

# 2 Struktur des Zustandsraums

Die Quantentheorie kann ganz allgemein als eine Theorie aufgefasst werden, welche die zwei wichtigsten Aufgaben einer mathematischen Formulierung der Physik bewerkstelligt: Die *Beschreibung* des Zustands eines Systems und die *zeitliche Entwicklung* dieses Zustands. Die zeitliche Entwicklung, d.h. die Dynamik eines Systems, wird in der Quantenphysik durch den HAMILTON-Operator festgelegt, und die LIOUVILLE-Gleichung beschreibt dessen Auswirkungen auf den Zustand. Auf diesen dynamischen Aspekt der Quantentheorie soll hier nicht weiter eingegangen werden – der Aspekt der Beschreibung des Zustands eines (Quanten-) Systems jedoch ist das zentrale Element in diesem Kapitel.

## 2.1 Raum aller Zustände

### 2.1.1 Zustandsbeschreibung als Information

Wie beschreibt man den Zustand eines Systems am besten? Diese so einfach klingende Frage wird bei näherer Betrachtung zu einem schwierigen Problem – bei genauerem Hinsehen kann selbst die Fragestellung an sich als problematisch angesehen werden: Ob ein physikalisches System überhaupt einen genau definierten, ihm zugeordneten Zustand besitzt oder nicht, ist die Frage nach der Realität in der Quantentheorie. Die Diskussion dieser Frage, die im wesentlichen von der Philosophie hinter der Physik und damit von der subjektiven Interpretation des jeweiligen Wissenschaftlers abhängt, soll hier außer Betracht gelassen werden. Fakt ist, dass wir unser Wissen über ein physikalisches System, sei es nun vollständig, unvollständig, objektiv oder subjektiv, in einer mathematischen Formulierung niederschreiben wollen, um damit Vorhersagen für zukünftige Messungen treffen zu können. Die Art, wie wir diese Information über den Zustand aufschreiben, ist selbstverständlich nicht eindeutig festgelegt, jedoch gibt uns die übliche Formulierung der Quantentheorie mit der Beschreibung eines Zustands im HILBERTraum eine mathematisch gut handhabbare Möglichkeit der Zustandsbeschreibung.

### 2.1.2 Dichtematrix-Beschreibung

Reine Zustände  $|\psi\rangle$  eines  $n$ -dimensionalen physikalischen Systems können in einem HILBERTraum der Dimension  $n$  beschrieben werden. Für den allgemeinsten Fall einer Zustandsbeschreibung reicht das allerdings nicht aus – es wird die Formulierung mit Hilfe einer Dichtematrix  $\hat{\rho}$  benötigt. Die umfassende Formulierung der Quantenmechanik in

Dichtematrix-Notation wird in der Standardliteratur z.B. [15] behandelt. Hier soll nur das für die weiteren Kapitel Nötigste kurz angegeben werden.

Eine Dichtematrix muss die folgenden drei Voraussetzungen erfüllen:

- Wahrscheinlichkeiten sind reelle Zahlen  $\Rightarrow$  Hermitizität:  $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$
- Wahrscheinlichkeiten addiert ergeben 1  $\Rightarrow$  Normierung:  $\text{Tr} \{ \hat{\rho} \} = 1$
- Wahrscheinlichkeiten sind positiv  $\Rightarrow$  Positiv Semidefinitheit:  $\hat{\rho} \geq 0$  (alle Eigenwerte  $\geq 0$ )

Für reine Zustände  $|\psi\rangle$  ergibt sich die Dichtematrix zu  $\hat{\rho}_p = |\psi\rangle\langle\psi|$  mit dem Charakteristikum  $\text{Tr} \{ \hat{\rho}_p^2 \} = 1$  für alle reinen Zustände. Beim Eigenwertspektrum einer reinen Dichtematrix ist ein Eigenwert identisch 1 und alle anderen verschwinden. Im krassen Gegensatz dazu wird  $\hat{\rho} = \frac{1}{n}\hat{1}$  der maximal gemischte Zustand genannt, da hier alle Eigenwerte mit  $\frac{1}{n}$  gleichverteilt maximal groß sind.

Jede Dichtematrix kann mathematisch als eine Mischung von reinen Zuständen angesehen werden. Mischt man die reinen Zustände  $|\psi_i\rangle$  mit den Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  zusammen, so ergibt sich die Dichtematrix

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|. \quad (2.1)$$

Die Zerlegung einer Dichtematrix in reine Zustände ist im Allgemeinen nicht eindeutig. Weder in der Zusammensetzung und Anzahl der reinen Zustände  $|\psi_i\rangle$ , noch in der Verteilung der Wahrscheinlichkeiten  $p_i$ . Für ein System, dessen reine Zustände in einem HILBERTraum der Dimension  $n$  beschrieben werden können, hat die Dichtematrix  $\hat{\rho}$  genau  $n^2 - 1$  unabhängige, reelle Parameter. Dieser Dichtematrix-Formalismus ist eine kompakte Art und Weise den Zustand zu beschreiben und ihn mit Operatoren aus dem LIOUVILLERAUM zu bearbeiten. Der LIOUVILLERAUM wird durch die Projektoren

$$\hat{P}_{ij} = |i\rangle\langle j| \quad (2.2)$$

aufgespannt, die eine orthonormale Basis bilden, so dass die Matrixelemente von  $\hat{\rho}$  als

$$\rho_{ij} := \langle i | \hat{\rho} | j \rangle \quad (2.3)$$

definiert werden können.

### 2.1.3 BLOCHvektor-Beschreibung

Der soeben beschriebene Dichtematrix-Formalismus ist nicht die einzig mögliche Art, einen Zustand zu beschreiben. Mit dem BLOCHvektor-Formalismus steht eine andere Möglichkeit zur Verfügung, die als einen Nachteil eine weniger kompakte Darstellungsform hat, als Vorteil allerdings nur reelle Zahlen benötigt. Der BLOCHvektor  $\vec{\lambda}$  ist ein Vektor in einem  $n^2 - 1$  dimensionalen reellen Vektorraum mit den Komponenten  $\lambda_i$

$$\vec{\lambda} = \{\lambda_1, \dots, \lambda_{n^2-1}\}. \quad (2.4)$$

Mathematisch sind die beiden Arten einander äquivalent und der Zusammenhang wird durch die Generatoren  $\hat{\lambda}_i$  der  $SU(n)$  Gruppe gebildet [16]. Die Operatoren  $\hat{\lambda}_i$  sind wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} \{\hat{\lambda}_i\} &= \{\{\hat{u}_{jk}\}, \{\hat{v}_{jk}\}, \{\hat{w}_l\}\}, \\ \hat{u}_{jk} &= \hat{P}_{jk} + \hat{P}_{kj}, \\ \hat{v}_{jk} &= i(\hat{P}_{jk} - \hat{P}_{kj}), \\ \hat{w}_l &= -\sqrt{\frac{2}{l(l+1)}}(-l\hat{P}_{l+1,l+1} + \sum_{q=1}^l \hat{P}_{qq}) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Die Indizes sind dabei aus dem Bereich

$$1 \leq i \leq n^2 - 1, \quad 1 \leq j < k \leq n, \quad 1 \leq l \leq n - 1 \quad (2.6)$$

zu wählen. Die hermiteschen, spurlosen Operatoren  $\hat{\lambda}_i$  sind orthonormal bezüglich dem Skalarprodukt der Spurbildung

$$\text{Tr} \left\{ \hat{\lambda}_i \hat{\lambda}_j \right\} = 2\delta_{ij}. \quad (2.7)$$

Um von der Dichtematrix-Formulierung in die BLOCHvektor Beschreibung überzugehen, wird eine Entwicklung in der durch die  $SU(n)$  Generatoren gebildeten orthonormalen Basis vorgenommen

$$\hat{\rho} = \frac{1}{n}\hat{1} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n^2-1} \lambda_i \hat{\lambda}_i. \quad (2.8)$$

Die Entwicklungskoeffizienten  $\lambda_i$  mit  $\lambda_i = \text{Tr} \left\{ \hat{\lambda}_i \hat{\rho} \right\}$  sind die Komponenten des BLOCHvektors  $\vec{\lambda}$ . Die BLOCHvektorlänge

$$L = \sqrt{\vec{\lambda} \cdot \vec{\lambda}} = \sqrt{\sum_i \lambda_i^2} \quad (2.9)$$

nimmt für reine Zustände den Maximalwert  $L_{\max} = 1$  an und wir für den maximal gemischten Zustand minimal  $L_{\min} = \sqrt{\frac{1}{n}}$ . Neben der Entwicklung einer Dichtematrix in

die hermiteschen Operatoren  $\hat{\lambda}_i$  gibt es auch die Möglichkeit, die Dichtematrix in einen vollständigen, orthonormalen Satz von unitären Operatoren  $\hat{U}_i$  zu entwickeln. Zwar geht bei einer solchen Entwicklung die Anschaulichkeit der *reellen* Vektorkomponenten verloren; Vorteile der unitären Beschreibungsweise sind dafür die einheitliche Struktur der Operatoren  $\hat{U}_i$  und deren besondere Bedeutung im Rahmen der Quanteninformationsverarbeitung [17, 18].

### 2.1.4 Abstand zweier Dichtematrizen im BLOCHvektorbild

Die anschauliche Darstellung einer Dichtematrix mit Hilfe der  $SU(n)$  Entwicklung als einen Vektor im reellen Vektorraum führt zu einem intuitiven Maß für die Entfernung zweier Dichtematrizen  $\hat{\rho}_1$  und  $\hat{\rho}_2$ . Die Definition des Skalarprodukts (und damit eines Abstandsmaßes) kann vom  $SU(n)$  in den Dichteoperator-Raum übernommen werden:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \{ \hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2 \} &= \text{Tr} \left\{ \left( \frac{1}{n} \hat{1} + \sum_i \lambda_i^{(1)} \hat{\lambda}_i \right) \left( \frac{1}{n} \hat{1} + \sum_j \lambda_j^{(2)} \hat{\lambda}_j \right) \right\} \\ &= \text{Tr} \left\{ \frac{1}{n^2} \hat{1} + \frac{1}{2n} \sum_i \lambda_i^{(1)} \hat{\lambda}_i + \frac{1}{2n} \sum_j \lambda_j^{(2)} \hat{\lambda}_j + \frac{1}{4} \sum_{ij} \lambda_i^{(1)} \lambda_j^{(2)} \hat{\lambda}_i \hat{\lambda}_j \right\} \\ &= \frac{1}{n} + \frac{1}{2} \sum_i \lambda_i^{(1)} \lambda_i^{(2)} \\ &= \frac{1}{n} + \frac{1}{2} \vec{\lambda}_1 \vec{\lambda}_2 \end{aligned} \quad (2.10)$$

Das Skalarprodukt zweier Vektoren im BLOCHvektorraum kann damit zu

$$\vec{\lambda}_1 \vec{\lambda}_2 = 2 \left( \text{Tr} \{ \hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2 \} - \frac{1}{n} \right) \quad (2.11)$$

im Raum der Dichteoperatoren geschrieben werden. Für die BLOCHvektorlänge erhält man daraus das bekannte Ergebnis

$$|\vec{\lambda}|^2 = 2 \left( \text{Tr} \{ \hat{\rho}^2 \} - \frac{1}{n} \right). \quad (2.12)$$

Für die Abstandsdefinition zweier Dichtematrizen  $|(\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2)|$  kann nun das Skalarprodukt des reellen Vektorraums benutzt werden, was zu

$$\begin{aligned} |(\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2)|^2 &:= |\vec{\lambda}_2 - \vec{\lambda}_1|^2 = |\vec{\lambda}_1|^2 + |\vec{\lambda}_2|^2 - 2 |\vec{\lambda}_1 \vec{\lambda}_2| \\ &= 2 \left( \text{Tr} \{ \hat{\rho}_1^2 \} + \text{Tr} \{ \hat{\rho}_2^2 \} - 2 \text{Tr} \{ \hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2 \} \right) \\ &= 2 \text{Tr} \{ (\hat{\rho}_2 - \hat{\rho}_1)^2 \} \end{aligned} \quad (2.13)$$

führt. Handelt es sich bei einem der Zustände um einen reinen Zustand  $\hat{\rho}_p = |\psi\rangle \langle\psi|$ , so vereinfacht sich der Abstand zu

$$|(\hat{\rho}_p, \hat{\rho})|^2 = 2 \left( \text{Tr} \{ \hat{\rho}^2 \} - 2 \langle\psi| \hat{\rho} |\psi\rangle + 1 \right). \quad (2.14)$$

Der Abstand einer Dichtematrix  $\hat{\rho}$  zum maximal gemischten Zustand entspricht dem Betrag von  $\hat{\rho}$

$$\left| \left( \hat{\rho}, \frac{1}{n} \hat{1} \right) \right|^2 = 2 \left( \text{Tr} \{ \hat{\rho}^2 \} - \frac{1}{n} \right), \quad (2.15)$$

da im BLOCHvektorraum der Zustand  $\frac{1}{n} \hat{1}$  genau im Koordinatenursprung liegt.

### 2.1.5 Die Spur als Skalarprodukt und Abstandsmaß

Wie man an Gleichung (2.11) erkennt, besteht ein enger Zusammenhang zwischen der Spur eines Produktes zweier Dichtematrizen  $\text{Tr} \{ \hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2 \}$  und dem Skalarprodukt im reellen Vektorraum  $\vec{\lambda}_1, \vec{\lambda}_2$ . Man kann jedoch auch die Spur des Produktes zweier hermitescher Matrizen  $\text{Tr} \{ \hat{a} \cdot \hat{b} \}$  direkt als Skalarprodukt deuten, denn falls  $\hat{a} = \hat{a}^\dagger$  und  $\hat{b} = \hat{b}^\dagger$  gilt, folgen die erforderlichen Eigenschaften für die Definition eines Skalarproduktes:

$$\begin{aligned} \text{Distributivität:} \quad & \text{Tr} \{ (\hat{a}_1 + \hat{a}_2) \cdot \hat{b} \} = \text{Tr} \{ \hat{a}_1 \cdot \hat{b} \} + \text{Tr} \{ \hat{a}_2 \cdot \hat{b} \} \\ \text{Kommutativität:} \quad & \text{Tr} \{ \hat{a} \cdot \hat{b} \} = \text{Tr} \{ \hat{b} \cdot \hat{a} \} \\ \text{Homogenität:} \quad & \text{Tr} \{ \alpha \hat{a} \cdot \hat{b} \} = \alpha \text{Tr} \{ \hat{a} \cdot \hat{b} \} \\ \text{Positiv Definitheit:} \quad & \text{Tr} \{ \hat{a}^2 \} > 0, \quad (\forall \hat{a} \neq 0) \end{aligned} \quad (2.16)$$

Mit Hilfe des so definierten Skalarproduktes läßt sich nun eine Norm, die sogenannte HILBERT-SCHMIDT-Norm, auf dem Raum der hermiteschen Matrizen einführen:

$$\boxed{\|\hat{a}\| := \sqrt{\text{Tr} \{ \hat{a}^2 \}}} \quad (2.17)$$

Im Vergleich zur BLOCHvektor-Norm Gleichung (2.12) sieht man, dass hier der "überflüssige" Faktor 2 und die Konstante  $\frac{1}{n}$  wegfallen und dieses Maß deshalb eleganter in der Anwendung ist. Es gelten die bekannten Eigenschaften einer Norm:

$$\begin{aligned} \text{Positivität:} \quad & \|\hat{a}\| \geq 0 \\ \text{Skalierbarkeit:} \quad & \|\alpha \hat{a}\| = |\alpha| \|\hat{a}\| \\ \text{Dreiecksungleichung:} \quad & \|\hat{a} + \hat{b}\| \leq \|\hat{a}\| + \|\hat{b}\| \end{aligned} \quad (2.18)$$

Für den Abstand zweier Dichtematrizen  $\|\hat{\rho}_2 - \hat{\rho}_1\|$  kann deshalb

$$\begin{aligned} \|\hat{\rho}_2 - \hat{\rho}_1\|^2 &= \text{Tr} \{ (\hat{\rho}_2 - \hat{\rho}_1)^2 \} \\ &= \text{Tr} \{ \hat{\rho}_1^2 \} + \text{Tr} \{ \hat{\rho}_2^2 \} - 2 \text{Tr} \{ \hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2 \} \end{aligned} \quad (2.19)$$

verwendet werden. Mit Hilfe der Dreiecksungleichung erhält man die Relation

$$\mathrm{Tr} \{ (\hat{\rho}_2 - \hat{\rho}_1)^2 \} \geq \left| \mathrm{Tr} \{ \hat{\rho}_2^2 \} - \mathrm{Tr} \{ \hat{\rho}_1^2 \} \right|. \quad (2.20)$$

Zur Abschätzung der Spur eines Produktes von Dichtematrizen ist das folgende Lemma nützlich.

**Lemma 1.**

$$\mathrm{Tr} \{ \hat{a} \cdot \hat{b} \} \leq \sqrt{\mathrm{Tr} \{ \hat{a}^2 \}} \sqrt{\mathrm{Tr} \{ \hat{b}^2 \}}$$

*Beweis.* CAUCHY-SCHWARZsche Ungleichung □

Analog zur BLOCHvektor-Norm vereinfacht sich wegen  $\mathrm{Tr} \{ \hat{\rho}_p^2 \} = 1$  der Abstand zweier Dichtematrizen, falls es sich bei einem der Zustände um einen reinen Zustand  $\hat{\rho}_p = |\psi\rangle\langle\psi|$  handelt, zu

$$\|\hat{\rho} - \hat{\rho}_p\|^2 = \mathrm{Tr} \{ \hat{\rho}^2 \} - 2 \mathrm{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}_p \} + 1. \quad (2.21)$$

Möchte man also z.B. denjenigen reinen Zustand finden, der am nächsten zu einem vorgegebenen  $\hat{\rho}$  liegt, so genügt es, die skalare Funktion  $\mathrm{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}_p \} = \langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle$  über dem Raum aller möglichen reinen Zustände zu maximieren. Da die Funktion  $\mathrm{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}_p \}$  für die Betrachtungen in den nächsten Kapiteln von Bedeutung ist, wird folgendes Lemma für Abschätzungen nützlich sein:

**Lemma 2.**  $0 \leq \lambda_{\min} \leq \mathrm{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}_p \} \leq \lambda_{\max} \leq 1$

*Beweis.* Betrachtet man  $\mathrm{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}_p \} = \langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle$  als den Erwartungswert eines Messoperators  $\hat{\rho}$  angewandt auf einen beliebigen reinen Zustand  $\hat{\rho}_p = |\psi\rangle\langle\psi|$ , so liegen die möglichen Erwartungswerte zwischen dem minimalen Eigenwert  $\lambda_{\min}$  des Messoperators  $\hat{\rho}$  und dessen maximalen Eigenwert  $\lambda_{\max}$ . (Beweis mittels LAGRANGE-Multiplikatoren). Die Extremalwerte werden angenommen, wenn  $\hat{\rho}_p$  aus den zugehörigen Eigenvektoren von  $\hat{\rho}$  besteht. □

Sind bei der Bildung des Abstands beide Zustände rein,  $\hat{\rho}_{p_1} = |\psi\rangle\langle\psi|$  und  $\hat{\rho}_{p_2} = |\phi\rangle\langle\phi|$ , so ergibt sich noch einfacher

$$\|\hat{\rho}_{p_1} - \hat{\rho}_{p_2}\|^2 = 2 - 2 \mathrm{Tr} \{ \hat{\rho}_{p_1} \hat{\rho}_{p_2} \} = 2(1 - |\langle \psi | \phi \rangle|^2). \quad (2.22)$$

Der Abstand einer Dichtematrix  $\hat{\rho}$  zum maximal gemischten Zustand  $\frac{1}{n} \hat{1}$  ergibt sich in der HILBERT-SCHMIDT-Norm als

$$\left\| \hat{\rho} - \frac{1}{n} \hat{1} \right\|^2 = \mathrm{Tr} \{ \hat{\rho}^2 \} - \frac{1}{n}, \quad (2.23)$$

und jeder reine Zustand  $\hat{\rho}_p$  hat die konstante Entfernung

$$\left\| \hat{\rho}_p - \frac{1}{n} \hat{1} \right\| = \sqrt{1 - \frac{1}{n}} \quad (2.24)$$

zum maximal gemischten Zustand. Aufgrund der kompakten Formulierung der HILBERT-SCHMIDT-Norm wird diese in den folgenden Kapiteln als die "Standard" Norm auf dem Raum der Dichtematrizen verwendet.

### 2.1.6 Geometrische Eigenschaften des Zustandsraums

In diesem Abschnitt werden die fundamentalen geometrischen Eigenschaften des quantenmechanischen Zustandsraums näher untersucht. Diese Eigenschaften bilden den zentralen Kern für die Betrachtungen der folgenden Kapitel. Für die Geometrie des Zustandsraums ist es unerheblich, in welcher Darstellung man ist, ob BLOCHvektorbild oder Dichtematrixformalismus - die Aussagen gelten also für jede Beschreibung. Allerdings hat das BLOCHvektorbild mit seiner Beschreibung in einem reellen Vektorraum den Vorteil der leichteren Vorstellbarkeit. Insbesondere im Falle eines Qubits ( $n = 2$ ) kann hier der Zustandsraum als der gewöhnliche, drei-dimensionale kartesische Raum gedeutet werden. Im interessanteren Falle eines höherdimensionalen Raumes jedoch ist auch der BLOCHvektorraum wegen des auf drei Dimensionen beschränkten Vorstellungsvermögen nicht mehr besonders anschaulich, und die mathematische Beschreibung des Raums tritt in den Vordergrund.

Die wichtigste Eigenschaft der Zustände ist die Möglichkeit der Addition. Addiert man auf konvexe Weise zu einem Zustand  $\hat{\rho}_1$  einen anderen Zustand  $\hat{\rho}_2$ , so ergibt sich wieder ein Zustand  $\hat{\rho}$

$$\hat{\rho} = (1 - p) \hat{\rho}_1 + p \hat{\rho}_2, \quad (2.25)$$

da sich bei einer solchen Addition wegen  $0 \leq p \leq 1$  weder die Spur, noch die Hermitizität und auch nicht die Positivität einer Dichtematrix ändert. Die Addition zweier Zustände kann in gewisser Weise als das Gegenteil der quantenmechanischen Superposition gesehen werden, denn hier werden zwei Zustände inkohärent überlagert. Im Gegensatz zum Superpositionsprinzip ist die Addition von Dichtematrizen eine rein klassisch interpretierbare Mischung von Zuständen. Analog zur Formulierung im Bild der Dichtematrizen ergibt sich für die BLOCHvektoren

$$\vec{\lambda} = (1 - p) \vec{\lambda}_1 + p \vec{\lambda}_2. \quad (2.26)$$

Geometrisch interpretiert ist  $\vec{\lambda}$  wegen der Einschränkung  $0 \leq p \leq 1$  eine *konvexe* Linearkombination der Vektoren  $\vec{\lambda}_1$  und  $\vec{\lambda}_2$  und damit liegt der neue Zustand  $\hat{\rho}$  auf der Verbindungslinie von  $\hat{\rho}_1$  und  $\hat{\rho}_2$ , wie in Abbildung 2.1 graphisch dargestellt.

Jeder Zustand kann als Mischung von reinen Zuständen geschrieben werden

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^m p_i \hat{\rho}_{p_i}, \quad (2.27)$$



Abbildung 2.1: Geometrische Interpretation der Addition zweier Dichtematrizen  $\hat{\rho}_1$  und  $\hat{\rho}_2$  im BLOCHvektorbild. Das Ergebnis der Addition ist  $\hat{\rho}$ .

wobei die minimale notwendige Anzahl  $m_{\min}$  der reinen Zustände  $\hat{\rho}_{p_i}$  der Zerlegung dem Rang des Dichteoperators  $\hat{\rho}$  entspricht (siehe Theorem 30)

$$m_{\min} = r(\hat{\rho}). \quad (2.28)$$

Da für die Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  aufgrund der Normierung  $\sum_{i=1}^m p_i = 1$  gilt, handelt es sich auch hier um eine konvexe Linearkombination. Der Zustand  $\hat{\rho}$  liegt in der konvexen Hülle gebildet durch die Menge der  $\hat{\rho}_{p_i}$ . Die Additivitätseigenschaft der Zustände führt somit zu der folgenden Erkenntnis:

**Lemma 3.** *Der Raum der quantenmechanischen Zustände ist konvex.*

*Beweis.* Mit je zwei Dichteoperatoren  $\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2$  sind auch alle Matrizen der Verbindungsstrecke gültige Dichteoperatoren.  $\square$

Die reinen Zustände  $\hat{\rho}_p$  haben alle die gleiche, maximale BLOCHvektorlänge  $L_{\max} = 1$ . Da alle nicht reinen Zustände eine BLOCHvektorlänge  $L < 1$  haben und alle Punkte mit einer BLOCHvektorlänge  $L > 1$  keine gültigen Zustände sind, folgt

**Lemma 4.** *Der Raum der quantenmechanischen Zustände ist abgeschlossen. Alle reinen Zustände liegen auf dem Rand.*

**Korollar 5.** *Der Raum der quantenmechanischen Zustände ist kompakt.*

*Beweis.* Der Zustandsraum ist sowohl abgeschlossen als auch wegen  $L \leq 1$  beschränkt.  $\square$

Das Lemma 4 besagt, dass jeder Zustand mit voller BLOCHvektorlänge ein Randpunkt ist. Der Umkehrschluß gilt jedoch nicht! Eine wichtige Aussage dieses Kapitels ist deshalb:

**Theorem 6.** *Der Rand des Zustandsraum wird durch alle rangreduzierten Dichtematrizen  $r(\hat{\rho}) < n$  gebildet.*

*Beweis.* Siehe hierzu Kapitel 2.1.9.  $\square$

**Korollar 7.** *Für  $n > 2$  existieren gemischte Zustände auf dem Rand der Menge aller Zustände.*

Die reinen Zustände sind die Eckpunkte der Zustandsmenge. Der Rand aller Zustände wird durch die konvexe Hülle der Eckpunkte gebildet. Nur für den Spezialfall des Qubits  $n = 2$ , der auf die 3D-Einheitskugel abgebildet werden kann, bilden die reinen Zustände den kompletten Rand, nämlich die Kugeloberfläche. (Es existieren keine rangreduzierten, gemischten Dichtematrizen.) Die Vorstellung einer BLOCHKugel in höheren Dimensionen ist deshalb leicht irreführend, denn die Oberfläche der BLOCHKugel bildet dann nicht mehr den Rand aller Zustände.

**Korollar 8.** *Für  $n > 2$  existieren Bereiche auf der Oberfläche und innerhalb der BLOCHKugel, die keine gültigen Zustände sind.*

Bei dem Körper des Zustandsraums handelt es sich also nicht um eine Kugel.

Das Gebiet der reinen Zustände auf der Oberfläche der BLOCHKugel ist zusammenhängend, da eine kontinuierliche Parametrisierung

$$\hat{\rho}_p = \hat{U} |0\rangle \langle 0| \hat{U}^{-1} \quad (2.29)$$

mit den unitären Operatoren  $\hat{U}$  und ihren, wie in Kapitel 1.3.1 gezeigten,  $n^2 - 1$  relevanten, unabhängigen Parametern möglich ist.

Die Dimension  $d$  des Körpers aller Zustände ist  $d = n^2 - 1$  und für die Dimension  $d_{\text{Rand}}$  des Rands gilt deshalb

$$d_{\text{Rand}} = n^2 - 2. \quad (2.30)$$

Da alle reinen Zustände den konstanten Abstand  $L_{\text{min}} = \sqrt{\frac{1}{n}}$  vom maximal gemischten Zustand  $\frac{1}{n}\hat{1}$  haben, kann der maximal gemischte Zustand als das "Zentrum" des Zustandsraums angesehen werden. Der minimale Abstand eines Randpunktes zum Zentrum ist

$$\min \left\| \hat{\rho}_{\text{Rand}} - \frac{1}{n}\hat{1} \right\| = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}}, \quad (2.31)$$

da  $\text{Tr}\{\hat{\rho}_{\text{Rand}}^2\}$  für rangreduzierte Matrizen genau dann minimal ist, wenn ein Eigenwert verschwindet und alle anderen gleichverteilt  $\lambda_i = \frac{1}{n-1}$  sind. Innerhalb der Kugel mit Radius  $R = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}}$  befinden sich somit nur gültige Dichtematrizen.

Zusammenfassend handelt es sich also beim Raum aller Zustände um eine kompakte, konvexe Menge mit Zentrum  $\frac{1}{n}\hat{1}$ , berandet durch die rangreduzierten Zustände und mit den reinen Zuständen  $\hat{\rho}_p$  als die Eckpunkte des Rands, eingebettet in die BLOCHKugel. Diese Eigenschaften sind in Abbildung 2.2 in Form einer einfachen Mengengrafik dargestellt. Dieses Mengenbild beinhaltet alle soeben beschriebenen Eigenschaften des Zustandsraums. Im Gegensatz zur kontinuierlichen Menge der reinen Zustände  $\{\hat{\rho}_p\}$  ist in dieser Darstellung jedoch eine konvexe Hülle mit einer nur diskreten, nach Zahl und Lage willkürlich gewählten Menge von Eckpunkten abgebildet. Die Eckpunkte bilden hier also kein zusammenhängendes Gebiet.

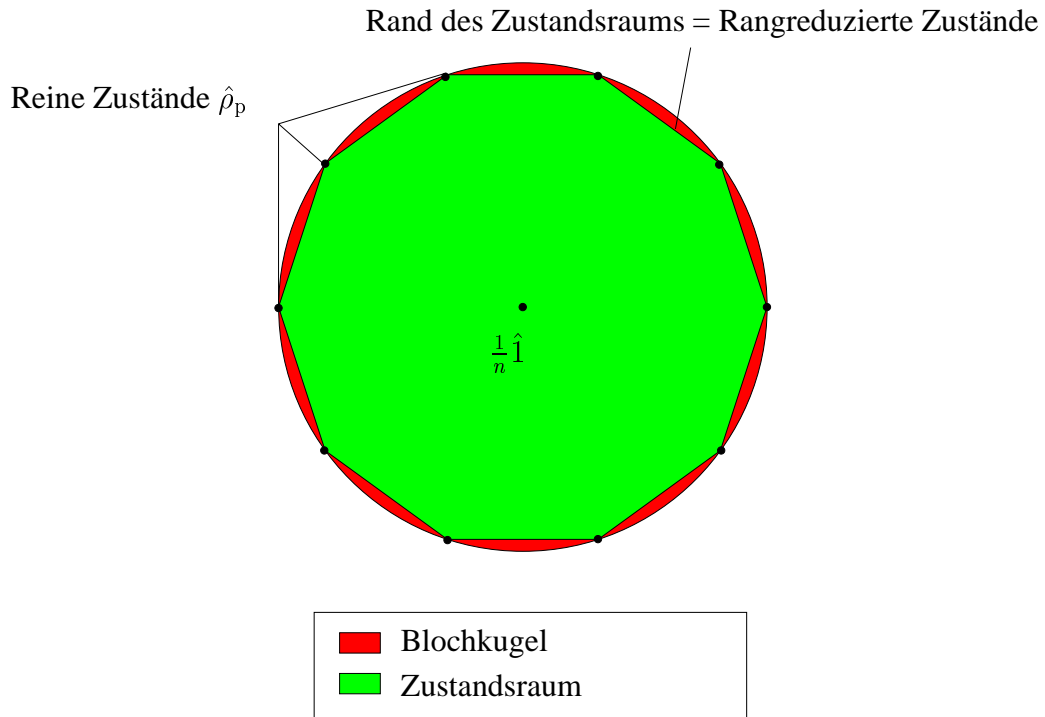


Abbildung 2.2: Darstellung des quantenmechanischen Zustandsraums als eine kompakte, konvexe Menge mit dem maximal gemischten Zustand als Zentrum und den reinen Zuständen  $\hat{\rho}_p$  als Eckpunkte des Rands, der aus allen rangreduzierten Dichtematrizen besteht.

### 2.1.7 Typischer Abstand zweier reiner Zustände

Alle reinen Zustände liegen geometrisch betrachtet auf der Oberfläche einer  $n$ -dimensionalen Kugel mit Radius  $\sqrt{1 - \frac{1}{n}}$ . Die Verteilung für den Abstand

$$d = \sqrt{\|\hat{\rho}_{p_1} - \hat{\rho}_{p_2}\|} = \sqrt{2 - 2 \text{Tr}\{\hat{\rho}_{p_1} \hat{\rho}_{p_2}\}} = \sqrt{2} \sqrt{1 - |\langle \psi | \phi \rangle|^2} \quad (2.32)$$

zwischen zwei zufällig gewählten, reinen Zustände auf der Kugeloberfläche kann statistisch mit der in Kapitel 1.2 beschriebenen Methode berechnet werden. In Abbildung 2.3 ist die Verteilung  $P_d$  des Abstands  $d$  für verschieden große Räume der Dimension  $n$  dargestellt. Für große HILBERTräume wird die Verteilung immer schärfer auf den maximal möglichen Abstand konzentriert. Bei einem großen Quantensystem liegen also zwei zufällig ausgewählte, reine Zustände typischerweise maximal weit voneinander entfernt.

### 2.1.8 Wertebereich einer Dichtematrix

Bei reinen Zuständen  $|\psi\rangle$  und  $|\varphi\rangle$  ist es üblich, die Projektion  $\langle \psi | \varphi \rangle$  des einen Zustands auf den anderen zu betrachten und damit einen neuen Vektor  $|\alpha\rangle$

$$|\alpha\rangle = |\psi\rangle \langle \psi | \varphi \rangle \quad (2.33)$$

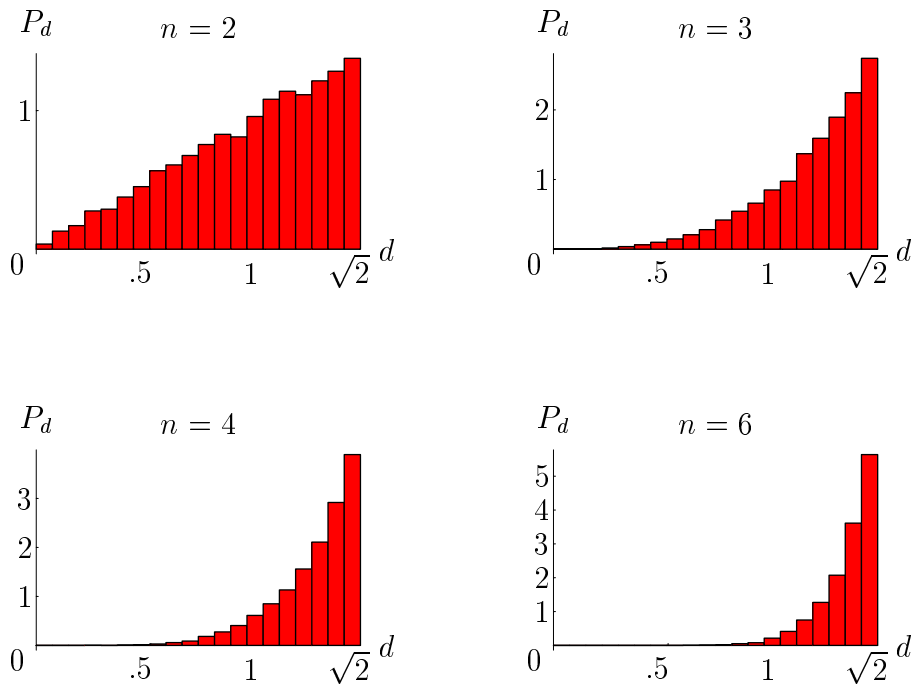


Abbildung 2.3: Verteilung des Abstands,  $P_d$ , zweier reiner Zustände eines Systems der Dimension  $n$  bei einem statistischen Ensemble von 10000 Zustandspaa- ren. Der maximale Abstand ist  $d_{\max} = \sqrt{2}$ .

zu definieren. Dieser Vektor hat die gleiche Richtung wie  $|\psi\rangle$ , ist aber wegen  $0 \leq \langle \psi | \phi \rangle \leq 1$  unnormiert und hat eine Länge  $\leq 1$ . Dieses Prinzip der Projektion kann auf den Fall von Dichtematrizen verallgemeinert werden. Die "Projektion" eines reinen Zustands  $|\varphi\rangle$  auf eine Dichtematrix  $\hat{\rho}$  ergibt einen neuen Vektor

$$|\alpha\rangle = \hat{\rho} |\varphi\rangle . \quad (2.34)$$

Für reine Zustände  $\hat{\rho}_p = |\psi\rangle \langle \psi|$  geht diese verallgemeinerte Projektion in die ursprüngliche Definition über. Schreibt man  $\hat{\rho}$  als eine Mischung von reinen Zuständen, so sieht man, dass diese verallgemeinerte Projektion als eine konvexe Summe von normalen Projektionen angesehen werden kann

$$|\alpha\rangle = \hat{\rho} |\varphi\rangle = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \varphi \rangle , \quad (2.35)$$

und auch hier gilt, dass  $|\alpha\rangle$  unnormiert ist. Allerdings kann nun  $|\alpha\rangle$  auch eine Länge  $> 1$  annehmen.

Die Menge aller Vektoren  $\{|\alpha\rangle\}$ , die durch die "Projektion" der Dichtematrix  $\hat{\rho}$  auf die Menge aller möglichen Vektoren  $\{|\beta\rangle\}$  gebildet wird, ist als der Wertebereich von  $\hat{\rho}$  definiert:

**Definition 9.**  $R(\hat{\rho})$  : Wertebereich ("range") eines Dichteoperators  $\hat{\rho}$

$$R(\hat{\rho}) = \{|\alpha\rangle : \exists |\beta\rangle : |\alpha\rangle = \hat{\rho} |\beta\rangle\} \quad (2.36)$$

Zu beachten ist, dass weder  $|\alpha\rangle$  noch  $|\beta\rangle$  normiert sein müssen. Da  $\hat{\rho}$  ein hermitescher, linearer Operator ist, wird der Wertebereich  $R(\hat{\rho})$  durch die Eigenvektoren von  $\hat{\rho}$  zu Eigenwerten  $\neq 0$  aufgespannt. Dies sieht man leicht, wenn man  $\hat{\rho}$  in seiner Eigenbasis mit den Eigenvektoren  $|\lambda_i\rangle$  und zugehörigen, von Null verschiedenen Eigenwerten  $\lambda_i$  schreibt:

$$|\alpha\rangle = \hat{\rho}|\varphi\rangle = \sum_i \lambda_i |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i|\varphi\rangle \quad (2.37)$$

Die Dimension des Wertebereichs entspricht somit der Zahl der von Null verschiedenen Eigenwerte der Dichtematrix und damit dem Rang  $r(\hat{\rho})$ :

$$\dim(R(\hat{\rho})) = r(\hat{\rho}) \quad (2.38)$$

Als linearen Operator lässt sich für die Dichtematrix  $\hat{\rho}$  auch ein Kern definieren.

**Definition 10.**  $K(\hat{\rho})$ : Kern ("kernel") eines Dichteoperators  $\hat{\rho}$

$$K(\hat{\rho}) = \{|\alpha\rangle : \hat{\rho}|\alpha\rangle = 0\} . \quad (2.39)$$

Für die Dimension gilt

$$\dim(K(\hat{\rho})) = n - \dim(R(\hat{\rho})) = n - r(\hat{\rho}) . \quad (2.40)$$

Der Zusammenhang zwischen Kern und Wertebereich ist die Orthogonalität der beiden Räume

$$|\varphi\rangle \in R(\hat{\rho}), \quad |\psi\rangle \in K(\hat{\rho}) \quad \Rightarrow \quad \langle \psi|\varphi\rangle = 0 . \quad (2.41)$$

Kern und Wertebereich zusammen spannen den gesamten HILBERTraum auf. Deshalb kann jeder reine Zustand  $|\varphi\rangle$  als eine Superposition

$$|\varphi\rangle = |\varphi^R\rangle + |\varphi^K\rangle \quad (2.42)$$

geschrieben werden mit  $|\varphi^R\rangle \in R(\hat{\rho})$  und  $|\varphi^K\rangle \in K(\hat{\rho})$ .

**Lemma 11.**

$$|\varphi\rangle \in R(\hat{\rho}) \quad \Rightarrow \quad K(\hat{\rho}) \subseteq K(|\varphi\rangle \langle \varphi|) \quad (2.43)$$

*Beweis.* Sei  $|\alpha\rangle \in K(\hat{\rho}) \Rightarrow \hat{\rho}|\alpha\rangle = 0$ . Dann gilt mit der Voraussetzung  $\exists |\beta\rangle : |\varphi\rangle = \hat{\rho}|\beta\rangle$  für  $|\varphi\rangle \langle \varphi|\alpha\rangle = |\varphi\rangle \langle \beta|\hat{\rho}|\alpha\rangle = 0$  und damit  $|\alpha\rangle \in K(|\varphi\rangle \langle \varphi|)$ .  $\square$

### 2.1.9 Subtraktion von Dichtematrizen

In Kapitel 2.1.6 wurde die Möglichkeit der Addition von Dichtematrizen als eine wichtige Eigenschaft des Zustandsraums identifiziert. Die Addition im Sinne einer inkohärenten Mischung von Zuständen gehört seit langem zum Standard der Quantenmechanik. Die Subtraktion von Dichtematrizen hingegen ist ein viel weniger bekanntes Gebiet. Insbesondere bei der Frage nach der Separabilität von Zuständen (Kapitel 2.2) kann die Subtraktion sehr nützlich sein (Kapitel 4).

Mathematisch gesehen ist die Subtraktion von Dichtematrizen erheblich schwieriger als die Addition. Grund hierfür ist die Tatsache, dass bei der Addition von zwei positiven Operatoren immer wieder ein positiver Operator entsteht. Bei der Subtraktion von Operatoren bleiben zwar Hermitizität und bei geeigneter Wahl der Vorfaktoren auch die Spur erhalten – die Positivität des Ergebnisses jedoch ist im Allgemeinen nicht gewährleistet. Die Definition der Subtraktion einer Dichtematrix  $\hat{\rho}_1$  von einer Dichtematrix  $\hat{\rho}$  erfolgt als

$$\hat{\rho}_2 = \frac{1}{1-p}(\hat{\rho} - p\hat{\rho}_1). \quad (2.44)$$

Um die Positivität  $\hat{\rho}_2 \geq 0$  zu garantieren, muss  $p$  kleiner als eine noch näher zu bestimmende obere Grenze  $p_{\max}$  sein. Der Grenzwert  $p_{\max}$  hängt sowohl von der Ausgangsdichtematrix  $\hat{\rho}$ , also auch von der zu subtrahierenden Dichtematrix  $\hat{\rho}_1$  ab. Im folgenden wird nun näher auf diese Grenze  $p_{\max}$  eingegangen.

#### Subtraktion von beliebigen gemischten Zuständen

**Theorem 12.** *Der Operator  $\hat{\rho}_2 = \frac{1}{1-p}(\hat{\rho} - p\hat{\rho}_1)$  ist genau dann eine Dichtematrix  $\hat{\rho}_2 \geq 0$ , falls  $K(\hat{\rho}) \subseteq K(\hat{\rho}_1)$  und  $p \leq p_{\max}$  gilt, wobei die Grenze bei*

$$p_{\max} = \frac{1}{\lambda_{\max}(\hat{\rho}^{-\frac{1}{2}} \hat{\rho}_1 \hat{\rho}^{-\frac{1}{2}})} > 0$$

liegt.

*Beweis.* Siehe [19] in Verbindung mit Lemma 2. Der Eigenwert  $\lambda_{\max}$  ist positiv, da er als Betragsquadrat eines Vektors darstellbar ist und es gilt  $\lambda_{\max} \neq 0$ , da wegen der Spurbedingung  $\text{Tr}\{\hat{\rho}\} = 1$  keine Dichtematrizen mit  $K(\hat{\rho}) = \{\text{Menge aller Zustände}\}$  existieren.  $\square$

Dieses Theorem benötigt weitere Erläuterung. Der Nenner von  $p_{\max}$  ist der größte Eigenwert der Matrix  $\hat{\rho}^{-\frac{1}{2}} \hat{\rho}_1 \hat{\rho}^{-\frac{1}{2}}$ . Der größte Eigenwert eines Operators  $\hat{\rho}$  lässt sich auch darstellen als

$$\lambda_{\max}(\hat{\rho}) = \max_{\rho_p} \text{Tr}\{\hat{\rho}_p \hat{\rho}\} = \max_{|\varphi\rangle} \langle \varphi | \hat{\rho} | \varphi \rangle.$$

Der Operator  $\hat{\rho}^{-\frac{1}{2}}$  ist als Potenz von  $\hat{\rho}$  anzusehen. Zur allgemeinen Definition der Potenzierung von Dichtematrizen dient

**Definition 13.** Sei  $\hat{\rho} = \sum_i \lambda_i |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i|$  die Eigendarstellung von  $\hat{\rho}$  mit den von 0 verschiedenen Eigenwerten  $\lambda_i$  und Eigenvektoren  $|\lambda_i\rangle$ . Die  $r$ -te Potenz ( $r \in \mathbb{R}$ ) von  $\hat{\rho}$  ist dann

$$\hat{\rho}^r = \sum_i \lambda_i^r |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i| .$$

Diese Definition ist unabhängig davon, ob die Dichtematrix  $\hat{\rho}$  invertierbar ist, oder nicht. Damit ist  $\hat{\rho}^r$  auch für Zustände definiert, die verschwindende Determinante haben. Betrachtet man die Spektralzerlegung von  $\hat{\rho}$ , so sieht man, dass da  $\hat{\rho}$  hermitesch ist, auch  $\hat{\rho}^r$  hermitesch sein muss.

**Lemma 14.**

$$R(\hat{\rho}^r) = R(\hat{\rho}) \tag{2.45}$$

$$K(\hat{\rho}^r) = K(\hat{\rho}) \tag{2.46}$$

*Beweis.* Die Operatoren  $\hat{\rho}$  und  $\hat{\rho}^r$  haben die gleichen Eigenvektoren und die gleiche Anzahl verschwindender Eigenwerte.  $\square$

Für den typischen Fall einer Dichtematrix mit Vollrang ist keine Überprüfung auf Subtrahierbarkeit nötig, denn es gilt:

**Korollar 15.** Von einer Dichtematrix  $\hat{\rho}$  mit Vollrang  $r(\hat{\rho}) = n$  ist jeder beliebige Zustand subtrahierbar.

*Beweis.* Der Wertebereich  $R(\hat{\rho})$  eines Dichteoperators  $\hat{\rho}$  mit Vollrang ist der gesamte HILBERTraum und der Kern ist die leere Menge  $K(\hat{\rho}) = \{\}$ . Damit gilt immer  $K(\hat{\rho}) \subseteq K(\hat{\rho}_1)$  und nach Theorem 12 existiert ein  $p_{\max} > 0$ , so dass jeder Zustand subtrahierbar ist.  $\square$

In der Umgebung eines Zustands mit Vollrang liegen also nur gültige Dichteoperatoren. Damit liegt der Vollrangzustand nicht am Rand der Menge aller Zustände, was die eine Richtung von Theorem 6 beweist.

### Subtraktion eines reinen Zustands

Für den Fall, dass man einen reinen Zustand  $\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_p = |\varphi\rangle \langle \varphi|$  subtrahiert, kann man den Ausdruck für  $p_{\max}$  vereinfachen. Dies führt zu dem noch häufig gebrauchten Satz:

**Theorem 16.** Der Operator  $\hat{\rho}_2 = \frac{1}{1-p}(\hat{\rho} - p\hat{\rho}_p)$  mit  $\hat{\rho}_p = |\varphi\rangle \langle \varphi|$  ist genau dann eine Dichtematrix  $\hat{\rho}_2 \geq 0$ , falls  $|\varphi\rangle \in R(\hat{\rho})$  und  $p \leq p_{\max}$  gilt, wobei die Grenze bei

$$p_{\max} = \frac{1}{\text{Tr}\{\hat{\rho}_p \hat{\rho}^{-1}\}} > 0$$

liegt.

*Beweis.* Nach Lemma 11 gilt  $K(\hat{\rho}) \subseteq K(\hat{\rho}_p)$  wegen  $|\varphi\rangle \in R(\hat{\rho})$ . Damit lässt sich Theorem 12 anwenden. Den Nenner von  $p_{\max}$  kann man in diesem Fall zu

$$\lambda_{\max} \left( \hat{\rho}^{-\frac{1}{2}} \hat{\rho}_p \hat{\rho}^{-\frac{1}{2}} \right) = \lambda_{\max} \left( \hat{\rho}^{-\frac{1}{2}} |\varphi\rangle \langle \varphi| \hat{\rho}^{-\frac{1}{2}} \right) \quad (2.47)$$

umschreiben. Da  $|a\rangle := \hat{\rho}^{-\frac{1}{2}} |\varphi\rangle$  ein unnormierter Vektor der Länge  $\alpha$  ist,  $|a\rangle = \alpha |\hat{a}\rangle$ , gilt weiter

$$\lambda_{\max} (|a\rangle \langle a|) = |\alpha|^2 \lambda_{\max} (|\hat{a}\rangle \langle \hat{a}|) = |\alpha|^2 = \langle \varphi | \hat{\rho}^{-\frac{1}{2}} \hat{\rho}^{-\frac{1}{2}} | \varphi \rangle \quad (2.48)$$

und mit  $\hat{\rho}^{-\frac{1}{2}} \hat{\rho}^{-\frac{1}{2}} = \hat{\rho}^{-1}$  folgt abschließend

$$\lambda_{\max} \left( \hat{\rho}^{-\frac{1}{2}} \hat{\rho}_p \hat{\rho}^{-\frac{1}{2}} \right) = \langle \varphi | \hat{\rho}^{-1} | \varphi \rangle = \text{Tr} \{ \hat{\rho}_p \hat{\rho}^{-1} \} . \quad (2.49)$$

□

Der Operator  $\hat{\rho}^{-1}$  kann nach Definition 13 gebildet werden und wird Pseudo-Inverse (auch verallgemeinerte Inverse oder MOORE-PENROSE Inverse) genannt. Die Pseudoinverse ergibt sich allgemein aus der Singularwert-Zerlegung [20, 21] der Dichtematrix  $\hat{\rho}$

$$\hat{\rho} = u^\dagger \rho_D v \quad (2.50)$$

$$\hat{\rho}^{-1} := v^\dagger \rho_D^{-1} u \quad (2.51)$$

mit  $\rho_D$  als Diagonalmatrix, gebildet aus den Singularwerten von  $\hat{\rho}$  und  $u, v$  als Zeilen-Orthonormale (im Allgemeinen nicht quadratische) Matrizen, welche die Relationen

$$u u^\dagger = 1, \quad v v^\dagger = 1, \quad (\text{aber im Allgemeinen } u^\dagger u \neq 1, \quad v^\dagger v \neq 1) \quad (2.52)$$

erfüllen. Die Pseudoinverse ist damit so gewählt, dass die Summe der Quadrate der Einträge der Matrix  $\hat{\rho} \hat{\rho}^{-1} - \hat{1}$  minimal wird. Für invertierbare Matrizen geht die Pseudoinverse in die normale Inverse über.

**Lemma 17.** Für einen beliebigen Zustand  $\hat{\rho}$  und beliebige reine Zustände  $\hat{\rho}_p$  und  $\hat{\rho}'_p$  gilt

$$\text{tr} \{ \hat{\rho}_p \hat{\rho}'_p \} \leq \text{tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}'_p \} \text{tr} \{ \hat{\rho}_p \hat{\rho}^{-1} \} . \quad (2.53)$$

*Beweis.* CAUCHY-SCHWARZsche Ungleichung. Siehe auch [22]. □

Wählt man nun  $\hat{\rho}'_p = \hat{\rho}_p$ , so erhält man im Falle der Subtraktion eines reinen Zustands  $\hat{\rho}_p$  von  $\hat{\rho}$ , Korollar 16, eine Abschätzung für  $p_{\max}$  zu

$$p_{\max} \leq \text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}_p \} . \quad (2.54)$$

### Subtraktion des maximal gemischten Zustands

Für den Fall, dass man den maximal gemischten Zustand  $\frac{1}{n}\hat{1}$  subtrahiert ergibt sich

**Korollar 18.**

$$\hat{\rho}_2 = \frac{1}{1-p}(\hat{\rho} - p\frac{1}{n}\hat{1}) \geq 0 \quad \Leftrightarrow \quad p \leq n \lambda_{\min}(\hat{\rho})$$

Wobei  $p > 0$  genau dann gilt, falls die Dichtematrix  $\hat{\rho}$  Vollrang  $r(\hat{\rho}) = n$  besitzt.

*Beweis.* Ist  $K(\hat{\rho}) = \{\}$ , so folgt dies aus Theorem 12 mit  $\hat{\rho}^{-\frac{1}{2}}\hat{\rho}^{-\frac{1}{2}} = \hat{\rho}^{-1}$  und  $\frac{1}{\lambda_{\max}(\hat{\rho}^{-1})} = \lambda_{\min}(\hat{\rho})$ , da alle Eigenwerte von  $\hat{\rho}$  ungleich 0 sind. Ist  $K(\hat{\rho}) \neq \{\}$ , so gilt  $K(\hat{\rho}) \subseteq K(\hat{1})$  nicht mehr und damit  $p_{\max} = 0 = \lambda_{\min}(\hat{\rho})$ .  $\square$

Von Dichtematrizen, die nicht Vollrang besitzen, kann die Identität nicht subtrahiert werden, da der Kern der Identität die leere Menge ist und damit  $K(\hat{\rho}) \not\subseteq K(\hat{1})$ . Da jeder Zustand, von dem ein anderer nicht subtrahierbar ist, automatisch ein Randpunkt der Menge aller Zustände ist, folgt hiermit die andere Richtung des Beweises von Theorem 6, nämlich, dass der Rand aller Zustände durch die rangreduzierten Dichteoperatoren gebildet wird.

### Geometrische Deutung der Subtraktion

In Kapitel 2.1.6 wurde mit Abbildung 2.1 eine geometrische Deutung der Addition zweier Dichtematrizen  $\hat{\rho}$  und  $\hat{\rho}_1$  als ein Punkt auf der Verbindungslinie von  $\hat{\rho}$  nach  $\hat{\rho}_1$  gegeben. Für die Subtraktion

$$\hat{\rho}_2 = \frac{1}{1-p}(\hat{\rho} - p\hat{\rho}_1) \tag{2.55}$$

ist eine analoge Interpretation möglich, denn umgeformt ergibt sich

$$\hat{\rho} = (1-p)\hat{\rho}_2 + p\hat{\rho}_1. \tag{2.56}$$

Demnach liegt  $\hat{\rho}$  auf der Verbindungslinie von  $\hat{\rho}_1$  und  $\hat{\rho}_2$ , oder anders ausgedrückt: Das Ergebnis  $\hat{\rho}_2$  liegt auf der gerichteten Linie von  $\hat{\rho}_1$  nach  $\hat{\rho}$  hinter  $\hat{\rho}$ . Die Abbildung 2.4 verdeutlicht diese geometrische Interpretation der Subtraktion zweier Dichteoperatoren.



Abbildung 2.4: Geometrische Interpretation der Subtraktion einer Dichtematrix  $\hat{\rho}_1$  von einer Dichtematrix  $\hat{\rho}$ . Das Ergebnis der Subtraktion ist  $\hat{\rho}_2$ .

Auch die Existenz von  $p_{\max}$  und die Lage desjenigen Zustands, der bei der maximalen Subtraktion entsteht läßt, sich graphisch leicht deuten.

**Lemma 19.** Der Zustand  $\hat{\rho}_2$ , der bei der maximalen Subtraktion  $\hat{\rho}_2 = \frac{1}{1-p}(\hat{\rho} - p_{\max}\hat{\rho}_1)$  entsteht, liegt auf dem Rand des Zustandsraums.

*Beweis.* Für alle  $\varepsilon > 0$  ist der Operator  $\hat{\rho} - (p_{\max} + \varepsilon)\hat{\rho}_1$  nicht positiv definit und damit liegen in der  $\varepsilon$ -Umgebung von  $\hat{\rho}_2$  nicht nur Dichtematrizen.  $\square$

Die Abbildung 2.5 zeigt eine solche maximale Subtraktion im Zustandsraum auf sehr anschauliche Weise.

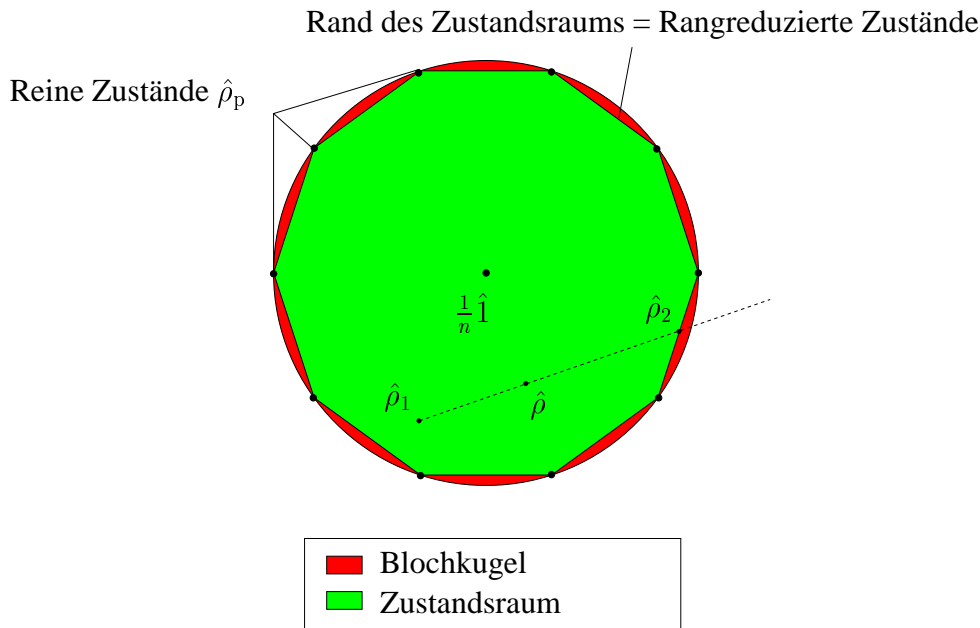


Abbildung 2.5: Geometrische Darstellung der maximalen Subtraktion einer Dichtematrix  $\hat{\rho}_1$  von der Dichtematrix  $\hat{\rho}$ . Das Ergebnis  $\hat{\rho}_2$  liegt auf dem Rand aller Zustände.

Mit Hilfe der maximalen Subtraktion läßt sich der Rang einer Dichtematrix reduzieren:

**Lemma 20.** Bei der maximalen Subtraktion eines Produktzustands  $\hat{\rho}_2 = \frac{1}{1-p}(\hat{\rho} - p_{\max}\hat{\rho}_p)$  erniedrigt sich der Rang um eins

$$r(\hat{\rho}_2) = r(\hat{\rho}) - 1 .$$

*Beweis.* Siehe [19].  $\square$

Die Reduzierung des Ranges einer Dichtematrix mittels Subtraktion funktioniert natürlich nur so lange, wie der Zustand noch gemischt ist. Die Subtraktion kann deshalb auch als Definition der Eckpunkte des jeweiligen konvexen Raums gesehen werden:

**Definition 21.** Die Eckpunkte (Extremalpunkte) einer konvexen Menge sind genau diejenigen Punkte, von denen kein anderer Punkt der Menge subtrahierbar ist.

Für den Gesamt-Zustandsraum sind deshalb die reinen Zustände die Eckpunkte.

In Kapitel 2.1.8 wurde die mathematische Definition des Wertebereich einer Dichtematrix gegeben. Diese eher abstrakte Definition bekommt eine intuitive Bedeutung, wenn man das graphische Bild der Zustandsmenge betrachtet. Möchte man nämlich diejenigen reinen Zustände finden, die im Wertebereich einer Dichtematrix  $\hat{\rho}$  liegen, so sind dies genau die reinen Zustände, die von  $\hat{\rho}$  subtrahierbar sind. Für Dichtematrizen, die nicht auf dem Rand des Zustandsraum liegen ist wegen Korollar 15 die Menge aller Zustände des Wertebereich genau die Menge aller reinen Zustände. Liegt  $\hat{\rho}$  auf dem Rand, so sind nicht mehr alle reinen Zustände im Wertebereich, was anhand der Grafik 2.2 leicht nachzuvollziehen ist.

### 2.1.10 Extremalkriterium für die Subtrahierbarkeit

Um festzustellen, ob ein reiner Zustand  $\hat{\rho}_p = |\psi\rangle\langle\psi|$  von einem gegebenen Zustand  $\hat{\rho}$  subtrahierbar ist, genügt es nach Theorem 16 nicht nur  $p_{\max}$  zu bestimmen, sondern es muss zusätzlich geklärt werden, ob der Zustand  $|\psi\rangle$  im Wertebereich von  $\hat{\rho}$  liegt. Eine Möglichkeit, dies herauszufinden besteht darin, durch Aufstellung eines linearen Gleichungssystems zu probieren, den Zustand  $|\psi\rangle$  durch eine Linearkombination der Eigenzustände von  $\hat{\rho}$  darzustellen. Eine elegantere Methode hierfür, formuliert als ein Extremalkriterium, wird in diesem Kapitel vorgestellt. Die Formulierung als Extremalkriterium ermöglicht es auch, weitere Forderungen (Nebenbedingungen) an die reinen Zustände  $\hat{\rho}_p$  zu stellen. Theorem 26 beispielsweise beinhaltet die zusätzliche Forderung, dass  $\hat{\rho}_p$  ein Produktzustand sein soll.

#### Theorem 22.

$$\hat{\rho}_p \in \mathcal{R}(\hat{\rho}) \quad \Leftrightarrow \quad \text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}^{-1} \hat{\rho}_p \} = 1 = \max$$

(2.57)

*Beweis.* Da für rangreduzierte Dichteoperatoren  $\hat{\rho}$  im Allgemeinen  $\hat{\rho} \hat{\rho}^{-1} \neq \hat{1}$  gilt, ist die Singularwertzerlegung der Pseudoinversen, Gleichung (2.50) zu benutzen. Unter der Annahme  $|\psi\rangle \in \mathcal{R}(\hat{\rho})$ , d.h.  $|\psi\rangle = \hat{\rho}|\phi\rangle$  folgt:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}^{-1} \hat{\rho}_p \} &= \langle \psi | u^\dagger \hat{\rho}_D v v^\dagger \hat{\rho}_D^{-1} u u^\dagger \hat{\rho}_D v | \phi \rangle \\ &= \langle \psi | u^\dagger \hat{\rho}_D v | \phi \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{\rho} | \phi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1 \end{aligned} \quad (2.58)$$

Damit ist die eine Richtung des Theorems gezeigt. Für den Beweis in die andere Richtung nimmt man die Annahme  $\text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}^{-1} \hat{\rho}_p \} = 1$ , woraus

$$1 = \text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}^{-1} \hat{\rho}_p \} = \langle \psi | u^\dagger \hat{\rho}_D v v^\dagger \hat{\rho}_D^{-1} u | \psi \rangle = \langle \psi | u^\dagger u | \psi \rangle \quad (2.59)$$

$$\Rightarrow u^\dagger u | \psi \rangle = | \psi \rangle \quad (2.60)$$

folgt. Wählt man nun  $|\phi\rangle = v^\dagger \hat{\rho}_D^{-1} u |\psi\rangle$ , so ergibt sich damit

$$\hat{\rho} |\phi\rangle = u^\dagger \hat{\rho}_D v v^\dagger \hat{\rho}_D^{-1} u |\psi\rangle = u^\dagger u |\psi\rangle = |\psi\rangle \quad (2.61)$$

wie zu zeigen war.  $\square$

Die Singularwerte einer Matrix  $A$  ergeben sich als die Quadratwurzeln der Eigenwerte von  $AA^\dagger$  (bzw.  $A^\dagger A$ ). Die Matrix  $u$  hat damit wegen  $u u^\dagger = 1$  nur die Singularwerte 1. Da die Singularwerte einer Matrix  $A$  die Länge der Achsen des Ellipsoids festlegen, auf welchen die "Kugel" aller normierten Zustände bei Anwendung der Matrix  $A$  auf diese Zustände abgebildet werden, wird bei der Anwendung der Matrix  $u$  auf einen normierten Vektor ein neuer Vektor erzeugt, dessen Länge kleiner gleich 1 ist. Mit  $\langle \psi | \hat{\rho} \hat{\rho}^{-1} | \psi \rangle = \langle \psi | u^\dagger u | \psi \rangle = |u |\psi\rangle|^2$  folgt deshalb

$$\text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}^{-1} \hat{\rho}_p \} \leq 1. \quad (2.62)$$

Hat eine Dichtematrix  $\hat{\rho}$  Vollrang, dann ist sie invertierbar und aus Theorem 22 folgt mit  $\hat{\rho} \hat{\rho}^{-1} = \hat{1}$  sofort, in Übereinstimmung mit Korollar 15, dass alle reinen Produktzustände  $\hat{\rho}$  im Wertebereich  $\mathbb{R}(\rho)$  liegen und damit von  $\hat{\rho}$  subtrahierbar sind.

Mit diesem Theorem läßt sich leicht feststellen, ob ein reiner Zustand  $\hat{\rho}_p$  im Wertebereich einer gegebenen Dichtematrix  $\hat{\rho}$  liegt und damit von  $\hat{\rho}$  subtrahierbar ist. Möchte man jedoch nur die von  $\hat{\rho}$  subtrahierbaren reinen *Produktzustände*  $\hat{\rho}_{ps}$  finden, so kann man die Extremalwertaufgabe  $\text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}^{-1} \hat{\rho}_{ps} \} \stackrel{!}{=} \max$  mit Hilfe des in Kapitel 4.5 angegebenen Verfahren lösen.

## 2.2 Raum der separablen Zustände

Das stark zunehmende Interesse an der Quanteninformationsverarbeitung liegt in den besonderen Eigenschaften der quantenmechanischen Zuständen begründet. Nützlich für die Verarbeitung von Information ist die mit der Zahl der Teilchen exponentiell ansteigende Größe des HILBERTraums und auch das Superpositionsprinzip. Diese beiden Eigenschaften alleine rechtfertigen jedoch noch nicht die enormen Anstrengungen, die bei der Quanteninformationsverarbeitung unternommen werden müssen - denn auch klassische Systeme können diese Merkmale aufweisen. Ein Beispiel sind die elektromagnetischen Wellen, die ebenfalls in Superposition treten können. Als entscheidendes Merkmal für quantenmechanische Systeme kann jedoch die Existenz der sogenannten verschränkten Zustände angesehen werden. Dies sind Zustände, die kein klassisches Analogon besitzen. Erst mit Hilfe dieser verschränkten Zustände kommt die außergewöhnliche Leistungsfähigkeit von Systemen der Quanteninformationsverarbeitung zustande. Skalierbare Quanten-Computer und Quanten-Teleportation sind ohne Verschränkung nicht denkbar.

### 2.2.1 Definition von Verschränkung und Separabilität

Redet man von Verschränkung, so macht dies nur dann Sinn, wenn man gleichzeitig sagt "wer mit wem" verschränkt ist. Die Aussage "Der Zustand  $\hat{\rho}$  ist verschränkt" alleine, ohne weitere Information, ist deshalb ohne physikalischen Relevanz. Die Frage nach dem "wer mit wem" führt automatisch zur notwendigen Definition eines Quantennetzwerks [16, 23, 24, 25]. Ein Quantennetzwerk ist ein Quantensystem das in (experimentell) unterscheidbare Subsysteme unterteilt ist. Der Gesamt-LIOUVILLEraum  $\mathbb{L}$  kann deshalb als dyadisches Produkt der Subräume  $\mathbb{L}^{(i)}$ ,

$$\mathbb{L} = \mathbb{L}^{(1)} \otimes \mathbb{L}^{(2)} \otimes \dots \otimes \mathbb{L}^{(N)} \quad (2.63)$$

geschrieben werden, mit  $N$  als der Zahl der Untersysteme. Die Subsysteme können, müssen aber nicht, physikalisch identisch sein. Beispiele für physikalisch identische Teilsysteme sind eine lineare Kette von Ionen in einer Ionenfalle oder auch regelmäßige Quantendots. Physikalisch unterschiedliche Systeme können beispielsweise bei der Implementierung von NMR-Quantencomputing auftreten. Auch völlig verschiedene Freiheitsgrade wie z.B. Polarisation und Ort eines Photonenstrahls können als Subsysteme eines Gesamt-Quantenzustands betrachtet werden.

Verschränkung ist eng verknüpft mit dem Begriff der Korrelation [18]. Auch bei einer Korrelation muss gesagt werden, zwischen welchen Subsystemen die Korrelation besteht. Ein (klassisch) korrelierter Zustand wäre beispielsweise ein Gemisch der Zustände  $|01\rangle$  und  $|10\rangle$ <sup>1</sup>

$$\hat{\rho}_{\text{kk}} = \frac{1}{2} (|01\rangle \langle 01| + |10\rangle \langle 10|) . \quad (2.64)$$

Misst man am ersten Subsystem den Wert 0 (1), so wird man am zweiten Subsystem den Wert 1 (0) messen. Dieser Kollaps des Zustands bei einer Messung in entweder  $|01\rangle$  oder  $|10\rangle$  erfolgt instantan und über beliebige Entfernungen, ist aber natürlich völlig klassisch. Betrachtet man im Vergleich dazu einen verschränkten Zustand, beispielsweise den EPR-Zustand, Gleichung (1.44)

$$\hat{\rho}_{\text{EPR}} = \frac{1}{2} (|01\rangle \langle 01| + |10\rangle \langle 10| - |01\rangle \langle 10| - |10\rangle \langle 01|) , \quad (2.65)$$

so zeigt dieser Zustand genau das gleiche Verhalten wie der klassisch korrelierte Zustand. Im Unterschied zu  $\hat{\rho}_{\text{kk}}$  jedoch liefert eine Messung am zweiten Subsystem immer das Gegenteil der Messung am ersten System, *unabhängig* von der gewählten lokalen Messbasis. Hat man beispielsweise als Messbasis die Zustände  $|\tilde{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$  und  $|\tilde{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$  gewählt, so ist, wenn bei Subsystem 1 der Zustand  $|\tilde{0}\rangle$  gemessen worden ist, für den verschränkten Zustand Subsystem 2 immer im Zustand  $|\tilde{1}\rangle$ , wohingegen beim klassisch korrelierten Zustand Subsystem 2 mit gleicher Wahrscheinlichkeit entweder in  $|\tilde{0}\rangle$  oder in  $|\tilde{1}\rangle$  ist. Verschränkung kann deshalb als eine Art Superkorrelation angesehen werden, die über die klassisch mögliche Korrelation hinausgeht.

<sup>1</sup>Zur Notation:  $|ij\rangle := |i\rangle \otimes |j\rangle$  und  $\langle ij| := |ij\rangle^\dagger = \langle i| \otimes \langle j|$

Um den Begriff der Verschränkung mathematisch präzise zu definieren wird das Gegenteil von Verschränkung, nämlich die Separabilität eingeführt. Die Begriffe Verschränkung und Separabilität sind exklusiv zueinander. Ein Zustand ist entweder verschränkt oder separabel:

$$\hat{\rho} \text{ separabel} \Leftrightarrow \hat{\rho} \text{ nicht verschränkt}$$

**Definition 23.** Ein Quantensystem bestehend aus zwei Teilsystemen ist in einem separablen Zustand  $\hat{\rho}_s$  bezüglich seiner beiden Subsysteme genau dann, wenn die Dichtematrix als eine Mischung von reinen Produktzuständen  $\hat{\rho}_{ps_i} = \hat{\rho}_{p_i}^{(1)} \otimes \hat{\rho}_{p_i}^{(2)}$

$$\hat{\rho}_s = \sum_i p_i \hat{\rho}_{ps_i}$$

mit den normierten Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  geschrieben werden kann. Normierung  $\sum_i p_i = 1$ ; Positivität  $0 \leq p_i \leq 1$ .

Ein separabler Zustand besitzt also höchstens klassische Korrelationen zwischen den entsprechenden Subsystemen und kann als ein klassisches Gemisch gedeutet werden. Liegt ein Quantensystem bestehend aus mehr als zwei Subsystemen vor, so muss angegeben werden, bezüglich welchen Teilsystemen Separabilität vorliegt. Ein System aus drei Subsystemen kann beispielsweise Separabilität bezüglich Subsystem 1 und den beiden anderen besitzen

$$\hat{\rho}_{(1,23)} = \sum_i p_i \hat{\rho}_{p_i}^{(1)} \otimes \hat{\rho}_{p_i}^{(2,3)} \quad (2.66)$$

oder aber auch Separabilität bezüglich allen drei Subsystemen (3-er Separabilität)

$$\hat{\rho}_{(1,2,3)} = \sum_i p_i \hat{\rho}_{p_i}^{(1)} \otimes \hat{\rho}_{p_i}^{(2)} \otimes \hat{\rho}_{p_i}^{(3)}. \quad (2.67)$$

Die Definition 23 sagt genau aus, wann ein System verschränkt, d.h. nicht separabel ist und wann es nicht verschränkt, also separabel ist. Allerdings macht sie keinerlei Aussagen darüber, wie man nun wirklich feststellen kann, ob ein gegebenen Zustand separabel ist oder nicht. Das bisher ungelöste Problem, ein anwendbares Kriterium für die Separabilität eines beliebigen Quantenzustands zu finden, ist ein zentrales Problem in der Quanteninformationstheorie und wird in Kapitel 3, und mit einer neuen, effektiven Methode in Kapitel 4, ausführlich behandelt. Zur Beantwortung der Frage nach der Menge an Verschränkung (oder Separabilität), die ein gegebener Zustand beinhaltet, muss ein Maß für die Verschränkung eingeführt werden. Kapitel 3 beschreibt verschiedene Vorschläge für ein solches Maß, insbesondere in Hinblick auf ihre Verwendung als Separabilitätskriterium.

Eine wesentliche Schwierigkeit bei Definition 23 ist die Uneindeutigkeit der Zerlegung.

**Theorem 24.** Die Zerlegung eines separablen, gemischten Zustands in reine Produktzustände  $\hat{\rho}_s = \sum_i p_i \hat{\rho}_{ps_i}$  ist nicht eindeutig.

*Beweis.* Siehe Kapitel 2.2.4. □

Für den Spezialfall eines reinen Zustands ist die Zerlegung mit  $p_1 = 1$  eindeutig, und die Frage nach der Separabilität läßt sich leicht klären, wie in Kapitel 3.1 gezeigt wird.

Alle reinen Produktzustände  $\hat{\rho}_{ps}$ , die in der Zerlegung überhaupt vorkommen können, sind von  $\hat{\rho}$  subtrahierbar. Nach Korollar 16 folgt deshalb

**Korollar 25.** Sei  $\hat{\rho}_{ps} = |\varphi\rangle\langle\varphi|$  ein reiner Produktzustand. Dann gilt:

$$|\varphi\rangle \in R_s(\hat{\rho}) \quad \Leftrightarrow \quad \hat{\rho}_{ps} \text{ ist subtrahierbar von } \hat{\rho}_s$$

mit  $R_s(\hat{\rho})$  als der Untermenge der Produktzustände des Wertebereichs  $R(\hat{\rho})$ .

Die Menge aller in der Zerlegung überhaupt möglichen Zustände ist also genau  $R_s(\hat{\rho})$ . Die Bestimmung dieser Menge ist eine nicht-triviale Aufgabe, doch das folgende aus Theorem 22 abgeleitete Theorem ermöglicht genau dieses:

**Theorem 26.**

$$\hat{\rho}_{ps} \in R(\hat{\rho}) \quad \Leftrightarrow \quad \text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}^{-1} \hat{\rho}_{ps} \} = 1 = \max \quad (2.68)$$

Kapitel 4.5 beschäftigt sich mit der Lösung dieser Extremalwertaufgabe und kann zur Parametrisierung der Menge  $R_s(\hat{\rho})$  verwendet werden. Für ein Anwendungsbeispiel, siehe Abschnitt 4.10.3.

## 2.2.2 Struktur des separablen Zustandsraums

In Kapitel 2.1.6 wurde gezeigt, dass der gesamte quantenmechanische Zustandsraum eine konvexe, kompakte Menge ist, mit den rangreduzierten Dichtematrizen als Rand und den reinen Dichtematrizen als Eckpunkte des Rands. In diesem Abschnitt soll geklärt werden, welche Struktur der Unterraum der separablen Zustände hat. Wie schon beim Gesamttraum ist auch hier die Additivität der Zustände hilfreich.

**Lemma 27.** Die Addition zweier separabler Zustände  $\hat{\rho}_{s_1}$  und  $\hat{\rho}_{s_2}$  ergibt wieder einen separablen Zustand  $\hat{\rho}_s$

$$\hat{\rho}_s = (1 - p)\hat{\rho}_{s_1} + p\hat{\rho}_{s_2}, \quad 0 \leq p \leq 1$$

Damit ist gezeigt, dass auch der Raum der separablen Zustände konvex ist. Es handelt sich also um eine konvexe Untermenge des Gesamttraums, wobei die reinen Produktzustände sowohl Eckpunkte des Gesamttraums, als auch des separablen Zustandsraums sind. Alle verschränkten Zustände liegen außerhalb der konvexen Hülle gebildet durch die reinen Produktzustände. Da der Rand des separablen Zustandsraum ebenfalls aus separablen Dichteoperatoren besteht, handelt es sich um einen abgeschlossenen und damit kompakten

Unterraum. Der Gesamtraum aller Zustände wird nach Theorem 6 durch die rangreduzierten Dichtematrizen gebildet. Ein entsprechendes Kriterium für den Rand der separablen Zustände ist bisher nicht bekannt. Wäre ein solches Kriterium bekannt, so könnte man damit einfach ein Separabilitätskriterium herleiten. Mit den reinen Produktzuständen sind nur die Eckpunkte des Rands einfach identifizierbar. Nur für den Spezialfall eines HILBERTRaums der Dimension  $n \leq 6$  existiert mit dem PPT Kriterium, Kapitel 3.2.1, eine Möglichkeit, den separablen Rand zu identifizieren.

Die drei Eigenschaften, Konvexität, Kompaktheit und Untermenge des Gesamtraums sind die Begründung für die folgenden zwei Aussagen:

**Lemma 28.** *Die Addition eines verschränkten Zustands  $\hat{\rho}_v$  zu einem separablen Zustand  $\hat{\rho}_s$  kann sowohl zu einem verschränkten als auch zu einem separablen Zustand führen,*

$$\hat{\rho} = (1 - p)\hat{\rho}_s + p\hat{\rho}_v ;$$

*es existiert jedoch eine scharfe Grenze bei  $p = p_G$ , so dass gilt*

$$\hat{\rho} \text{ separabel} \Leftrightarrow p \leq p_G .$$

**Lemma 29.** *Die Addition zweier verschränkter Zustände  $\hat{\rho}_{v_1}, \hat{\rho}_{v_2}$  kann sowohl zu einem verschränkten als auch zu einem separablen Zustand führen*

$$\hat{\rho} = (1 - p)\hat{\rho}_{v_1} + p\hat{\rho}_{v_2} .$$

*Bei gegebenen  $\hat{\rho}_{v_1}$  und  $\hat{\rho}_{v_2}$  können zwei unterschiedliche Fälle auftreten:*

- *Die Dichtematrix  $\hat{\rho}$  ist für alle  $0 \leq p \leq 1$  verschränkt.*
- *Es existieren zwei Grenzen  $p_{G_1}$  und  $p_{G_2}$  mit  $0 < p_{G_1} \leq p_{G_2} < 1$ , so dass gilt*

$$\hat{\rho} \text{ ist separabel} \Leftrightarrow p_{G_1} \leq p \leq p_{G_2} .$$

### Beispiel für die Addition eines verschränkten zu einem separablen Zustand

Addiert man den verschränkten BELL-Zustand  $|\text{BELL}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$  zum separablen, maximal gemischten Zustand  $\frac{1}{n}\hat{1}$

$$\hat{\rho} = (1 - p)\frac{1}{n}\hat{1} + p|\text{BELL}\rangle\langle\text{BELL}| , \quad (2.69)$$

so läßt sich zeigen, dass für  $p \leq \frac{1}{3}$  der Zustand  $\hat{\rho}$  separabel und für  $p > \frac{1}{3}$  verschränkt ist (siehe Kapitel 3.3).

### Beispiel für die Addition zweier verschränkter Zustände

Addiert man die beiden BELL-Zustände  $|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$  und  $|\Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle)$  zu gleichen Teilen auf

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + |\Psi_2\rangle\langle\Psi_2|) \quad (2.70)$$

so erhält man einen separablen Zustand, addiert man sie jedoch mit unterschiedlichen Gewichten, z. B.

$$\hat{\rho} = \frac{1}{3}|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + \frac{2}{3}|\Psi_2\rangle\langle\Psi_2| \quad (2.71)$$

so erhält man einen verschränkten Zustand. In diesem ganz speziellen Fall lässt sich zeigen (Kapitel 3.2.2), dass die beiden Grenzen zwischen separablen und nicht separablen Zuständen zusammenfallen und bei  $p_{G_1} = p_{G_2} = \frac{1}{2}$  liegen.

### 2.2.3 Geometrische Deutung des separablen Zustandsraums

In Abbildung 2.2 wurde eine anschauliche geometrische Deutung des Gesamtzustandsraums gegeben. Da auch der separable Zustandsraum eine kompakte, konvexe Menge ist, kann dieses Bild zu einer geometrischen Veranschaulichung der Lage von verschränkten und separablen Zuständen im Gesamttraum erweitert werden. Die Menge der reinen Produktzustände ist eine Untermenge aller reinen Zustände. Damit liegen die Eckpunkte des Rands der separablen Zustände auf der BLOCHKugel. Abbildung 2.6 zeigt die Aufteilung des Gesamttraums in den separablen und den verschränkten Unterraum. In diesem anschaulichen Mengenbild sind alle bisher beschriebenen Eigenschaften der Räume berücksichtigt. Allerdings ist natürlich die Zahl und Lage der als diskret gewählten reinen Zustände und reinen Produktzustände willkürlich festgelegt worden.

anhand dieser Grafik werden die Aussagen 28 und 29 zur Addition von verschränkten und separablen Zuständen geometrisch leicht nachvollziehbar. Addiert man zwei verschränkte Zustände, so kann die Verbindungslinie den Raum der separablen Zustände in maximal zwei Punkten schneiden. Die Verbindungslinie zwischen einem separablen und einem verschränkten Zustand hingegen übertritt genau einmal die Grenzlinie zwischen den beiden Gebieten.

In dieser Grafik erkennt man auch, dass es immer möglich ist, einen beliebigen, verschränkten Zustand  $\hat{\rho}_v$  als ein Gemisch aus einem verschränkten, reinen Zustand und einem separablen, gemischten Zustand zu schreiben

$$\hat{\rho}_v = p\hat{\rho}_s + (1-p)\hat{\rho}_p \quad (2.72)$$

Diese Zerlegung wurde von LEWENSTEIN und SANPERA [22, 26] näher untersucht. Sie ist nicht eindeutig, aber sie wird eindeutig wenn man zusätzlich noch die Forderung einführt, dass  $p$  maximal sein soll. Diese Art der Zerlegung mit einem maximalen Anteil am separablen Zustand  $\hat{\rho}_s$  wird als "Best Separable Approximation" (BSA) eines verschränkten Zustands bezeichnet.

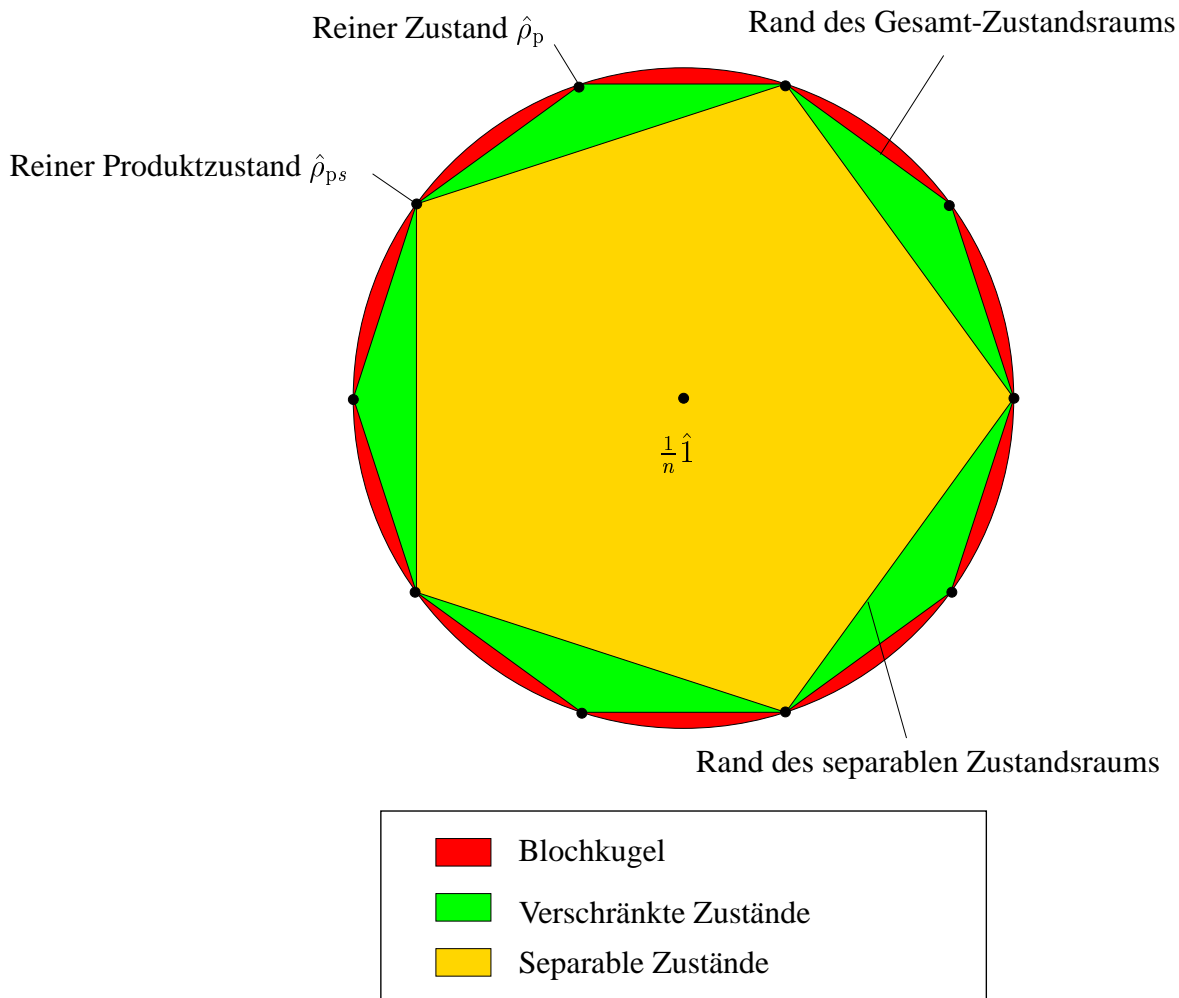


Abbildung 2.6: Darstellung des quantenmechanischen Zustandsraums und seine Unterteilung in einen separablen und verschränkten Unterraum.

### 2.2.4 Zahl der notwendigen Produktzustände der Zerlegung

Bei der Zerlegung eines gemischten, separablen Zustands in eine konvexe Summe aus reinen Produktzuständen entsprechend Definition 23 der Separabilität

$$\hat{\rho}_s = \sum_{i=1}^m p_i \hat{\rho}_{ps_i} \quad (2.73)$$

wird keine Aussage zur Zahl  $m$  der benützten reinen Produktzustände gemacht. In diesem Kapitel soll sowohl eine untere, als auch eine obere Grenze für  $m$  festgelegt werden.

Für die untere Grenze  $m_{\min}$  der minimal notwendigen  $\hat{\rho}_{ps_i}$  gilt das gleiche wie im Falle der Zerlegung eines beliebigen Zustands in reine Zustände, Gleichung (2.27).

**Lemma 30.** *Zur Zerlegung eines Zustands  $\hat{\rho}$  mit Rang  $r(\hat{\rho})$  in ein Gemisch aus reinen Zuständen  $\hat{\rho} = \sum_{i=1}^m p_i \hat{\rho}_{p_i}$  benötigt man mindestens*

$$m \geq m_{\min} = r(\hat{\rho})$$

*linear unabhängige reine Zustände  $\hat{\rho}_p$ .*

*Beweis.* Schreibt man  $\hat{\rho}_{p_i} = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ , so ergibt sich bei Anwendung von  $\hat{\rho}$  auf einen beliebigen Zustand  $|\varphi\rangle$

$$\hat{\rho}|\varphi\rangle = \sum_i p_i \langle\psi_i|\varphi\rangle |\psi_i\rangle,$$

also eine Linearkombination der  $|\psi_i\rangle$ . Der Wertebereich von  $\hat{\rho}$  wird somit durch die Zustände  $|\psi_i\rangle$  aufgespannt. Da nach Gleichung (2.38) die Dimension des Wertebereichs genau dem Rang entspricht, werden mindestens  $r(\hat{\rho})$  Zustände  $|\psi_i\rangle$  benötigt.  $\square$

Für den einfachsten Fall eines  $2 \times 2$  Systems existiert eine Methode, um jede beliebige Dichtematrix  $\hat{\rho}$  in maximal 4 reine Produktzustände zu zerlegen [27, 28]. Die Methode basiert auf der vollständigen Schärfe des PPT Kriteriums (siehe Kapitel 3.2.1) für  $2 \times 2$  Systeme. Als Beispiel einer solchen minimalen Zerlegung wird in Kapitel 4.10.2 die Zerlegung des Grenz-WERNER-Zustands in 4 reine Produktzustände angegeben. Für Quantennetzwerke, die eine andere Dimension als  $2 \times n_2$  oder  $3 \times 3$  haben, ist im Allgemeinen keine Zerlegung in nur  $r(\hat{\rho})$  reine Produktzustände möglich [29].

Für die obere Grenze  $m_{\max}$ , also die Zahl der maximal notwendigen Summanden der Zerlegung dient

**Lemma 31 (Satz von Carathéodory).** *Sei  $X$  eine Menge des  $\mathbb{R}^d$  und  $p$  ein Punkt in der konvexen Hülle von  $X$ . Dann existiert eine Untermenge  $Y$  von  $X$  bestehend aus  $d + 1$  oder weniger Punkten, so dass  $p$  in der konvexen Hülle von  $Y$  liegt.*

Als anschauliches Beispiel kann eine konvexe Menge im zwei-dimensionalen Raum dienen, Abbildung 2.7. Jeder Punkt der Menge kann hier in einem Dreieck "eingefangen" werden, wobei die Ecken des Dreiecks Extrempunkte der konvexen Menge sind. Wie man leicht erkennt, ist nicht eindeutig festgelegt, welche Eckpunkte gewählt werden müssen. Dies ist auch die Begründung für Theorem 24. Hätte man ein konstruktives Verfahren, das einem Eckpunkte liefert, die zu einem "Einfangen" eines beliebigen Punktes einer konvexen Menge ausreichen, dann hätte man damit eine Möglichkeit gefunden das Separabilitätsproblem zu lösen. Das in Kapitel 4 beschriebene, neuartige Verfahren zur Untersuchung der Separabilität baut genau auf dieser Idee auf.

Die Anwendung des Satzes von Carathéodory auf den separablen Zustandsraum der Dimension  $d = n^2 - 1$  führt zu [30]

**Theorem 32.** *Zur Zerlegung eines separablen Zustands  $\hat{\rho}_s$  in reine Produktszustände  $\hat{\rho}_{ps}$  werden maximal*

$$m_{\max} = n^2$$

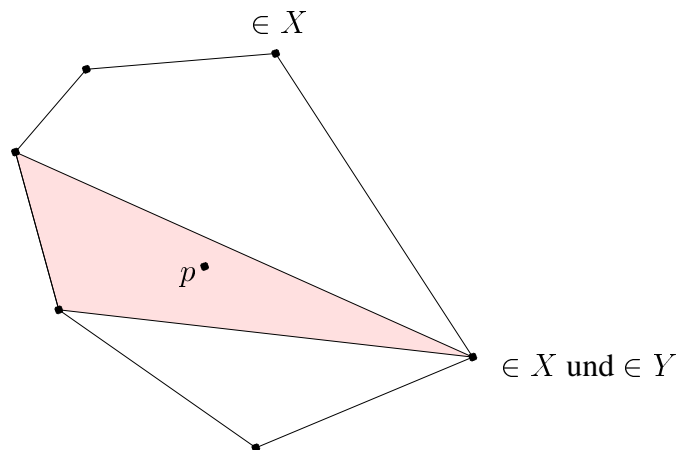


Abbildung 2.7: Satz von Carathéodory im zweidimensionalen Raum. Jeder Punkt  $p$  der konvexen Hülle von  $X$  ist in einem Dreieck gebildet aus  $Y \subset X$  einschließbar. Die Wahl des Dreiecks ist nicht eindeutig. Jeder Eckpunkt kann als ein Eckpunkt des Dreiecks gewählt werden.

reine Produktzustände benötigt. Für die rangreduzierten Zustände auf dem Rand des Zustandsraums reduziert sich  $m_{\max}$  auf  $m_{\max} = n^2 - \dim K(\hat{\rho}_s)$ .

Als sehr nützlich in der praktischen Anwendung erweist sich

**Lemma 33 (Erweiterung zum Satz von Carathéodory).** *Jedes Element von  $X$  kann als ein Element von  $Y$  gewählt werden.*

Liegt der Punkt  $p$  nicht auf dem Rand von  $X$ , so folgt daraus direkt Korollar 15.

Wie man konstruktiv von einer gegebenen Zerlegung der Dichtematrix  $\hat{\rho}_s$  mit  $m > m_{\max}$  auf eine Zerlegung in  $m \leq m_{\max}$  reine Produktzustände kommt, wird in Kapitel 4.8 vorgestellt. Diese, bis dato unbekannte Möglichkeit zur Reduktion der Zustände einer Zerlegung erlaubt es, jede separierte Dichtematrix als eine Mischung von maximal  $n^2$  reinen Produktzuständen zu schreiben.

## 2.3 Raum der Diagonalzustände

### 2.3.1 Parametrisierung

Schon das einfachste System, bei dem Verschränkung auftreten kann, nämlich das  $2 \times 2$  Quantensystem bestehend aus zwei Qubits, benötigt zur vollständigen Beschreibung seiner Zustände einen 15-dimensionalen reellen Vektorraum. Beschränkt man sich jedoch auf den Subraum der Diagonalzustände eines solchen Quantensystems, so benötigt man nur noch drei Dimensionen und kann eine graphische Abbildung dieses Diagonal-Unterraums angeben [18, 16]. Zwar kann jeder Zustand durch eine Drehung im Gesamttraum in den

Raum der Diagonalmatrizen überführt werden, da diese Drehung jedoch im Allgemeinen nicht durch zwei Drehungen der lokalen Subsystem erzielt werden kann, ändern sich bei dieser Drehung die Verschränkungseigenschaften.

Besitzt der Diagonalzustand  $\hat{\rho}_D$  die 4 Eigenwerte  $\tilde{\lambda}_i$ ,

$$\hat{\rho}_D = \sum_{i=1}^4 \tilde{\lambda}_i |i\rangle \langle i| , \quad (2.74)$$

so ergibt sich für den 15 dimensionalen BLOCHvektor, Gleichung (2.4)

$$\vec{\lambda} = \{0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, \quad (2.75)$$

$$\tilde{\lambda}_2 - \tilde{\lambda}_1, \frac{1}{\sqrt{3}}(2\tilde{\lambda}_3 - \tilde{\lambda}_2 - \tilde{\lambda}_1), \frac{1}{\sqrt{6}}(3\tilde{\lambda}_4 - \tilde{\lambda}_3 - \tilde{\lambda}_2 - \tilde{\lambda}_1)\} . \quad (2.76)$$

Berücksichtigt man wegen  $\text{Tr}\{\hat{\rho}_D\} = 1$  noch die Abhängigkeit der Eigenwerte untereinander und reduziert den BLOCHvektorraum auf einen alleine ausreichenden dreidimensionalen Unterraum, so lassen sich alle Diagonalzustände mit den drei Parametern  $\tilde{\lambda}_1$ ,  $\tilde{\lambda}_2$  und  $\tilde{\lambda}_3$  vollständig beschreiben

$$\{\lambda_{13}, \lambda_{14}, \lambda_{15}\} = \left\{ \tilde{\lambda}_2 - \tilde{\lambda}_1, \frac{1}{\sqrt{3}}(2\tilde{\lambda}_3 - \tilde{\lambda}_2 - \tilde{\lambda}_1), \frac{1}{\sqrt{6}}(3 - 4\tilde{\lambda}_3 - 4\tilde{\lambda}_2 - 4\tilde{\lambda}_1) \right\} . \quad (2.77)$$

### 2.3.2 Geometrische Darstellung

Bei dem Körper der Diagonalzustände handelt es sich um einen Tetraeder mit den reinen Zuständen  $|i\rangle$  als Eckpunkte. Abbildung 2.8 zeigt die geometrische Lage der Zustände

$$\hat{\rho}_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (|1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2|) , \quad (2.78)$$

$$\hat{\rho}_{\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}} = \frac{1}{3} (|1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2| + |3\rangle \langle 3|) \quad (2.79)$$

und des maximal gemischten Zustands  $\frac{1}{4}\hat{1}$  als Zentrum des Körpers. Die Eckpunkte liegen auf der Oberfläche der BLOCHKugel.

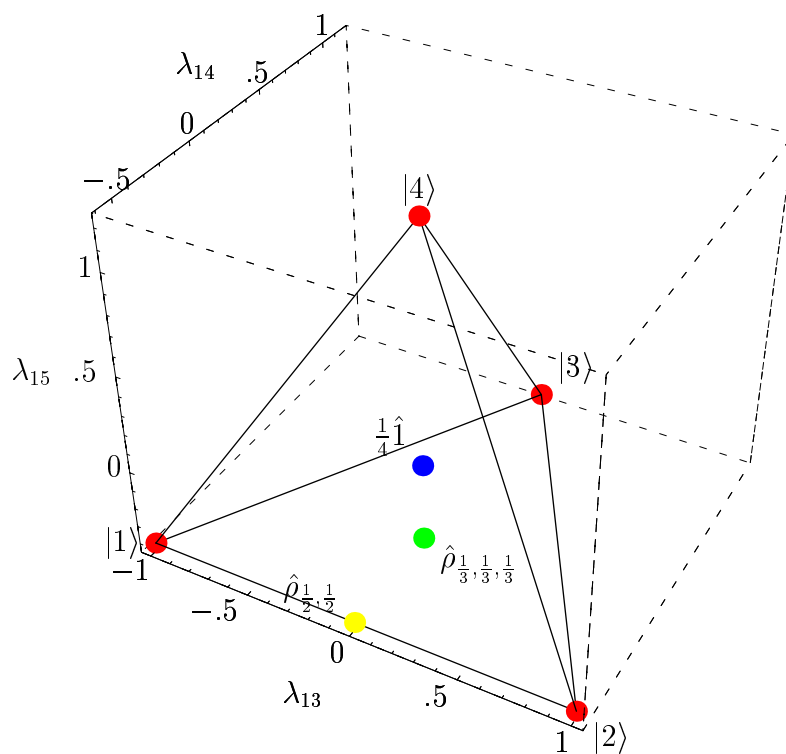


Abbildung 2.8: Die BLOCH-Darstellung der Diagonaldichtematrizen  $\hat{\rho}_D$  der Dimension  $n = 4$  ist ein Tetraeder mit den reinen Zuständen als Eckpunkten und dem maximal gemischten Zustand als Zentrum. Der gezeigte Unterraum wird durch die Komponenten  $\lambda_{13}$ ,  $\lambda_{14}$  und  $\lambda_{15}$  des BLOCHvektors gebildet, Gleichung (2.77).



# 3 Separabilitätskriterien

In diesem Kapitel wird eine Übersicht über die bisher bekannten Separabilitätskriterien gegeben. Dies ist vor allem in Hinblick auf die Einordnung des in Kapitel 4 beschriebenen neuen Separabilitätskriterium von Wichtigkeit. Wo möglich, wird eine Deutung der Kriterien mit den im vorigen Kapitel gewonnen Erkenntnissen über den Zustandsraum angegeben.

## 3.1 Kriterien für reine Zustände

Für reine Zustände  $\hat{\rho}_p$  ist die Frage nach Separabilität bzw. Verschränkung einfach zu klären. Eine Möglichkeit ist beispielsweise die direkte Überprüfung durch Bildung der reduzierten Dichtematrizen:

$$\hat{\rho}_p \text{ separabel} \Leftrightarrow \hat{\rho}_p = \text{Tr}^{(2)} \{ \hat{\rho}_p \} \otimes \text{Tr}^{(1)} \{ \hat{\rho}_p \} \quad (3.1)$$

Bei einem separablen Zustand befindet sich nicht nur das Gesamtsystem in einem reinen Zustand, sondern auch die beiden Subsysteme

$$\hat{\rho}_p \text{ separabel} \Leftrightarrow \text{Tr} \left\{ \left( \text{Tr}^{(1)} \{ \hat{\rho}_p \} \right)^2 \right\} = \text{Tr} \left\{ \left( \text{Tr}^{(2)} \{ \hat{\rho}_p \} \right)^2 \right\} = 1 .$$

Experimentell weist man Verschränkung an reinen Systemen meistens mit Hilfe der Verletzung einer BELLSchen Ungleichungen nach (siehe auch Abschnitt 3.2.1) oder durch Ausmessen der Dichtematrix  $\hat{\rho}$ .

Möchte man nicht nur ein Entscheidungskriterium, sondern ein Maß für die Verschränkung, so stehen mehrere Verschränkungsmaße zur Auswahl. Ein "gutes" Verschränkungsmaß  $E(\hat{\rho})$  für ein  $n_1 \times n_2$  Quantensystem muss die folgenden Kriterien erfüllen [31, 32]:

- $E(\hat{\rho})$  ist reell und positiv.
- $\hat{\rho}$  verschränkt  $\Leftrightarrow E(\hat{\rho}) = 0$
- $\hat{\rho}$  maximal verschränkt  $\Leftrightarrow E(\hat{\rho}) = \max$
- $E(\hat{\rho})$  ist invariant unter lokalen unitären Transformationen.
- Lokale Operationen und klassische Kommunikation führen nicht zu einer Zunahme von  $E(\hat{\rho})$ .

Diese Forderungen legen das Verschränkungsmaß nicht eindeutig fest. Als Beispiel für ein "gutes" Maß für ein Quantensystem bestehend aus zwei Subsystemen kann das in [16, 32] eingeführt Maß

$$\beta := \frac{n^2}{4(n^2 - 1)} \text{Tr}\{\hat{M}^T \hat{M}\} \quad (3.2)$$

dienen, wobei  $n = \min(n_1, n_2)$  gilt und  $\hat{M}$  der Verschränkungstensor

$$\hat{M} = \hat{K} - \vec{\lambda}^{(1)} \left( \vec{\lambda}^{(2)} \right)^T \quad (3.3)$$

mit den BLOCHvektoren  $\vec{\lambda}^{(i)}$  des  $i$ -ten Subsystems ist. Die Komponenten des Korrelationsstensor  $\hat{K}$  sind analog zu den Komponenten des BLOCHvektors definiert

$$K_{ij} = \text{Tr}\{\hat{\rho} \cdot (\hat{\lambda}_i \otimes \hat{\lambda}_j)\} . \quad (3.4)$$

Ein anderes "gutes" Maß ist die lokale VON NEUMANN Entropie

$$S^{(1)} := - \text{Tr}\{\hat{\rho}^{(1)} \log_2 \hat{\rho}^{(1)}\} \quad (3.5)$$

mit der reduzierten Dichtematrix  $\hat{\rho}^{(1)} = \text{Tr}^{(2)}\{\hat{\rho}\}$ . Da das Gesamtsystem sich in einem reinen Zustand befindet, ist die Entropie der Teilsysteme identisch  $S^{(1)} = S^{(2)}$  [33].

## 3.2 Kriterien für gemischte Zustände

Im Gegensatz zu reinen Zuständen ist die Verschränkung bei gemischten Zuständen ein offenes Problem. Es existiert bisher weder ein allgemein anwendbares Separabilitätskriterium, noch ist bekannt, wie eine Zerlegung eines separablen Zustands in reine Produktzustände für einen beliebigen separablen Zustand  $\hat{\rho}_s$  berechnet werden kann. Die folgenden Teillösungen geben einen Überblick über den aktuellen Stand dieses aktiven Forschungsgebiets.

### 3.2.1 Notwendige Separabilitätskriterien

Ein notwendiges Separabilitätskriterium ist eine Aussage, die durch jeden separablen Zustand erfüllt wird. Gilt die Aussage nicht, so ist der Zustand verschränkt (Abbildung 3.1).

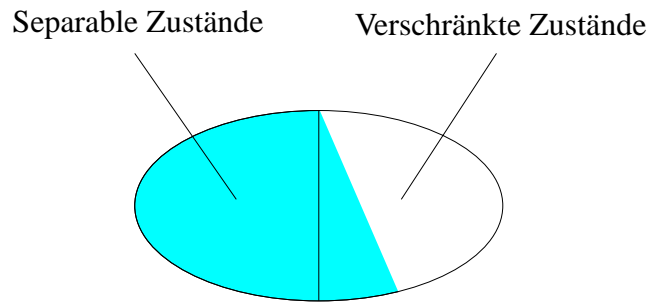


Abbildung 3.1: Im blau markierten Bereich ist ein notwendiges Separabilitätskriterium erfüllt.

### PPT-Kriterium

Das wichtigste und bisher schärfste, notwendige Separabilitätskriterium ist das PPT Kriterium von PERES [34]

$$\hat{\rho} \text{ separabel} \Rightarrow \hat{\rho}^{T_2} \geq 0 . \quad (3.6)$$

Hier bedeutet  $\hat{\rho}^{T_2} \geq 0$ , dass die von Null verschiedenen Eigenwerte der partiell Transponierten von  $\hat{\rho}$  nur positiv sind (PPT). Die partiell Transponierte einer Dichtematrix  $\hat{\rho}$  ist definiert durch Transponierung nur eines Subsystems. Transponierung von Subsystem 2 beispielsweise berechnet sich zu

$$\hat{\rho}^{T_2} = \sum_{ijkl} \langle il | \hat{\rho} | kj \rangle |ij\rangle \langle kl| . \quad (3.7)$$

Der Beweis des PPT-Kriterium ist leicht nachzuvollziehen:

$$\hat{\rho} \text{ separabel} \Rightarrow \hat{\rho} = \sum_i p_i \hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)} \Rightarrow \hat{\rho}^{T_2} = \sum_i p_i \hat{\rho}^{(1)} \otimes (\hat{\rho}^{(2)})^T \quad (3.8)$$

Da  $(\hat{\rho}^{(2)})^T = (\hat{\rho}^{(2)})^*$  eine Dichtematrix ist, ist auch  $\hat{\rho}^{T_2}$  wieder eine Dichtematrix und damit  $\hat{\rho}^{T_2} \geq 0$ .

Das PPT Kriterium ist einfach anzuwenden und für kleine Quantensysteme ist es sogar ein vollständig scharfes Kriterium [35, 36]:

$$\hat{\rho} \text{ sei } 2 \times 2 \text{ oder } 2 \times 3 \text{ Quantensystem: } \hat{\rho} \text{ separabel} \Leftrightarrow \hat{\rho}^{T_2} \geq 0 \quad (3.9)$$

Für größere Systeme können aber auch PPT Zustände, d.h. Zustände, für die Gleichung (3.6) gilt, verschränkt sein. Solche verschränkten PPT Zustände werden oft als "bound entangled states" bezeichnet.

Subtrahiert man von einer Dichtematrix  $\hat{\rho}$  einen reinen Zustand  $\hat{\rho}_p$  mit einem Subtraktionsfaktor  $p \leq p_{\max}$ , so ist für die entstehende Dichtematrix  $\hat{\rho}_2 = \frac{1}{1-p}(\hat{\rho} - p\hat{\rho}_p)$  PPT nicht

garantiert. Entsprechend Theorem 16 gilt jedoch

$$p \leq p'_{\max} = \frac{1}{\text{Tr}\{\hat{\rho}_p^{T_2} (\hat{\rho}^{T_2})^{-1}\}} \Leftrightarrow \hat{\rho}^{T_2} \geq 0. \quad (3.10)$$

Möchte man bei einer Subtraktion also garantieren, dass sowohl  $\hat{\rho} \geq 0$  als auch  $\hat{\rho}^{T_2} \geq 0$  gilt, so muss man

$$p \leq \min(p_{\max}, p'_{\max}) \quad (3.11)$$

wählen.

### Spur-Kriterium

LEWENSTEIN et. al. haben in [37] ein auf den Eigenschaften der Spurnorm basierendes, notwendiges Separabilitätskriterium angegeben:

$$\hat{\rho} \text{ separabel} \Rightarrow \max_{\hat{\rho}_{\text{ps}}} \text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{\rho}_{\text{ps}}\} \geq \max\left(\text{Tr}\{\hat{\rho}^2\}, \text{Tr}\{(\hat{\rho}^{T_2})^2\}, \text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{\rho}^{T_2}\}\right) \quad (3.12)$$

Das Maximum ist über alle reinen Produktzustände  $\hat{\rho}_{\text{ps}}$  zu nehmen. In Kapitel 4.5 wird ein Verfahren für die Berechnung des Maximums angegeben, und damit ist dieses Kriterium direkt anwendbar. Siehe auch Theorem 37 und Abbildung 4.2.

Gilt  $\max\left(\text{Tr}\{\hat{\rho}^2\}, \text{Tr}\{(\hat{\rho}^{T_2})^2\}, \text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{\rho}^{T_2}\}\right) = \text{Tr}\{\hat{\rho}^2\}$ , so kann man diesem Kriterium eine anschauliche Bedeutung ablesen, wenn man es in der Form

$$\min_{\hat{\rho}_{\text{ps}}} \|\hat{\rho} - \hat{\rho}_{\text{ps}}\| > 1 - \|\hat{\rho}\|^2 \Rightarrow \hat{\rho} \text{ ist verschränkt} \quad (3.13)$$

schreibt, denn dies erklärt, dass alle Zustände, die weit genug vom separablen Zustandsrand weg und nah genug an der BLOCHKugeloberfläche sind, verschränkt sein müssen. Dieses Kriterium kann deshalb als das Gegenstück zu der bekannten Behauptung, dass alle Zustände nahe des maximal gemischten Zustands separabel sind, angesehen werden. In Kapitel 4.4.2 wird eine geometrische Deutung dieses Kriteriums gegeben.

### Entropie-Kriterium

Die maximal verschränkten Zustände sind dadurch ausgezeichnet, dass sie lokal im total gemischten Zustand sind und damit ihre lokale Entropie (d.h. bezüglich der Untersysteme) ein Maximum annimmt. Diese Feststellung wurde in [38, 39] quantifiziert und führt zu einem notwendigen Separabilitätskriterium für ein Quantensystem bestehend aus zwei Subsystemen

$$\hat{\rho} \text{ separabel} \Rightarrow S^{(i)} \leq S, \quad (3.14)$$

wobei hier  $S$  die VON NEUMANN Entropie des Gesamtsystems  $S = -\text{Tr}\{\hat{\rho} \log_2 \hat{\rho}\}$  ist und  $S^{(i)}$  die lokale Entropie des  $i$  ten Subsystems ( $i = 1, 2$ ). Im Gegensatz zum Fall einer reinen Dichtematrix  $\hat{\rho}$  gilt hier im Allgemeinen  $S^{(1)} \neq S^{(2)}$ . Die lokalen Entropien und die Gesamtentropie erfüllen nach [33, 16] die Bedingung

$$|S^{(1)} - S^{(2)}| \leq S \leq |S^{(1)} + S^{(2)}|. \quad (3.15)$$

### Eigenwert-Kriterium

Ausgehend vom Entropie-Kriterium wurde in [39] ein verallgemeinertes, schärferes Kriterium für die Eigenwerte der Dichtematrix im Vergleich zu den Eigenwerten der reduzierten Dichtematrix für Quantensysteme bestehend aus zwei Subsystemen hergeleitet:

$$\hat{\rho} \text{ separabel} \Rightarrow \forall k = 1, \dots, n : \sum_{i=1}^k \lambda_i(\hat{\rho}) \leq \sum_{i=1}^{\min(k, n_1)} \lambda_i(\hat{\rho}^{(1)}) \quad \text{und} \quad (3.16)$$

$$\sum_{i=1}^k \lambda_i(\hat{\rho}) \leq \sum_{i=1}^{\min(k, n_2)} \lambda_i(\hat{\rho}^{(2)})$$

Dabei ist die Folge  $\{\lambda_i\}$  die Menge der Eigenwerte der entsprechenden Matrix, sortiert nach absteigendem Betrag, d.h.  $\lambda_i \geq \lambda_{j>i}$ .

### Wertebereich-Kriterium

Nach Korollar 16 müssen alle bei der Zerlegung einer separablen Dichtematrix  $\hat{\rho}_s$  vorkommenden reinen Produktzustände im Wertebereich von  $\hat{\rho}_s$  sein. Basierend darauf läßt sich ein notwendiges Separabilitätskriterium aufbauen [30].

$$\hat{\rho} \text{ separabel} \Rightarrow \text{Es existiert eine Menge von reinen Produktzuständen } \{\hat{\rho}_{\text{ps}_i}\} \text{ die den Wertebereich } R(\hat{\rho}) \text{ aufspannen und gleichzeitig spannen die partiell konjugierten Produktzustände } \{\hat{\rho}_{\text{ps}_i}^{T_2}\} \text{ den Wertebereich } R(\hat{\rho}^{T_2}) \text{ auf.}$$

Dieses Kriterium ist zwar direkt nicht leicht anwendbar, jedoch ist es für theoretische Überlegungen von Interesse und hat zur Konstruktion von verschränkten PPT Zuständen geführt [40, 41, 30].

### Destillations-Verschränkung

Die Anzahl der maximal verschränkten, reinen Zustände, die aus einem gemischten Zustand mit Hilfe von lokalen Operationen und klassischer Kommunikation erzeugt ("destilliert") werden können, ist als die Destillations-Verschränkung ("Entanglement of distillation") definiert [42]. Bisher existiert kein Verfahren, um dieses Maß für beliebige Zustände zu berechnen. Desweiteren wurde gezeigt, dass auch von verschränkten PPT Zuständen kein maximal verschränkter, reiner Zustand gewonnen werden kann [43].

$$\hat{\rho} \text{ separabel} \quad \Rightarrow \quad \text{Keine Destillations-Verschränkung}$$

### BELLSche Ungleichungen

Durch Aufstellen einer Ungleichung gelang es BELL 1964 erstmalig, ein prinzipiell experimentell überprüfbares Kriterium zu finden, ob die Physik durch eine Theorie basierend auf lokalen, evtl. versteckten Parametern und der Annahme einer objektiven Realität physikalischer Systeme beschrieben werden kann [44]. Die Überprüfung kann an EPR Zuständen, Gleichung (2.65), durch lokale Messungen erfolgen und wurde seit den ersten Experimenten von ASPECT [45, 46] mit immer aufwendigeren Verfahren und höherer Präzision durchgeführt. Alle Experimente kommen zu dem eindeutigen Schluß, dass die BELLSche Ungleichung durch bestimmte Zustände verletzt wird und damit unsere Welt entweder nichtlokal ist, oder den physikalischen Objekten keine objektive Realität mehr zugewiesen werden kann. Nichtlokalität würde bedeuten, dass sich die Parameter des einen Subsystems durch Operationen an dem anderen System instantan ändern können. Dies jedoch widerspricht der intuitiven Vorstellung und den Grundideen der Relativitätstheorie (*nicht* aber ihrer üblichen, mathematischen Formulierung, da es sich um eine ganz spezielle Art der Nichtlokalität handelt, welche die Kausalität von physikalischen Ereignissen nicht verletzt.).

Die Quantentheorie liefert die korrekte Beschreibung der Experimente zur BELLSchen Ungleichung. Sie kann also entweder als eine nichtlokale Theorie betrachtet werden, oder die Dichtematrix wird nicht mehr als objektive Realität eines Systems, sondern als das Wissen über das System angesehen. Beide Interpretationen sind möglich und sind, wie es schon das Wort "Interpretation" ausdrückt, voneinander experimentell nicht unterscheidbar.

Für reine Zustände kann immer eine BELLSche Ungleichung gefunden werden, die genau dann verletzt wird, wenn der Zustand verschränkt ist [47]. Auch für gemischte Zustände können Ungleichungen vom Typ einer BELL-Ungleichung aufgestellt werden [48, 49, 50], allerdings existiert bisher keine Ungleichung, die für alle verschränkten Zustände verletzt wird. Deshalb sind BELLSche Ungleichungen nur ein notwendiges Kriterium für Separabilität:

$\hat{\rho}$  separabel  $\Rightarrow$   $\hat{\rho}$  verletzt keine BELLSche Ungleichung

### 3.2.2 Hinreichende Separabilitätskriterien

Ein hinreichendes Separabilitätskriterium ist eine Aussage, bei deren Gültigkeit man Separabilität nachgewiesen hat. Allerdings ist das Kriterium nicht für jeden separablen Zustand erfüllt. Für jeden verschränkten Zustand hingegen ist das Kriterium nicht erfüllt. Abbildung 3.2 veranschaulicht diesen Sachverhalt.

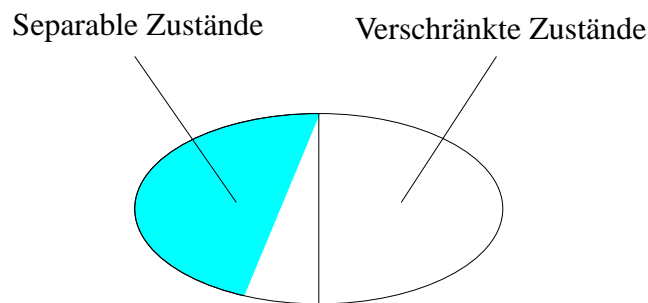


Abbildung 3.2: Im blau markierten Bereich ist ein hinreichendes Separabilitätskriterium erfüllt.

### Umgebung des maximal gemischten Zustands

Der maximal gemischte Zustand hat verschwindende Nebendiagonalelemente und kann deshalb mit rein klassischer Physik gedeutet werden. Zu seiner Beschreibung benötigt man an sich keinen HILBERT- bzw. LIOUVILLERAUM. Aus diesen Gründen kann der total gemischte Zustand als der klassischste Zustand überhaupt angesehen werden. Es ist deshalb zu erwarten, dass Zustände, die nahe am maximal gemischten Zustand liegen, auch separabel sind.

BRAUNSTEIN et. al. haben ein Quantennetzwerk bestehend aus  $N$  Qubits ( $n_i = 2$ ,  $n = 2^N$ ) in einem Zustand nahe des maximal gemischten Zustands betrachtet [51]

$$\hat{\rho} = (1 - \varepsilon) \frac{1}{n} \hat{1} + \varepsilon \hat{\rho}' , \quad (3.17)$$

wobei  $\hat{\rho}'$  eine beliebige Dichtematrix ist. Es konnte gezeigt werden, dass der Zustand  $\hat{\rho}$  immer separabel ist, falls er nahe genug an  $\frac{1}{n} \hat{1}$  liegt, d.h.  $\varepsilon$  klein genug ist:

$$\varepsilon \leq \varepsilon_G , \quad \varepsilon_G = \frac{2}{2 + n^2} \quad \Rightarrow \quad \hat{\rho} \text{ separabel} \quad (3.18)$$

Die Grenze  $\varepsilon_G$  ist unabhängig von  $\hat{\rho}'$ . Betrachtet man den Abstand des Zustands  $\hat{\rho}$  vom Zentrum  $\frac{1}{n}\hat{1}$ , so ergibt sich

$$\left\| \hat{\rho} - \frac{1}{n}\hat{1} \right\|^2 = \varepsilon^2 \left\| \hat{\rho}' - \frac{1}{n}\hat{1} \right\|^2 = \left( \|\hat{\rho}'\|^2 - \frac{1}{n} \right) \varepsilon^2 . \quad (3.19)$$

Da dieser Abstand von  $\hat{\rho}'$  abhängt und  $\|\hat{\rho}'\|^2$  auch klein sein kann, ermöglicht es dieses Kriterium nicht, eine Grenze anzugeben, ab welcher Nähe zum total gemischten Zustand alle Zustände separabel sind. Entgegen der weitläufigen Meinung [51] schließt dieses Kriterium alleine also nicht aus, dass es verschränkte Zustände in der Nähe des maximal gemischten Zustands gibt. Um zu diesem Schluß zu kommen, benötigt man die folgenden weiteren Überlegungen.

Das Kriterium von BRAUNSTEIN ist nur für Zustände der speziellen Form, Gleichung (3.17), anwendbar. Möchte man einen beliebigen Zustand  $\hat{\rho}$  mit diesem Kriterium auf Separabilität untersuchen, so muss  $\hat{\rho}$  erst in diese spezielle Form gebracht werden. Um ein möglichst scharfes Kriterium zu bekommen, ist der maximale Anteil von  $\frac{1}{n}\hat{1}$  in der zu untersuchenden Dichtematrix  $\hat{\rho}$  zu bestimmen. Die in Kapitel 2.1.9 eingeführte maximale Subtraktion ermöglicht genau das. Wendet man Korollar 18 an, so ergibt sich für die maximale Extraktion des total gemischten Zustands aus einer beliebigen Dichtematrix  $\hat{\rho}$

$$\hat{\rho} = \lambda_{\min}\hat{1} + (1 - n\lambda_{\min})\hat{\rho}' , \quad (3.20)$$

mit einer Dichtematrix  $\hat{\rho}'$ , die auf dem Rand des Zustandsraums liegt und  $\lambda_{\min}$  als den kleinsten Eigenwert von  $\hat{\rho}$ . Wendet man nun das Kriterium von BRAUNSTEIN an, so ergibt sich für ein Qubit-Quantennetzwerk ein einfaches, hinreichendes Separabilitätskriterium:

$$\lambda_{\min} \geq \frac{n}{2 + n^2} \quad \Rightarrow \quad \hat{\rho} \text{ separabel} \quad (3.21)$$

Der kleinste Eigenwert von  $\hat{\rho}$  und der Abstand von  $\hat{\rho}$  zum maximal gemischten Zustand lassen sich nicht mit einer eindeutigen Abbildung verknüpfen. Für die Extrempunkte jedoch gilt

$$\lambda_{\min} \text{ groß} \quad \Leftrightarrow \quad \left\| \hat{\rho} - \frac{1}{n}\hat{1} \right\| \text{ klein} . \quad (3.22)$$

In diesem Sinne bedeutet also das Kriterium, Gleichung (3.21), dass alle Zustände nahe des total gemischten Zustands separabel sind. Möchte man eine direkte Aussage für die Größe der Kugel um  $\frac{1}{n}\hat{1}$  haben, in der nur separable Zustände liegen, so kann man die in Abbildung 3.3 dargestellten Überlegungen machen. Der minimale Abstand eines Randpunktes  $\hat{\rho}'$  zur Mitte  $\frac{1}{n}\hat{1}$  ist nach Gleichung (2.31)  $L = \min \left\| \hat{\rho}' - \frac{1}{n}\hat{1} \right\| = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}}$ .

Wendet man nun das Kriterium von BRAUNSTEIN an, so sieht man, dass alle Zustände, die innerhalb der Kugel mit Radius  $R_G$  liegen, separabel sind

$$\left\| \hat{\rho} - \frac{1}{n}\hat{1} \right\| \leq R_G, \quad R_G = \varepsilon_G L = \frac{2}{2 + n^2} \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} \quad \Rightarrow \quad \hat{\rho} \text{ separabel} . \quad (3.23)$$

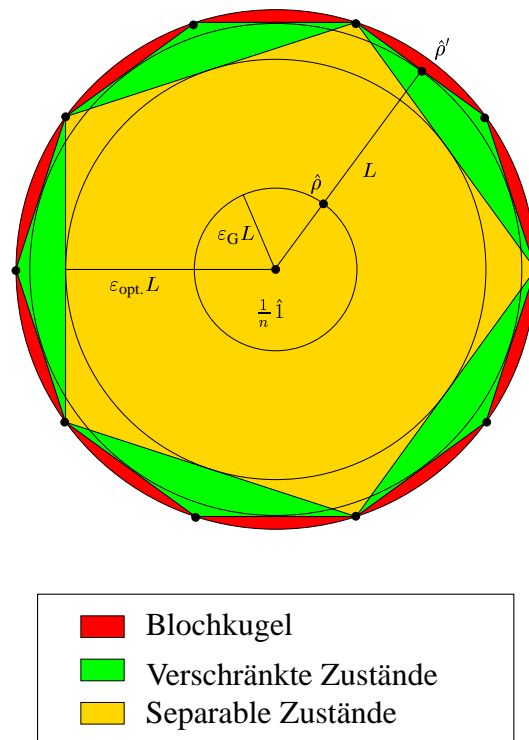


Abbildung 3.3: Bestimmung der Kugel mit Radius  $\varepsilon_G L$ , in welcher nur separable Zustände liegen. Die optimal große Kugel hat den Radius  $\varepsilon_{\text{opt.}} L$ .

Da das Kriterium von BRAUNSTEIN nicht optimal scharf ist, stellt die so berechnete Kugel natürlich nur eine untere Grenze der optimalen Kugelgröße  $R = \varepsilon_{\text{opt.}} L$  dar. Für den Spezialfall eines  $2 \times 2$  oder  $2 \times 3$  Systems konnte mit Hilfe des PPT Kriteriums in [8] das optimale  $\varepsilon_{\text{opt.}}$  zu  $\varepsilon_{\text{opt.}} = 1$  bestimmt werden. Hier gilt also

$$R_G = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}}. \quad (3.24)$$

Bei der Implementation von Quantenbits mit Hilfe der NMR läßt sich der Gesamtzustand des Systems durch eine Dichtematrix analog zu 3.17 darstellen. Der Faktor  $\varepsilon$  ist hier üblicherweise aufgrund der thermisch bedingten, geringen Besetzungszahldifferenz der beiden Qubit-Niveaus sehr klein. Nach dem Kriterium von BRAUNSTEIN sind deshalb alle (bisher) mit NMR erzeugten Zustände separabel. Für die Möglichkeit der Quanteninformationsverarbeitung hat dies jedoch keinerlei Bedeutung, da hierzu nur ein physikalisches System vorliegen muss, das Operationen ermöglicht, die in einem LIOUVILLE-Raum beschreibbar sind. Ob der Raum nun direkt ein "quantenmechanischer" LIOUVILLE-Raum ist, oder ob er, wie bei der Beschreibung der NMR, ein dazu mathematisch äquivalenter Raum ist, spielt keine Rolle. Insofern kann auch bei NMR von Verschränkung geredet werden, allerdings nicht von Verschränkung zwischen den einzelnen Spins eines Moleküls, sondern die Verschränkung ist zwischen zwei mathematisch abstrakten, zu Qubits äquivalenten, Systemen.

### Eigenwert-Kriterium

Das im letzten Abschnitt berechnete Eigenwert-Kriterium ist für beliebig große Qubit-Netzwerke verwendbar. Für den Spezialfall eines Quantensystem mit nur zwei Subsystemen wurde in [52, 53] ein schärferes Kriterium gefunden

$$\lambda_{\min} \geq \frac{1}{2 + n_1 n_2} \quad \Rightarrow \quad \hat{\rho} \text{ separabel .} \quad (3.25)$$

Da dieses Kriterium sehr leicht anwendbar ist, ist es für die Praxis nützlich.

### Korrelationstensor-Kriterium

In Abschnitt 3.1 wurde mit dem Korrelationstensor eine Größe angegeben, die alle in einem Quantensystem auftretenden Korrelationen widerspiegelt. In [54] wurde darauf basierend das bisher schärfste, hinreichende Separabilitätskriterium aufgestellt. Als Operatorbasis werden hierzu nicht mehr die Generatoren  $\{\hat{\lambda}_i\}$  der  $SU(n)$  Gruppe benützt, sondern stattdessen eine vollständige, unitäre Basis  $\{\hat{U}_i\}$ . Für eine Definition dieser Operatoren, siehe [18]. Der Korrelationstensor definiert sich nun entsprechend zu

$$\tilde{K}_{ij} := \text{Tr}\{\hat{\rho} \cdot (\hat{U}_i \otimes \hat{U}_j)\}, \quad (3.26)$$

und damit ergibt sich das Kriterium

$$\sum_{i=0}^{n_1^2-1} \sum_{j=0}^{n_2^2-1} \left| \tilde{K}_{ij} \right| \leq 2 \quad \Rightarrow \quad \hat{\rho} \text{ separabel .} \quad (3.27)$$

Dieses Kriterium ist auch relativ leicht berechenbar. Zwar ist dies das bisher beste bekannte allgemein anwendbare, analytisch berechenbare, hinreichende Separabilitätskriterium, doch es zeigt sich, beispielsweise bei einem Vergleich mit dem PPT Kriterium an Systemen mit  $n_1 n_2 \leq 6$ , dass dieses Korrelationstensor-Kriterium typischerweise nur für Zustände greift, die nahe am maximal gemischten Zustand liegen.

### Zufallsmethode

Eine unkonventionelle Methode des Nachweises von Separabilität basiert direkt auf der Definition der Separabilität. Hierzu wird eine größere Anzahl  $m$  von zufällig ausgewählten, reinen Produktdichtematrizen  $\hat{\rho}_{\text{ps}_i}$  mit dem in Kapitel 1.2 beschriebenen Verfahren erzeugt. Anschließend kann mit der in Kapitel 4.8 beschriebenen Methode überprüft werden, ob die zu untersuchende Dichtematrix  $\hat{\rho}$  in der konvexen Hülle, gebildet durch die zufälligen  $\hat{\rho}_{\text{ps}_i}$ , liegt.

$$\exists \{p_i\}, \{\hat{\rho}_{\text{ps}_i}\} : \quad \hat{\rho} = \sum_{i=0}^m p_i \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \quad \Rightarrow \quad \hat{\rho} \text{ separabel .} \quad (3.28)$$

Natürlich ist diese Methode mit einem hohen Aufwand an Rechenleistung verbunden, da die Anzahl  $m$  an zufälligen Produktzuständen typischerweise sehr groß gewählt werden muss. Da es sich hier um einen probabilistischen Algorithmus handelt, ist auch für große  $m$  keine 100 % ige Effizienz des Kriteriums zu erreichen. Im Vergleich zu allen bisher bekannten, hinreichenden Separabilitätskriterien liefert diese Methode jedoch die höchste Effizienz. Für einen Punkt in der Mitte der konvexen Hülle findet sich leichter durch Zufall eine Untermenge von Randpunkten, die den Punkt einschließen, als dies für Punkte am Rand des separablen Zustandsraums der Fall ist. Deshalb gilt auch für diese Zufalls-methode, dass Separabilität von Zuständen in der Nähe des total gemischten Zustands leichter nachzuweisen ist, als für Zustände am Rand des separablen Zustandsraums.

Anstatt die Zustände per Zufall auszuwählen kann man versuchen, ein Kriterium für deren Auswahl aufzustellen. Das in Kapitel 4 vorgestellte, neue Verfahren zum Nachweis von Separabilität verfolgt diese Idee und kommt damit zu einer noch höheren Effizienz bei geringerem Aufwand.

### Rekursive Entmischung

Siehe Kapitel 4.

### 3.2.3 Nicht operable allgemeine Separabilitätskriterien

Auf der Suche nach einem sowohl notwendigen als auch hinreichenden Separabilitäts-kriterium, das für allgemeine Quantennetzwerke angewandt werden kann, wurden einige Ergebnisse erzielt, jedoch handelt es sich bei allen bisher gefunden allgemeinen Kriterien eher um Umformulierungen des Separabilitätsproblems, Definition 23, als um konkret anwendbare Lösungen.

### Verschränkungs-Operator

Die Idee des Verschränkungs-Operators ("entanglemen witness") [35, 49, 37, 50, 55, 41] basiert auf den Eigenschaften des Skalarprodukts.

*Eine Dichtematrix  $\hat{\rho}$  eines Systems bestehend aus zwei Subsystemen ist genau dann verschränkt, wenn ein hermitescher Operator  $\hat{W}$  existiert, mit den Eigenschaften*

$$\text{Tr}\{\hat{W} \hat{\rho}\} < 0 \quad \text{und} \quad \text{Tr}\{\hat{W} \hat{\rho}_s\} \geq 0 \quad (3.29)$$

*für alle separablen Dichtematrizen  $\hat{\rho}_s$ .*

Dieses Kriterium läßt sich geometrisch im BLOCHvektorraum interpretieren. Die Spur als Skalarprodukt zweier Operatoren legt einen "Winkel"  $\alpha$  zwischen den Vektoren im BLOCHvektorraum fest:

$$\text{Tr}\{\hat{W} \hat{\rho}\} = \|\hat{W}\| \|\hat{\rho}\| \cos \alpha \quad (3.30)$$

Ist das Skalarprodukt negativ, so folgt  $\frac{\pi}{2} < \alpha < \frac{3\pi}{2}$  und  $\hat{\rho}$  liegt "unterhalb" der (Hyper-) Ebene durch den Ursprung mit Normalenvektor  $\hat{W}$ . Ist das Skalarprodukt positiv, so liegt  $\hat{\rho}$  auf der anderen Seite der Ebene, also "oberhalb". Das Kriterium sagt somit aus, dass für jeden verschränkten Zustand  $\hat{\rho}$  eine Trennebene gefunden werden kann, die zwischen  $\hat{\rho}$  und der Menge aller separablen Zustände verläuft. Charakterisiert wird die Hyperebene durch den Verschränkungs-Operator  $\hat{W}$  als Normalenvektor und den Nullpunkt  $\hat{0}$ , der ein Punkt dieser Ebene ist, aber außerhalb des Zustandsraums liegt. (Die Ebene geht *nicht* durch  $\frac{1}{n}\hat{1}$ .)

Das Problem dieses Kriteriums ist es natürlich, den Operator  $\hat{W}$  zu finden, da es nur eine Aussage über dessen Existenz macht, nicht aber wo er liegt. Ansätze dazu, basierend auf der Theorie der positiven Abbildungen und der SCHMIDT-Zahl, gibt es unter anderem in [56, 55, 57, 58].

Das Kriterium läßt sich auch bezogen auf Separabilität formulieren:

*Eine Dichtematrix  $\hat{\rho}$  eines Systems bestehend aus zwei Subsystemen ist genau dann separabel, wenn  $\text{Tr}\{\hat{W}\hat{\rho}\} \geq 0$  für jeden hermiteschen Operator  $\hat{W}$  gilt, für den*

$$\text{Tr}\{\hat{W} \cdot \hat{P}^{(1)} \otimes \hat{P}^{(2)}\} \geq 0 \quad (3.31)$$

*für alle lokalen Projektionsoperatoren  $\hat{P}^{(1)}$  und  $\hat{P}^{(2)}$  ist.*

### Kriterium der vollständig positiven Abbildungen

Mit Hilfe der Theorie der vollständig positiven Abbildungen konnte das PPT Kriterium als für Systeme mit  $n \leq 6$  exakt scharfes Kriterium identifiziert werden. Diese Aussage basiert auf dem folgenden allgemeinen Separabilitätskriterium [35]:

*Ein Zustand  $\hat{\rho}$  ist genau dann verschränkt, wenn eine positive Abbildung  $\Lambda$  existiert, mit  $(\hat{1} \otimes \Lambda)(\hat{\rho}) < 0$ .*

Das PPT Kriterium ergibt sich daraus durch Festlegung von  $\Lambda$  als Transponierung. Eine andere mögliche Wahl führt zu dem sogenannten Reduktionskriterium,  $\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{1} - \hat{\rho} \geq 0 \Rightarrow \hat{\rho}$  separabel, welches allerdings schwächer als das PPT Kriterium ist [59].

Das Problem diese Kriteriums ist es, die entsprechende Abbildung  $\Lambda$  zu finden. Erste Ansätze dazu existieren [56].

### Abstand von der separablen Zustandsmenge

Ein ebenfalls auf geometrische Überlegungen zurückzuführendes Kriterium wurde in [31] erwähnt und ist eher als Maß  $E(\hat{\rho})$  für die Verschränkung einer Dichtematrix  $\hat{\rho}$  anzusehen

$$E(\hat{\rho}) = \min_{\hat{\rho}_s} \|\hat{\rho} - \hat{\rho}_s\| \quad (3.32)$$

Es handelt sich hier also um den kleinsten Abstand einer Dichtematrix  $\hat{\rho}$  zur Menge aller separablen Zustände  $\{\hat{\rho}_s\}$ . Für separable Zustände gilt deshalb  $E(\hat{\rho}) = 0$ , für verschränkte  $E(\hat{\rho}) > 0$ . Wie man das Minimum findet, ist bisher allerdings nicht bekannt.

### Erzeugungs-Verschränkung

Die Erzeugungs-Verschränkung ("Entanglement of Formation") ist ein Maß für die Verschränkung von Zuständen, das auf dem schon für reine Zustände vorgestellten Entropie-Maß basiert:

$$E(\hat{\rho}) = \min \sum_i p_i S^{(1)}(\hat{\rho}_{p_i}) \quad (3.33)$$

Bei  $S^{(1)}(\hat{\rho}_{p_i})$  handelt es sich um die lokale VON NEUMANN Entropie des ersten (oder zweiten) Subsystems, Gleichung (3.5). Die Minimierung hat über alle überhaupt möglichen Zerlegungen  $\{p_i, \hat{\rho}_{p_i}\}$  der Dichtematrix  $\hat{\rho}$  in reine Zustände zu erfolgen. Da nur für reine *Produktzustände*  $S^{(1)}(\hat{\rho}_{p_i}) = 0$  ist, gilt für jeden separablen Zustand  $E(\hat{\rho}) = 0$  und für jeden verschränkten Zustand  $E(\hat{\rho}) > 0$ . Betrachtet man  $\hat{\rho}$  als einen Zustand, der aus einer Menge von maximal verschränkten, reinen Zustände entstanden ist, wobei nur lokale Operationen und klassische Kommunikation angewandt worden sind, so entspricht  $E(\hat{\rho})$  genau der Menge von Verschränkung, die die maximalverschränkten, reinen Zuständen hatten. Deshalb der Name Erzeugungs-Verschränkung [42]. Da  $E(\hat{\rho})$  durch lokale Operationen und klassische Kommunikation nicht zunehmen kann, erfüllt es die Anforderungen eines Verschränkungsmaßes.

Die unendliche Menge an möglichen Zerlegungen macht die Anwendung dieses Maßes sehr schwierig. Für den Fall eines  $2 \times 2$  Systems konnte jedoch eine analytische Lösung gefunden werden [60, 61]:

$$E(\hat{\rho}) = h \left( \frac{1}{2} \left( 1 + \sqrt{1 - C^2(\hat{\rho})} \right) \right), \quad (3.34)$$

$$h(x) = -x \log_2 x - (1 - x) \log_2 (1 - x), \quad (3.35)$$

$$C(\hat{\rho}) = \max \left( 0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4} \right), \quad (3.36)$$

$$\{\lambda_i\} = \text{EW}(\hat{\rho} \cdot \hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_y \cdot \hat{\rho}^* \cdot \hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_y), \quad (3.37)$$

$$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (3.38)$$

Für den höherdimensionalen Fall gibt es interessante numerische Ansätze für eine Berechnung der Erzeugungs-Verschränkung [62, 63].

### Kriterium der positiven Wahrscheinlichkeiten

Für das Kriterium der positiven Wahrscheinlichkeiten [64] werden alle möglichen Zerlegungen der zu untersuchenden Dichtematrix  $\hat{\rho}$  in reine Produktzustände  $\hat{\rho}_{ps}$  betrachtet

$$\hat{\rho} = \sum_i a_i \hat{\rho}_{ps_i} . \quad (3.39)$$

Die Faktoren  $a_i$  können hierbei auch negative Werte annehmen und sind deshalb keine Wahrscheinlichkeiten mehr. Das Separabilitätskriterium lautet hiermit

$$\hat{\rho} \text{ separabel} \quad \Leftrightarrow \quad \min \sum_i |a_i| = 1 . \quad (3.40)$$

Das Minimum ist über alle überhaupt möglichen Zerlegungen zu nehmen. Für separable Dichtematrizen existiert laut Definition eine Zerlegung mit nur positiven  $a_i$  und wegen der Normierungsbedingung der Wahrscheinlichkeiten ist das Kriterium dann automatisch erfüllt. Für verschränkte Dichtematrizen existiert keine Zerlegung mit nur positiven  $a_i$ . Wie man das Minimum bestimmt, ist bisher unbekannt.

Für den einfachsten Fall eines  $2 \times 2$  Systems existiert eine Methode, um jede beliebige Dichtematrix  $\hat{\rho}$  in maximal 4 reine Produktzustände mit positiven  $a_i$  (falls  $\hat{\rho}$  separabel) bzw. in maximal 5 reine Produktzustände mit einem negativen  $a_i$  (für verschränkte  $\hat{\rho}$ ) zu zerlegen [27, 28].

### Weitere Kriterien

In [65] wurde das folgende Separabilitätskriterium vorgeschlagen:

Seien  $|\phi_i^{AB\dots M}\rangle$  die Eigenzustände zu den von 0 verschiedenen Eigenwerten  $\lambda_i$  ( $i = 1, \dots, k$ ) für eine  $m$ -Teilchen Dichtematrix  $\hat{\rho}_{AB\dots M}$ . Sei  $|\Psi\rangle$  die konvexe Linearkombination der Eigenvektoren  $|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^k y_i |\phi_i^{AB\dots M}\rangle$ ;  $\sum_{i=1}^k |y_i|^2 = 1$ . Die Dichtematrix  $\hat{\rho}_{AB\dots M}$  ist genau dann separabel, wenn die  $m$  Gleichungen

$$\det(\hat{\sigma}_\alpha - \hat{1}) = 0; \quad (\alpha = A, \dots, M) \quad \text{mit } \hat{\sigma}_\alpha = \text{tr}_\alpha\{|\Psi\rangle\langle\Psi|\} \quad (3.41)$$

$r$  verschiedene Lösungen  $\vec{y}^{(l)}$  ( $l = 1, \dots, r \geq k$ ) haben und diese die folgende Bedingung erfüllen:

Es existiert eine Menge positiver Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  mit  $\sum_{i=1}^r p_i$ , so dass

$$M^\dagger M = I_{k \times k} \quad \text{mit } M_{ij} = \sqrt{\frac{p_i}{\lambda_i}} y_j^{(i)} .$$

Die Dichtematrix läßt sich dann zerlegen als

$$\hat{\rho}_{AB\dots M} = \sum_{i=1}^r p_i |\psi_i^A \dots \psi_i^M\rangle \langle \psi_i^A \dots \psi_i^M|; \quad \text{mit} \quad (3.42)$$

$$|\psi_i^A \dots \psi_i^M\rangle = \sum_{j=1}^k y_{ji}^{(i)} |\phi_j^{AB\dots M}\rangle .$$

Über die Lösbarkeit dieser Gleichungssysteme ist bisher, außer für spezielle Fälle, wenig bekannt.

Ein weiteres Kriterium wurde in [66] vorgeschlagen. Auch hier ist die Praktikabilität eher fraglich [67].

### 3.3 Kriterien für spezielle Zustandsklassen

#### Verallgemeinerte WERNER-Zustände

In [68] wurde von WERNER eine für die Untersuchung von Verschränkung besonders interessante Zustandsfamilie vorgeschlagen, die aus der Mischung eines maximal verschränkten Zustands mit dem total gemischten Zustand besteht. Als maximal verschränkter Zustand wird einer der vollständig symmetrischen Zustände der BELL-Basis genommen. (Der EPR-Zustand, Gleichung (1.44) ist der einzige antisymmetrische maximal verschränkte Zustand. Zur Rolle der Symmetrie im Zustandsraum, siehe [69].) Verallgemeinert auf  $N$  Subsysteme der Dimension  $n_i = d$  schreibt sich solch ein  $n = d^N$  dimensionaler WERNER-Zustand als

$$\hat{\rho} = (1 - \alpha) \frac{1}{n} \hat{1} + \alpha |\psi\rangle \langle \psi|, \quad (3.43)$$

mit dem maximal verschränkten Zustand

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n \bigotimes_{j=1}^d |i\rangle. \quad (3.44)$$

Der Parameter  $\alpha$  ermöglicht einen kontinuierlichen Übergang, beginnend bei  $\alpha = 0$ , vom separablen Zustandsraum hin zur verschränkten Zustandsmenge. Es konnte gezeigt werden [70], dass der Zustand  $\hat{\rho}$  genau dann separabel ist, wenn gilt:

$$\alpha \leq \frac{1}{1 + d^{N-1}} \quad (3.45)$$

In Kapitel 4.10.2 wird der WERNER-Zustand mit  $d = N = 2$  näher untersucht. Eine Verallgemeinerung der WERNER-Zustände auf gemischte Zustände wurde in [71] vorgenommen.

#### Rangreduzierte Zustände

Für rangreduzierte Dichtematrizen, also Zustände auf dem Rand des erlaubten Zustandsraums, existieren einige Separabilitätskriterien. Für ein  $n_1 \times n_2$  System mit partiell positiv Transponierter gilt [53]:

$$r(\hat{\rho}) \leq \max(n_1, n_2) : \quad \hat{\rho}^{T_2} \geq 0 \quad \Leftrightarrow \quad \hat{\rho} \text{ separabel} \quad (3.46)$$

Für diese stark rangreduzierten Zustände konnte in [53] auch ein Verfahren zur expliziten Zerlegung in reine Produktzustände angegeben werden. Weiter wurde für Zustände mit  $r(\hat{\rho}) + r(\hat{\rho}^{T_2}) \leq 2n_1n_2 - n_1 - n_2 + 2$  ein algorithmisches Verfahren zur Überprüfung der Separabilität gefunden. Für den speziellen Fall eines Systems bestehend aus zwei Qubits und einem weiteren Subsystem wurden in [72] Separabilitätskriterien für stark rangreduzierte Zustände aufgestellt.

## 3.4 Separabilität in "großen" Systemen

Verschränkung als typische "quantenmechanische" Eigenschaft wird oftmals nur bei kleinen Systemen vermutet. Bei typischen "klassischen" Systemen, die normalerweise viele Freiheitsgrade haben, redet man im Allgemeinen nicht von Verschränkung. In diesem Kapitel soll untersucht werden, wie sich die Verschränkung beim Übergang von einem "kleinen" zu einem "großen" System verhält. Der HILBERTraum sei dabei immer diskret und endlich.

### 3.4.1 Verschränkung innerhalb des Gesamtsystems

Betrachtet wird ein System bestehend aus zwei Subsystemen der Dimensionen  $n_1$  und  $n_2$  in einem reinen Gesamtzustand (o.B.d.A.  $n_1 \leq n_2$ ). Koppeln die beiden Subsysteme aneinander an, so bewirkt die Wechselwirkung im Allgemeinen einen (unitären) Übergang zu einem Zustand, der irgendwo im HILBERTraum sein wird. Möchte man systemunabhängige Aussagen treffen, so muss man alle möglichen Wechselwirkungen (HAMILTON-Operatoren) in Betracht ziehen. Dies führt zur Betrachtung einer Gleichverteilung der Zustände im HILBERTraum (Kapitel 1.2). Greift man also zufällig einen Zustand aus dem HILBERTraum heraus, so stellt sich die Frage, wie wahrscheinlich es ist, dass es sich um einen verschränkten Zustand handelt.

Wie gezeigt wurde, kann zur Klärung der Frage, ob Verschränkung zwischen den beiden Teilsystemen besteht, die VON NEUMANN Entropie der Subsysteme, Gleichung (3.5), benutzt werden. Im folgenden wird unter Entropie immer diese *lokale* VON NEUMANN Entropie verstanden. Benutzt man die eindeutig festgelegte Gleichverteilung auf dem Raum der reinen Zustände, Kapitel 1.2, so läßt sich aus der Verteilung der Eigenwerte eines Subsystems, Gleichung (1.49), der Mittelwert der Entropie in Abhängigkeit der Dimensionen  $n_1$  und  $n_2$  berechnen [73, 74, 75, 4, 12]

$$\langle S \rangle = \mu_S = \frac{1 - n_1}{2n_2} + \sum_{k=n_2+1}^{n_1n_2} \frac{1}{k}. \quad (3.47)$$

Die Näherung für ein großes zweites Subsystem  $n_1 \ll n_2$  führt zu [11]:

$$\langle S \rangle = \ln n_1 - \frac{n_1^2 - 1}{2n_1n_2 + 2} \quad (3.48)$$

Handelt es sich bei beiden Subsystemen um große Systeme mit  $1 \ll n_1 \leq n_2$ , so gilt

$$\langle S \rangle = \ln n_1 - \frac{n_1}{2n_2}, \quad (3.49)$$

und für  $n_1 \ll n_2$  erhält man in diesem Fall

$$\langle S \rangle \approx \ln n_1 = S_{\max}. \quad (3.50)$$

Koppelt ein kleines System (Objekt) an ein großes System (Umgebung) an – was zum Beispiel auch bei einer quantenmechanischen Messung der Fall ist – so wird also die Verschränkung innerhalb des Gesamtsystems und damit die Verschränkung zwischen Objekt und Umgebung maximal. In Abbildung 3.4 ist der Mittelwert der Verschränkung  $\langle E \rangle = \langle S/S_{\max} \rangle$ ,  $E \in [0, 1]$  für ein  $2 \times n_2$  System in Abhängigkeit von  $n_2$  dargestellt. Man erkennt, wie die Verschränkung für große  $n_2$  gegen den Maximalwert 1 strebt.

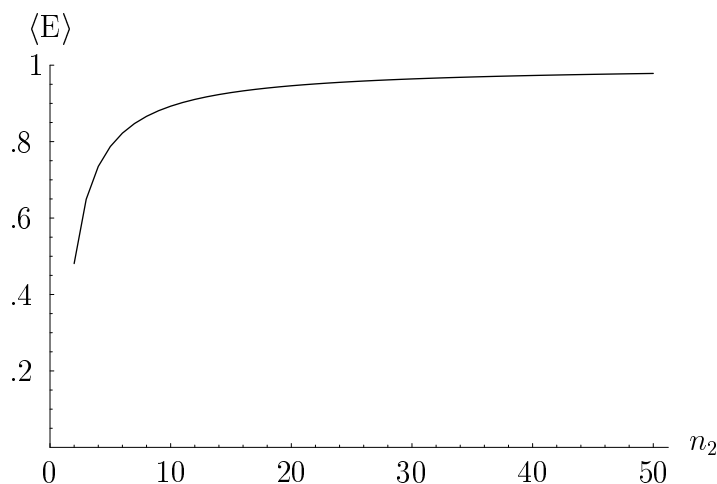


Abbildung 3.4: Mittelwert der Verschränkung  $\langle E \rangle$  zwischen den beiden Subsystemen eines reinen  $2 \times n_2$  Systems, in Abhängigkeit der Dimension  $n_2$  des zweiten Subsystems.

Koppeln zwei große Systeme aneinander, so werden die beiden Subsysteme nahezu maximal miteinander verschränkt werden. Für  $1 \ll n_1 \leq n_2$  ergibt sich

$$\langle E \rangle \approx 1 - \frac{n_1}{2n_2 \ln n_1}. \quad (3.51)$$

Schon für mesoskopische Quantennetzwerke ist die Verschränkung sehr hoch. Betrachtet man beispielsweise zwei Subsysteme, die aus jeweils 100 zwei-Niveau-Systemen bestehen,  $n_1 = n_2 = 2^{100}$ , so folgt für die durchschnittliche Verschränkung  $\langle E \rangle \approx 0.99$ . Große Systeme sind also typischerweise miteinander verschränkt. Betrachtet man ein solches System separat für sich, so hat es nahezu maximale Entropie und befindet sich, wie man es aus der klassischen Physik kennt, in einem Zustand, der keine Nebendiagonalelemente in der Dichtematrix stehen hat. Hieraus ergeben sich interessante Aussagen zum zweiten Hauptsatz der Thermodynamik [14].

### 3.4.2 Verschränkung innerhalb eines Subsystems

Im Gegensatz zum letzten Abschnitt soll nun die Verschränkung *innerhalb* eines Subsystems eines reinen  $n_1 \times n_2$  Systems betrachtet werden. O.B.d.A. wird das erste Subsystem als das auf Verschränkung zu untersuchende und das zweite Subsystem als das ankoppelnde System betrachtet.

Da bisher kein analytisch zugängliches Maß für die Verschränkung gemischter Zustände existiert, wird die Reinheit  $P(\hat{\rho}) = \text{Tr}\{(\hat{\rho}^{(1)})^2\}$  betrachtet, die nach dem Kriterium Gleichung (3.23) Separabilität für kleine  $P(\hat{\rho})$  garantiert. Für den Mittelwert der Reinheit ergibt sich (sei  $n_1 \leq n_2$ ) aus der lokalen Eigenwertverteilung der gleichverteilten reinen Zustände [11, 73]

$$\langle P \rangle = \frac{n_1 + n_2}{n_1 n_2 + 1}. \quad (3.52)$$

Für die Näherung eines großen ankoppelnden Subsystem  $n_1 \ll n_2$  erhält man damit

$$\langle P \rangle \approx \frac{1}{n_1} = P_{\min}, \quad (3.53)$$

was im Falle zweier großer Systeme  $1 \ll n_1 \leq n_2$  den Grenzwert

$$\langle P \rangle \approx 0 \quad (3.54)$$

ergibt. Koppelt ein kleines System an ein großes System an – was wiederum typisch bei einer quantenmechanischen Messung der Fall ist – so geht das kleine System in einen Zustand minimaler Reinheit also maximaler Gemischtheit über. (Das große System geht in einen Zustand über, der für dieses Gesamtsystem minimale Reinheit hat. Es könnte allerdings bei einem anderen Gesamtsystem, bei dem das andere Subsystem größer ist, eine noch geringere Reinheit annehmen.) Da aber alle Zustände nahe des maximal gemischten Zustand separabel sind, beinhaltet das kleinere Quantensystem keinerlei Verschränkung.

Sind beide Systeme groß (z.B. Messgerät und Beobachter), so gehen beide in einen Zustand maximaler Gemischtheit über, d.h. sie beinhalten beide keinerlei Verschränkung. Ein großes System könnte also nur dann Verschränkung beinhalten, wenn es einzig und alleine an ein kleines Quantensystem angekoppelt ist (wenn überhaupt). Da große Systeme aber normalerweise an andere große Systeme angekoppelt sind (z.B. Messgerät an Beobachter), beinhalten solche System im Allgemeinen keine Verschränkung.

Untersucht man die Wahrscheinlichkeit für einen inseparablen Zustand des ersten Subsystems in Abhängigkeit der Größe  $n_2$  des zweiten Subsystems, so sieht man einen exponentiellen Abfall mit zunehmenden  $n_2$ . In Abbildung 3.5 wurde ein  $n_1 = 4$  System auf Separabilität mit Hilfe des PPT Kriteriums, Gleichung (3.6), untersucht, wobei die Größe  $n_2$  des angekoppelten Systems variiert wird. Ein "Best Fit" an die bei der Simulation gewonnenen Daten ergibt:

$$P_E(n_2) \approx 1.6 e^{-0.1(n_2)^{1.47}} \quad (3.55)$$

Die berechneten Werte für  $n_2 = 2, 3$  weichen vom exponentiellen Abfall ab, da für diese  $n_1 \leq n_2$  nicht gilt. Abbildung 3.6 zeigt den entsprechenden Sachverhalt für  $n_1 = 6$ .

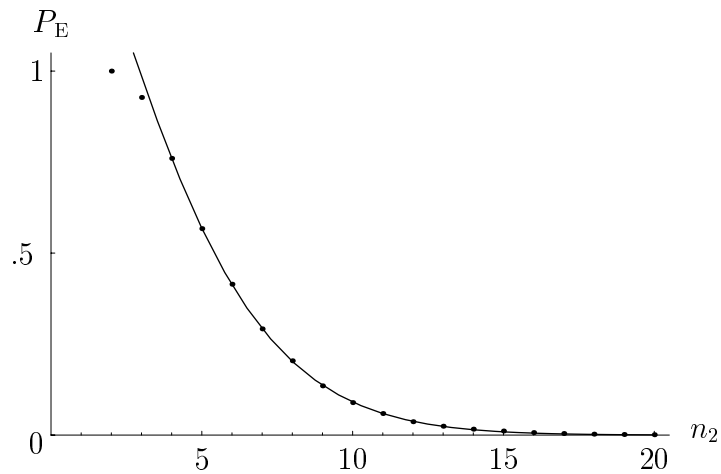


Abbildung 3.5: Wahrscheinlichkeit  $P_E$ , dass das Subsystem 1 ( $n_1 = 4$ ) Verschränkung beinhaltet, d.h. nicht-separabel ist, in Abhängigkeit der Dimension  $n_2$  des Subsystems 2. Die durchgezogene Linie ist der Fit an einen exponentiellen Abfall.

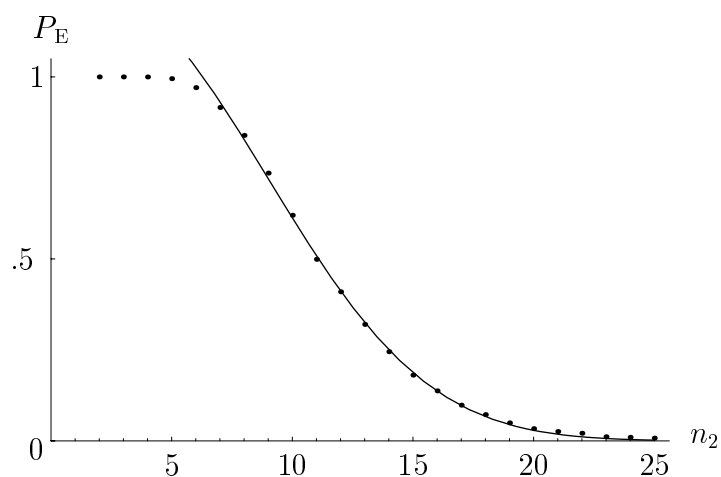


Abbildung 3.6: Wahrscheinlichkeit  $P_E$ , dass das Subsystem 1 ( $n_1 = 6$ ) Verschränkung beinhaltet, d.h. nicht-separabel ist, in Abhängigkeit der Dimension  $n_2$  des Subsystems 2. Die durchgezogene Linie ist der Fit an einen exponentiellen Abfall.



# 4 Rekursive Entmischung

Wie Kapitel 3 deutlich gezeigt hat, existiert für Quantensysteme, die größer als  $2 \times 2$  oder  $2 \times 3$  sind, bisher keine brauchbare Möglichkeit zu entscheiden, ob ein nicht reines Quantensystem nur klassische Korrelationen beinhaltet, oder ob es sich in einem nicht-klassischen, verschränkten Zustand befindet. In diesem Kapitel wird eine völlig neue Methode beschrieben, die nicht nur als Kriterium für eine solche Unterscheidung zwischen klassischen und nicht-klassischen Zuständen dienen kann, sondern die gleichzeitig auch eine explizite Zerlegung eines rein klassisch korrelierten Zustands in ein Gemisch aus reinen Produktzuständen liefert. Dieses neue Verfahren ist zusätzlich auch anwendbar auf Mehrteilchen-Separabilität und es ist nicht auf eine bestimmte Dimension des Zustandsraums eingeschränkt.

## 4.1 Grundidee

Der Zusammenhang zwischen rein klassischen Korrelationen und Separabilität eines Zustands wurde in Kapitel 2.2.1 erläutert. Um nachzuweisen, ob ein Zustand separabel, d.h. rein klassisch korreliert ist, kann man, wie in Abbildung 2.7 dargestellt, probieren, den Zustand in einem konvexen Unterraum "einzufangen", wobei die Eckpunkte des Unterraums reine Produktzustände sein müssen. Die Wahl der richtigen Eckpunkte, welche garantieren, dass der Zustand auch wirklich innerhalb des Unterraums liegt, ist bei dieser Methode natürlich die entscheidende Kunst. Das hier vorgestellte Verfahren der Rekursiven Entmischung ermöglicht genau dieses.

Ausgangspunkt für die Idee der Rekursiven Entmischung ist das Wissen, dass, wie in Kapitel 3 dargestellt, alle Zustände in der Nähe des maximal gemischten Zustands separabel sind. Das Problem der Separabilität wird also umso "einfacher", je näher man an das Zentrum des Zustandsraums gelangt. Dies erklärt auch, warum für Zustände, die sehr nahe am maximal gemischten Zustand sind, existierende Separabilitätskriterien funktionieren. Die Grundidee hinter der Methode der Rekursiven Entmischung ist nun, eine gegebene Dichtematrix durch Subtraktion von reinen Produktzuständen in die Nähe des maximal gemischten Zustands zu bringen. Die Annäherung an das Zentrum soll dabei in möglichst großen Schritten erfolgen. Hat man von einer Dichtematrix solange reine Produktzustände subtrahiert, bis als Rest nur noch der total gemischte Zustand übrig bleibt, so hat man damit Separabilität der Dichtematrix gezeigt. Im Gegensatz dazu erhält man für eine verschränkte Dichtematrix keine Konvergenz gegen das Zentrum.

## 4.2 Methode der Rekursiven Entmischung

### 4.2.1 Mathematische Beschreibung

Bei der Methode der rekursiven Entmischung handelt es sich um ein iteratives Verfahren. Ausgehend von der zu untersuchenden Dichtematrix  $\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}$  wird eine rekursive Folge  $\{\hat{\rho}_i\}$  berechnet, wobei zur Berechnung von  $\hat{\rho}_i$  nur die vorhergehende Dichtematrix  $\hat{\rho}_{i-1}$  herangezogen wird. Die entscheidenden Schritte jeder Rekursion von  $\hat{\rho}_{i-1}$  nach  $\hat{\rho}_i$  sind:

1. Suche den zu  $\hat{\rho}_{i-1}$  abstandsmäßig nächsten reinen Produktzustand  $\hat{\rho}_{ps_i}$ .
2. Subtrahiere  $\hat{\rho}_{ps_i}$  von  $\hat{\rho}_{i-1}$  so, dass die entstehende Dichtematrix  $\hat{\rho}_i$  möglichst nahe zum maximal gemischten Zustand  $\frac{1}{n}\hat{1}$  liegt.

Als Abstandsmaß wird die in Kapitel 2.1.5 eingeführte Spurnorm benutzt. Mathematisch lassen sich (wie später noch genauer gezeigt wird) die beiden Schritte zusammenfassen zur Definition der Rekursionsfolge

**Definition 34.** Das  $i$ -te Element  $\hat{\rho}_i$  der Folge der Rekursiven Entmischung ergibt sich, ausgehend vom Startwert  $\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}$ , nach der Vorschrift

$$\hat{\rho}_i := \min \left\{ \frac{1}{1 - p_i} (\hat{\rho}_{i-1} - p_i \hat{\rho}_{ps_i}) \right\},$$

wobei das Minimum bezüglich  $\hat{\rho}_{ps_i}$  und  $p_i$  so zu nehmen ist, dass  $\|\hat{\rho}_i - \frac{1}{n}\hat{1}\|$  minimal wird.

Die Minimierung von  $\|\hat{\rho}_i - \frac{1}{n}\hat{1}\|$  führt dazu, dass die Folge  $\{\hat{\rho}_i\}$  immer näher zum maximal gemischten Zustand kommt. Damit erhält man das folgende Separabilitätskriterium:

**Theorem 35.** Sei  $\{\hat{\rho}_i\}$  die Folge der Rekursiven Entmischung einer Dichtematrix  $\hat{\rho}_0$  mit Dimension  $n$ .

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \hat{\rho}_i = \frac{1}{n}\hat{1} \quad \Rightarrow \quad \hat{\rho}_0 \text{ separabel}$$

Für die Frage nach der Umkehrung dieses Theorems, siehe Abschnitt 4.9.

Die Folge  $\{\hat{\rho}_i\}$  wird bei einem separablen Zustand im Allgemeinen beliebig nahe gegen  $\frac{1}{n}\hat{1}$  konvergieren ohne den total gemischten Zustand exakt zu treffen. Ist man deshalb nur daran interessiert, ob die gegebene Dichtematrix  $\hat{\rho}$  separabel ist oder nicht, so kann man die Iteration sofort beenden, falls mit einem der bisher bekannten Separabilitätskriterien, die ja für Zustände nahe von  $\frac{1}{n}\hat{1}$  gut funktionieren, die Separabilität von  $\hat{\rho}_i$  nachgewiesen worden ist. Möchte man hingegen eine explizite Zerlegung der (separablen) Dichtematrix

$\hat{\rho}$  in reine Produktzustände, so kann man mit der Iteration aufhören, sobald sich  $\hat{\rho}$  als eine konvexe Linearkombination der bis zu diesem Zeitpunkt berechneten Menge  $\{\hat{\rho}_{ps_i}\}$  zusammen mit  $\frac{1}{n}\hat{1}$  schreiben läßt. Wie man das überprüfen kann, wird in Abschnitt 4.8 näher gezeigt. Die Methode der Rekursiven Entmischung garantiert, dass eine solche Darstellung für eine hinreichend große Folge  $i \geq i_0$  immer möglich ist.

### 4.2.2 Geometrische Darstellung des Verfahrens

Die in Kapitel 2.1.6 und 2.2.2 beschriebene Darstellung des Zustandsraums kann nun gewinnbringend zu einer geometrischen Visualisierung der Rekursiven Entmischung eingesetzt werden. Abbildung 4.1 zeigt den Verlauf der rekursiven Folge. Der zu untersuchende, hier separable Ausgangszustand ist  $\hat{\rho}_0$ . Von diesem wird der zu ihm nächste reine Produktzustand  $\hat{\rho}_{ps}$  subtrahiert, was (siehe hierzu auch Abbildung 2.4) zu einem Zustand auf der Linie von  $\hat{\rho}_{ps}$  nach  $\hat{\rho}_0$ , aber hinter  $\hat{\rho}_0$  führt. Von diesen bei der Subtraktion möglichen Zuständen wird derjenige Zustand  $\hat{\rho}_1$  gewählt, der am nächsten zum maximal gemischten Zustand  $\frac{1}{n}\hat{1}$  liegt. Nach diesem ersten Schritt der Iteration erfolgt die gleiche Prozedur, nun aber ausgehend vom Zustand  $\hat{\rho}_1$ . Wie man an der graphischen Darstellung schön sieht, nähert sich der Zustand  $\hat{\rho}_i$  mit zunehmender Zahl  $i$  der Iterationen immer mehr der Mitte  $\frac{1}{n}\hat{1}$  an. Die zu einem "Einschluß" des Punktes  $\hat{\rho}_0$  nötigen separablen Zustände sind somit leicht als die bei der Iteration auftretenden reinen Produktzustände  $\hat{\rho}_{ps_i}$  zusammen mit dem separablen Zustand  $\frac{1}{n}\hat{1}$  zu identifizieren.

Startet man mit einem verschränkten Zustand  $\hat{\rho}_0$ , so findet keine Konvergenz gegen den maximal gemischten Zustand statt, denn, wie man geometrisch erkennt, bleibt man bei einer Subtraktion von reinen Produktzuständen von einem verschränkten Zustand immer im Raum der verschränkten Zustände.

Eine ganz spezielle Situation tritt ein, wenn man von einem Punkt auf der Grenze zwischen dem Raum der separablen und dem Raum der verschränkten Zustände startet. In einem solchen Fall sind nicht mehr alle reinen Produktzustände subtrahierbar und eine Konvergenz gegen das Zentrum wird nicht auftreten, da die Subtraktion nicht zum Verlassen des Rands führen kann. Stattdessen wird das Verfahren gegen einen besonders ausgezeichneten Punkt auf der Grenze konvergieren - nämlich zu dem Grenzpunkt, der am nächsten zu  $\frac{1}{n}\hat{1}$  liegt. In Abbildung 4.1 liegen diese besonderen Punkte genau in der Mitte einer jeden Verbindungslinie zweier benachbarter, reinen Produktzustände. (Siehe hierzu auch Kapitel 4.7.)

## 4.3 Rekonstruktion des Ausgangszustands

Hat man mit Hilfe der Rekursiven Entmischung, ausgehend von der zu untersuchenden Dichtematrix  $\hat{\rho}_0$ , eine Folge von  $k$  Dichtematrizen  $\{\hat{\rho}_i\}$ , mit  $1 \leq i \leq k$  und dazugehörigen reinen, separablen Dichtematrizen  $\hat{\rho}_{ps_i}$  und Subtraktionsfaktoren  $p_i$  gewonnen, so läßt sich

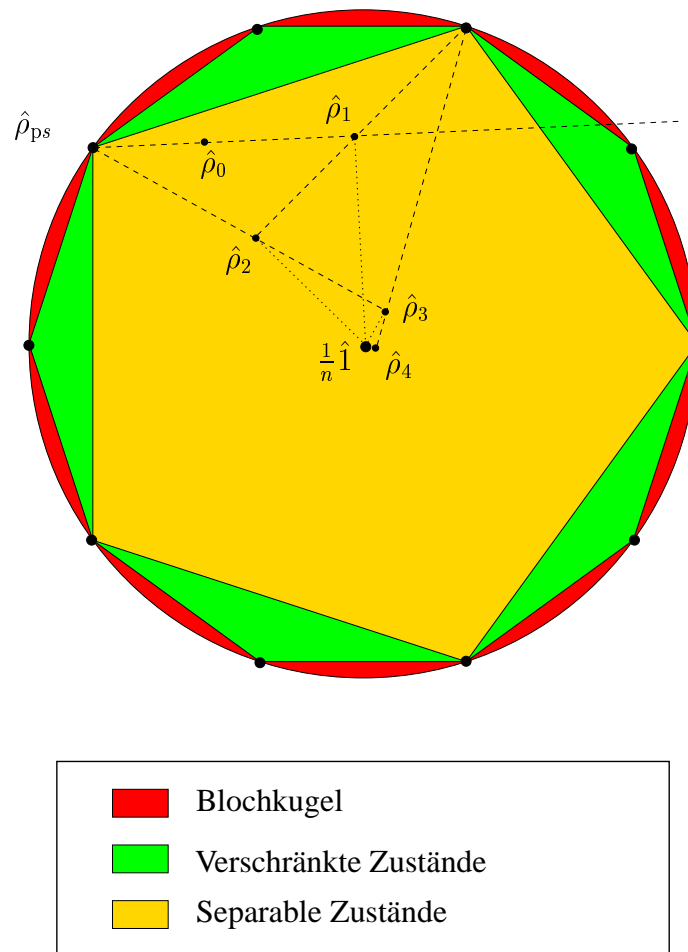


Abbildung 4.1: Graphische Darstellung der Rekursiven Entmischung eines separablen Zustands  $\hat{\rho}_0$  im Zustandsraum. Die iterative Folge  $\{\hat{\rho}_i\}$  konvergiert gegen den maximal gemischten Zustand  $\frac{1}{n}\hat{1}$ .

daraus  $\hat{\rho}_0$  rekonstruieren

$$\hat{\rho}_0 = \sum_{i=1}^k p'_i \hat{\rho}_{ps_i} + p_R \hat{\rho}_k, \quad (4.1)$$

mit

$$p'_i = p_i \prod_{j=1}^{i-1} (1 - p_j), \quad p_R = \prod_{j=1}^k (1 - p_j). \quad (4.2)$$

Der Zustand  $\hat{\rho}_k$  nähert sich mit zunehmender Anzahl  $k$  der Iterationen immer mehr dem maximal gemischten Zustand  $\frac{1}{n}\hat{1}$  an. Definiert man sich ein Restglied  $\hat{\rho}_R$ , indem man von  $\hat{\rho}_k$  die Identität auf maximale Weise subtrahiert,

$$\hat{\rho}_R = \frac{1}{1 - p_{\max}} \left( \hat{\rho}_k - p_{\max} \frac{1}{n} \hat{1} \right) \quad (4.3)$$

mit  $p_{\max}$  nach Theorem 18 zu

$$p_{\max} = n \lambda_{\min}(\hat{\rho}_k), \quad (4.4)$$

so läßt sich  $\hat{\rho}_0$  schreiben als

$$\hat{\rho}_0 = \sum_{i=1}^k p'_i \hat{\rho}_{\text{ps}_i} + p_R p_{\max} \frac{1}{n} \hat{1} + p_R (1 - p_{\max}) \hat{\rho}_R. \quad (4.5)$$

Die Konvergenz der Folge  $\{\hat{\rho}_i\}$  gegen den Zustand  $\frac{1}{n} \hat{1}$  führt zu einem verschwindenden Restglied  $p_R (1 - p_{\max}) \hat{\rho}_R$ , da gilt

$$\lim_{k \rightarrow \infty} p_{\max} = n \lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_{\min}(\hat{\rho}_k) = n \lambda_{\min}\left(\frac{1}{n} \hat{1}\right) = 1.$$

Die Zerlegung einer separablen Dichtematrix  $\hat{\rho}_s$  ist im Allgemeinen nicht eindeutig. Das Verfahren der Rekursiven Entmischung liefert nur eine der Möglichkeiten. Die Zahl der reinen Produktzustände ist mit steigender Zahl der Iterationen auch nicht die für eine Zerlegung kleinst mögliche Anzahl. Wie man jedoch immer von der mit Hilfe der Rekursiven Entmischung berechneten Zerlegung eine Zerlegung in maximal  $n^2$  reine Produktzustände erhält, ist in Abschnitt 4.8 beschrieben.

## 4.4 Maximale Nähe zum total gemischten Zustand

Der zweite Schritt einer jeden Iteration der Rekursiven Entmischung besteht darin, den im ersten Schritt gefundenen Zustand  $\hat{\rho}_{\text{ps}}$  so von  $\hat{\rho}$  zu subtrahieren, dass man möglichst nahe an den total gemischten Zustand herankommt. In diesem Abschnitt wird dieser Schritt erläutert und der für diese Subtraktion nötige Subtraktionsfaktor  $p$  bestimmt. Weiter wird gezeigt, dass man genau dann maximal nahe an das Zentrum herankommt, wenn  $\hat{\rho}_{\text{ps}}$  der zu  $\hat{\rho}$  entfernungsmaßig nächste reine Produktzustand ist, was Schritt 1 der Iteration begründet.

### 4.4.1 Bedingung für die Annäherung

Zur Berechnung der Rekursionsfolge Definition 34 benötigt man die Minimierung von  $\|\hat{\rho}_i - \frac{1}{n} \hat{1}\|$ . Eine Minimierung von  $\|\hat{\rho}_i - \frac{1}{n} \hat{1}\|$  ist äquivalent zu einer Minimierung von  $\|\hat{\rho}_i\|^2$  und somit kann die Funktion

$$f(\hat{\rho}_{\text{ps}_i}, p_i) = \|\hat{\rho}_i\|^2 = \left\| \frac{1}{1-p_i} (\hat{\rho}_{i-1} - p_i \hat{\rho}_{\text{ps}_i}) \right\|^2 = \text{Tr} \left\{ \left[ \frac{1}{1-p_i} (\hat{\rho}_{i-1} - p_i \hat{\rho}_{\text{ps}_i}) \right]^2 \right\}$$

mit den Variablen  $\hat{\rho}_{\text{ps}_i}$  und  $p_i$  zur Suche nach dem Minimum betrachtet werden. Die beiden Variablen sind voneinander unabhängig, solange man  $p_i \leq p_{\max_i}$  beachtet. Mit der Reinheit von  $\hat{\rho}_{\text{ps}_i}$  und der zyklischen Invarianz der Spur bekommt man

$$f(\hat{\rho}_{\text{ps}_i}, p_i) = \frac{1}{(1 - p_i)^2} (\text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1}^2 \} - 2p_i \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \} + p_i^2) . \quad (4.6)$$

An dieser Gleichung sieht man sofort, dass man zur Minimierung von  $f$  bezüglich der Variablen  $\hat{\rho}_{\text{ps}_i}$  genau dasjenige  $\hat{\rho}_{\text{ps}_i}$  suchen muss, das zu einem maximalen Wert von  $\text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \}$  führt. Wie in Kapitel 2.1.5 gezeigt, entspricht diese Maximierung genau der Forderung

$$\| \hat{\rho}_{i-1} - \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \| \stackrel{!}{=} \min , \quad (4.7)$$

also der Suche nach dem zu  $\hat{\rho}_{i-1}$  abstandsmäßig nächsten reinen Produktzustand. Für die Minimierung bezüglich der zweiten Variablen  $p_i$ , muss man die Ableitungen betrachten:

$$\frac{\partial f}{\partial p_i} = \frac{2}{(p_i - 1)^3} (\text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \} (p_i + 1) - \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1}^2 \} - p_i) \quad (4.8)$$

Die Funktion hat genau ein Extremum an der Stelle

$$\frac{\partial f}{\partial p_i} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad p_i' := \frac{\text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \} - \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1}^2 \}}{1 - \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \}} . \quad (4.9)$$

Für dieses Extremum erhält man für den Funktionswert und für die Krümmung

$$f(\hat{\rho}_{\text{ps}_i}, p_i') = \frac{\text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \}^2 - \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1}^2 \}}{2 \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \} - 1 - \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1}^2 \}} , \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial p_i^2} (p_i') = 2 \frac{(\text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \} - 1)^4}{(1 + \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1}^2 \} - 2 \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \})^3} . \quad (4.11)$$

Sonstige Grenzwerte der Funktion sind:

$$\lim_{p_i \rightarrow \infty} f(p_i) = 1 , \quad \lim_{p_i \rightarrow -\infty} f(p_i) = 1 , \quad f(0) = \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1}^2 \} , \quad (4.12)$$

$$\lim_{p_i \rightarrow 1} f(p_i) = \begin{cases} +\infty & : \quad 1 + \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1}^2 \} - 2 \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \} > 0 \\ -\infty & : \quad 1 + \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1}^2 \} - 2 \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \} < 0 \end{cases} . \quad (4.13)$$

Aus Lemma 2 folgt die Abschätzung für den Nenner der zweiten Ableitung

$$\begin{aligned} 1 + \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1}^2 \} - 2 \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \} &\geq 1 + \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1}^2 \} - 2\lambda_{\max} \\ &= \lambda_{\max}^2 - 2\lambda_{\max} + 1 + \sum_{\lambda_i \neq \lambda_{\max}} \lambda_i^2 \\ &\geq \lambda_{\max}^2 - 2\lambda_{\max} + 1 = (1 - \lambda_{\max})^2 \\ &\geq 0 , \quad \text{da } 0 \leq \lambda_{\max} \leq 1 . \end{aligned} \quad (4.14)$$

Damit gilt  $\frac{\partial^2 f}{\partial p_i^2}(p'_i) \geq 0$  und die Funktion  $f$  hat ein globales Minimum bei  $p'_i$ . Gilt  $p'_i > 0$ , was für  $\text{Tr}\{\hat{\rho}_{i-1}\hat{\rho}_{ps_i}\} > \text{Tr}\{\hat{\rho}_{i-1}^2\}$  der Fall ist, so folgt daraus, dass das gesuchte Minimum bei  $p_i = p'_i$  liegt und der Funktionswert an dieser Stelle  $< \text{Tr}\{\hat{\rho}_{i-1}^2\} = \|\hat{\rho}_{i-1}\|^2$  ist. Im Falle von  $p'_i < 0$  gilt für alle  $0 < p_i \leq 1$ :  $f(p_i) > \text{Tr}\{\hat{\rho}_{i-1}^2\}$ . Die soeben gewonnen Erkenntnisse lassen sich zusammenfassen in

**Theorem 36.** *Eine Annäherung an den maximal gemischten Zustand bei einem Iterationsschritt der rekursiven Entmischung  $\hat{\rho}_i = \frac{1}{1-p_i}(\hat{\rho}_{i-1} - p_i\hat{\rho}_{ps_i})$  erfolgt genau dann, wenn ein  $\hat{\rho}_{ps_i}$  gefunden werden kann, mit*

$$\text{Tr}\{\hat{\rho}_{i-1}\hat{\rho}_{ps_i}\} > \text{Tr}\{\hat{\rho}_{i-1}^2\}.$$

Die maximal mögliche Annäherung erfolgt bei einer Wahl von

$$\|\hat{\rho}_{i-1} - \hat{\rho}_{ps_i}\| = \min$$

und

$$p_i = \frac{\text{Tr}\{\hat{\rho}_{i-1}\hat{\rho}_{ps_i}\} - \text{Tr}\{\hat{\rho}_{i-1}^2\}}{1 - \text{Tr}\{\hat{\rho}_{i-1}\hat{\rho}_{ps_i}\}}.$$

Dieses wichtige Theorem liefert das Auswahlkriterium für die in der Zerlegung einer separablen Dichtematrix nach der Methode der Rekursiven Entmischung vorkommenden reinen Produktzustände. Desweiteren macht dieses Theorem eine Aussage darüber, wann *keine* Annäherung an den total gemischten Zustand erreicht werden kann. Zu beachten ist, dass mit dem Theorem nicht garantiert ist, dass  $p_i \leq p_{\max_i}$  gilt. In Kapitel 4.9 wird auf das Problem der Beschränkung auf den separablen Unterraum bei der Subtraktion eingegangen.

Die Möglichkeit der Annäherung an den maximal gemischten Zustand ist der entscheidende Unterschied zwischen separablen und verschränkten Zuständen, der bei der Rekursiven Entmischung ausgenutzt wird. Bei separablen Zuständen ist *immer* eine Annäherung möglich (außer bei den Fixpunkten, Abschnitt 4.7). Im Gegensatz dazu ist es bei verschränkten Zuständen *nicht* garantiert, dass eine Annäherung möglich ist. Der folgende Satz formuliert diesen Sachverhalt mit Bezug auf Theorem 36 und stellt ein notwendiges Kriterium für Separabilität dar.

**Theorem 37.** *Für jede separable Dichtematrix  $\hat{\rho}_s$  kann ein  $\hat{\rho}_{ps}$  gefunden werden, so dass gilt:*

$$\text{Tr}\{\hat{\rho}_s\hat{\rho}_{ps}\} \geq \text{Tr}\{\hat{\rho}_s^2\}$$

*Beweis.* Siehe Beweis von Theorem 39 oder alternativ dazu Gleichung (3.12).  $\square$

### 4.4.2 Graphische Deutung

Die im letzten Abschnitt herausgearbeiteten Bedingungen für die Wahl von  $\hat{\rho}_{i-1}$  und  $\hat{\rho}_{\text{ps}_i}$  können auch geometrisch, z.B. im Bild der BLOCHvektoren, gedeutet werden. Alle Dichtematrizen  $\hat{\rho}_i(p_i) = \frac{1}{1-p_i}(\hat{\rho}_{i-1} - p_i\hat{\rho}_{\text{ps}_i})$  liegen auf einer Geraden, die durch  $\hat{\rho}_{i-1}$  und  $\hat{\rho}_{\text{ps}_i}$  verläuft. Gesucht ist derjenige Punkt  $\hat{\rho}_i(p_i)$  auf dieser Geraden, der dem maximal gemischten Zustand  $\frac{1}{n}\hat{1}$  am nächsten kommt. Dies ist genau dann der Fall, wenn die Gerade durch  $\hat{\rho}_i(p_i)$  und  $\frac{1}{n}\hat{1}$  und die Subtraktions-Gerade gebildet durch die  $\hat{\rho}_i(p_i)$  sich senkrecht schneiden. Bei festem  $\hat{\rho}_{\text{ps}_i}$  und beliebigen  $\hat{\rho}_{i-1}$  liegen alle diese Punkte auf dem Kreis mit den beiden Polen  $\hat{\rho}_{\text{ps}_i}$  und  $\frac{1}{n}\hat{1}$  ("Thaleskreis"). Abbildung 4.2 verdeutlicht diesen Zusammenhang. Der Mittelpunkt der Kugel ist

$$\hat{\rho}_M := \frac{1}{2}(\hat{\rho}_{\text{ps}_i} + \frac{1}{n}\hat{1}) \quad (4.15)$$

und für den Radius ergibt sich die Hälfte des Abstand eines reinen Zustands zum Mittelpunkt, Gleichung (2.24)

$$R = \left\| \hat{\rho}_M - \frac{1}{n}\hat{1} \right\| = \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{1}{n}}. \quad (4.16)$$

Für alle gesuchten Punkte  $\hat{\rho}_i(p_i)$  muss also

$$\|\hat{\rho}_i - \hat{\rho}_M\| = R \quad (4.17)$$

gelten und nach Einsetzen von  $\hat{\rho}_M$  und  $R$  in diese Gleichung erhält man mit Quadrierung und unter Verwendung der Spurnorm:

$$\text{Tr}\{\hat{\rho}_i^2\} = \text{Tr}\{\hat{\rho}_i\hat{\rho}_{\text{ps}_i}\} \quad (4.18)$$

Einsetzen von  $\hat{\rho}_i$  und Auflösen nach  $p_i$  führt nun zu dem erwarteten Ergebnis

$$p_i = \frac{\text{Tr}\{\hat{\rho}_{i-1}\hat{\rho}_{\text{ps}_i}\} - \text{Tr}\{\hat{\rho}_{i-1}^2\}}{1 - \text{Tr}\{\hat{\rho}_{i-1}\hat{\rho}_{\text{ps}_i}\}}. \quad (4.19)$$

Auch die in Theorem 36 angegebene Bedingung  $\text{Tr}\{\hat{\rho}_{i-1}\hat{\rho}_{\text{ps}_i}\} > \text{Tr}\{\hat{\rho}_{i-1}^2\}$ , die dafür sorgt, dass man bei einer Subtraktion (und nicht durch Addition) näher an den maximal gemischten Zustand kommt, läßt sich geometrisch leicht interpretieren. Sie entspricht der Forderung, dass sich der Punkt  $\hat{\rho}_{i-1}$  innerhalb des Thaleskreises befindet, denn sie folgt direkt aus der Ungleichung

$$\|\hat{\rho}_{i-1} - \hat{\rho}_M\| < R.$$

Theorem 37 besagt nun, dass jeder separable Zustand innerhalb des Thaleskreises eines reinen Produktzustands liegt. Dies kann man nachvollziehen, denn die Thaleskreise schneiden die Verbindungslinien der reinen Produktzustände jeweils genau in der Mitte. Alle Thaleskreise zusammen decken damit den gesamten separablen Zustandsraum

ab. Die Zustände außerhalb der durch die Thaleskreise abgedeckten Fläche sind die mit Theorem 37 direkt nachweisbaren, verschränkten Zustände.

Interessant ist auch die geometrische Deutung des Faktors  $\text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \}$ . Deutet man diesen als Skalarprodukt zwischen den beiden Vektoren  $\hat{\rho}_{i-1}$  und  $\hat{\rho}_{\text{ps}_i}$ , so läßt sich ein Winkel  $\alpha$  zwischen den beiden Vektoren definieren

$$\cos \alpha = \frac{\text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \}}{\| \hat{\rho}_{i-1} \| \| \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \|}. \quad (4.20)$$

Wegen  $\| \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \| = 1$  ist  $\text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \}$  genau die Projektion des Vektors  $\hat{\rho}_{i-1}$  auf den Vektor  $\hat{\rho}_{\text{ps}_i}$ . Verschiebt man den Nullpunkt des Koordinatensystems in den maximal gemischten Zustand, so läßt sich in Abbildung 4.2 die Strecke  $s = \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{\text{ps}_i} \}$  und der Winkel  $\alpha$  identifizieren.

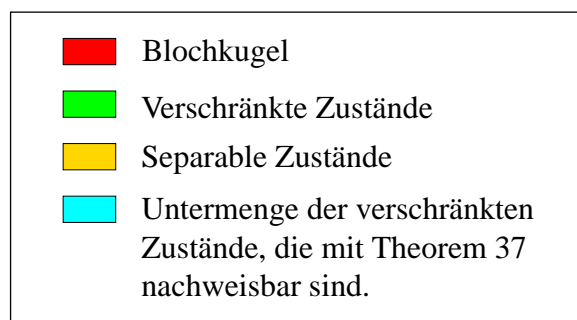
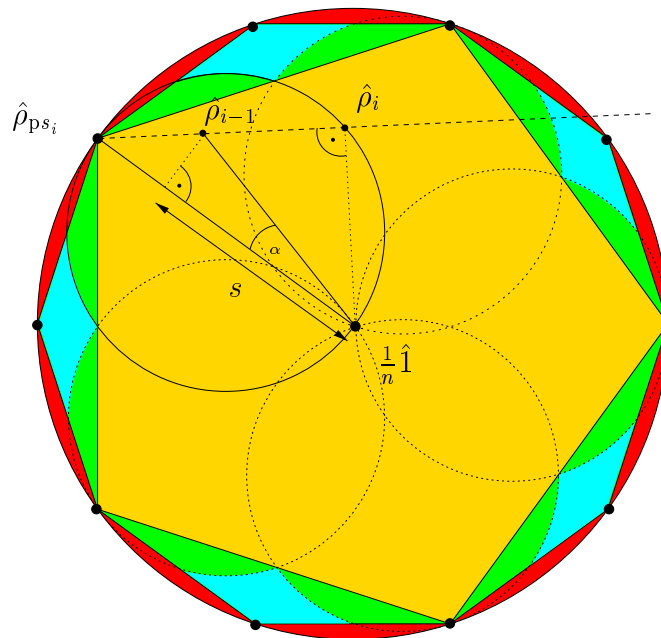


Abbildung 4.2: Bestimmung des zur Mitte  $\frac{1}{n}\hat{1}$  am nächsten liegenden Zustands  $\hat{\rho}_i$ . Vergleiche Abbildung 2.6.

## 4.5 Nächster reiner Produktzustand

Wie aus der bisherigen Beschreibung der Rekursiven Entmischung hervorgeht, ist es bei jedem Iterationsschritt  $i$  notwendig, den zur Dichtematrix  $\hat{\rho}_{i-1}$  abstandsmäßig nächsten reinen Produktzustand  $\hat{\rho}_{ps_i}$  zu finden. (Für die Suche nach dem nächsten *gemischten* Produktzustand  $\hat{\rho}_s$ , siehe [76].) Für diese zentrale Aufgabe, von deren Aufwand der Gesamtaufwand des Verfahren im wesentlichen abhängt, soll in diesem Abschnitt eine effektive Lösungsmethode angegeben werden. Um das Verfahren möglichst klar darzustellen, wird von einem  $n_1 \times n_2$  Quantensystem bestehend aus zwei Subsystemen ausgegangen. Eine Verallgemeinerung auf Systeme bestehend aus mehreren Untersystemen ist möglich.

Gesucht ist bei gegebenem  $\hat{\rho}$  derjenige Produktzustand  $\hat{\rho}_{ps} = \hat{\rho}_x \otimes \hat{\rho}_y$  für den gilt:

$$\|\hat{\rho} - \hat{\rho}_{ps}\| \stackrel{!}{=} \text{Minimum} \quad (4.21)$$

Nach Kapitel 2.1.5 läßt sich das Abstandsmaß als

$$\begin{aligned} \|\hat{\rho} - \hat{\rho}_{ps}\| &= \text{tr}\{(\hat{\rho} - \hat{\rho}_{ps})^2\} = \text{tr}\{\hat{\rho}^2\} + \text{tr}\{\hat{\rho}_{ps}^2\} - 2 \text{tr}\{\hat{\rho}\hat{\rho}_{ps}\} \\ &= 1 + \text{tr}\{\hat{\rho}^2\} - 2 \text{tr}\{\hat{\rho}\hat{\rho}_{ps}\} \end{aligned} \quad (4.22)$$

schreiben woraus die Forderung

$$\text{tr}\{\hat{\rho}\hat{\rho}_{ps}\} \stackrel{!}{=} \text{Maximum} \quad (4.23)$$

folgt. Da es sich bei den  $\hat{\rho}_{ps}$  um eine Untermenge aller reinen Zustände handelt, sind die Eigenvektoren von  $\hat{\rho}$  nicht mehr die Lösungen des Extremalproblems, wie es bei Lemma 2 noch der Fall war. Die "straight forward" Methode zur Lösung dieses Extremalproblems besteht darin, für  $\hat{\rho}_{ps}$  einen allgemein parametrisierten, reinen separablen Zustand anzusetzen und durch Variation dieser Parameter die Funktion  $\text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{\rho}_{ps}\}$  mittels üblicher numerischer Verfahren zu maximieren. Zur Parametrisierung eines reinen Zustands der Dimension  $n$  benötigt man  $2n - 2$  reelle Parameter (Normierung und irrelevante Gesamtphase ergeben die zwei Restriktionen). Zur Parametrisierung von  $\hat{\rho}_{ps}$  sind also  $\sum_{i=1}^N (2n_i - 2)$  Parameter nötig und dies entspricht auch der Dimension des Suchraums. Da der Aufwand einer allgemeinen Suche exponentiell mit der Dimension des Suchraums ansteigt und die Dimension des Suchraums bei dieser "straight forward" Methode sehr groß ist, handelt es sich hierbei um ein im Allgemeinen zu langsames und deshalb nicht durchführbares Verfahren.

Im folgenden soll die Suche nach dem Maximum von  $\text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{\rho}_{ps}\}$  auf die Lösung eines Gleichungssystems zurückgeführt werden. Dies führt zu einer Verkleinerung der Dimension des Suchraums und weiter zu einer iterativen Lösungsstrategie.

Definiert man  $\hat{\rho}_{ps} = |\phi\rangle\langle\phi|$  und  $|\phi\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle$ , so ergibt sich  $\text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{\rho}_{ps}\} = \langle\phi|\hat{\rho}|\phi\rangle$  in Komponentenschreibweise und bei Benutzung der Summenkonvention zu

$$\bar{x}_a \bar{y}_b \hat{\rho}_{ab,cd} x_c y_d \stackrel{!}{=} \text{Extremal} \quad (4.24)$$

und als Nebenbedingung benötigt man die Normierungen

$$1 - \bar{x}_a x_a = 0, \quad 1 - \bar{y}_b y_b = 0, \quad 1 - \bar{x}_a \bar{y}_b x_a y_b = 0. \quad (4.25)$$

Die LAGRANGE Hilfsfunktion ergibt sich damit zu

$$L(x_i, y_i, \bar{x}_i, \bar{y}_i, \lambda) := \bar{x}_a \bar{y}_b \hat{\rho}_{ab,cd} x_c y_d + \lambda(1 - \bar{x}_a \bar{y}_b x_a y_b). \quad (4.26)$$

Mit Hilfe der LAGRANGE Multiplikatorregel kann nun ein Gleichungssystem gefunden werden, dessen Lösungsmenge die Extrempunkte beinhaltet:  $\nabla L = 0$ .

Zwar sind die konjugiert komplexen Größen  $\bar{x}_i, \bar{y}_j$  nicht unabhängig von  $x_i, y_j$ , spaltet man diese aber in Real- und Imaginärteil auf  $x_i = a_i + ib_i$  so ergibt sich aus der Forderung

$$\frac{dL}{da_k} = \frac{\partial L}{\partial x_k} + \frac{\partial L}{\partial \bar{x}_k} = 0, \quad (4.27)$$

$$\frac{dL}{db_k} = i \frac{\partial L}{\partial x_k} - i \frac{\partial L}{\partial \bar{x}_k} = 0 \quad (4.28)$$

die äquivalente Forderung

$$\frac{\partial L}{\partial x_k} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \bar{x}_k} = 0. \quad (4.29)$$

Da  $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$  gilt sind diese beiden Gleichungen zueinander komplex konjugiert und man muss nur eine davon betrachten. Das Gleichungssystem  $\nabla L = 0$  lautet deshalb:

$$\frac{\partial L}{\partial x_k} = \bar{x}_a \bar{y}_b \hat{\rho}_{ab,kd} y_d - \lambda \bar{x}_k = 0, \quad (4.30)$$

$$\frac{\partial L}{\partial y_k} = \bar{x}_a \bar{y}_b \hat{\rho}_{ab,ck} x_c - \lambda \bar{y}_k = 0, \quad (4.31)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = 1 - \bar{x}_a \bar{y}_b x_a y_b = 0 \quad (4.32)$$

Definiert man sich die Operatoren

$$\hat{m}_1 := \hat{\rho}_{kb,cd} \bar{y}_b y_d |k\rangle \langle c|, \quad (4.33)$$

$$\hat{m}_2 := \hat{\rho}_{ak,cd} \bar{x}_a x_c |k\rangle \langle d|$$

mit den Eigenschaften  $\hat{m}_1 = \hat{m}_1^\dagger$  und  $\hat{m}_2 = \hat{m}_2^\dagger$ , so läßt sich das Gleichungssystem als ein System aus zwei gekoppelten Eigenwert-Gleichungen schreiben und die Lösungen sind die normierten Eigenvektoren:

$$\hat{m}_1 |x\rangle = \lambda |x\rangle, \quad (4.34)$$

$$\hat{m}_2 |y\rangle = \lambda |y\rangle$$

Multiplikation der ersten Eigenwertgleichung mit  $\langle x|$  führt unter Beachtung der Normierung zu

$$\lambda = \langle x | \hat{m}_1 | x \rangle = \bar{x}_k \bar{y}_b \hat{\rho}_{kb,cd} x_c y_d = \text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}_{ps} \}.$$

Einer Maximierung von  $\text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}_{\text{ps}} \}$  entspricht also die Maximierung des Eigenwerts  $\lambda$ .

$$\max_{\hat{\rho}_{\text{ps}}} (\text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}_{\text{ps}} \}) = \max_{|x\rangle} (\lambda_{\max} (\hat{m}_2(\hat{\rho}, |x\rangle)))$$

Gesucht ist somit derjenige Subsystem Zustand  $|x\rangle$ , für den der größte Eigenwert von  $\hat{m}_2$  maximal wird. Da bei der Maximierung das eine Subsystem nicht mehr betrachtet werden muss, ist die Dimension des Suchraums um  $2n_2 - 2$  reduziert. Für den einfachen Fall eines  $n \times n$  Quantennetzwerks ist dies eine Halbierung der Dimension. Hat man mit Hilfe der Maximierung  $|x\rangle$  bestimmt, so lässt sich  $|y\rangle$  und damit  $|\phi\rangle$  mittels der Eigenwertgleichung (4.34) berechnen.

Zur Suche nach dem nächsten Produktzustand ist also nur die Größe des kleineren Subsystems ausschlaggebend – der zu untersuchende Parameterraum ist beispielsweise für ein  $2 \times 2$  und ein  $2 \times 5$  System gleich groß: Dimension  $2 \min(n_1, n_2) - 2 = 2$ . Da eine unstrukturierte Suche in einem Parameterraum exponentiell mit steigender Dimension des Suchraums aufwendiger wird, ist dies für Quantensysteme bei denen beide Subsysteme größere Dimension haben trotz der Verkleinerung des Suchraums noch ein sehr zeitaufwendiges Verfahren. Deshalb wird im folgenden ein iteratives Verfahren basierend auf den bisher gewonnenen Erkenntnissen gezeigt, welches einer strukturierten Suche entspricht und damit sehr effizient ist. Die Schritte sind:

1. Wähle zufällig einen Zustand  $|x\rangle$ .
2. Berechne  $\hat{m}_2$  aus  $\hat{\rho}$  und  $|x\rangle$  und setze  $|y\rangle$  als den Eigenvektor von  $\hat{m}_2$  zum größten Eigenwert  $\lambda$ .
3. Berechne  $\hat{m}_1$  aus  $\hat{\rho}$  und  $|y\rangle$  und setze  $|x\rangle$  als den Eigenvektor von  $\hat{m}_1$  zum größten Eigenwert  $\lambda$ .
4. Falls der größte Eigenwert  $\lambda$  Konvergenz zeigt: Fertig. Ansonsten: Gehe wieder zu Schritt 2.

Das Verfahren beruht also auf der Erkenntnis, dass man ein Subsystem unter Festhalten des anderen Subsystems optimieren kann. Empirisch zeigt sich, dass dieses Verfahren schon nach nur wenigen Iterationen (ca. 10-20) volle Konvergenz erreicht, wie in Abbildung 4.3 graphisch dargestellt.

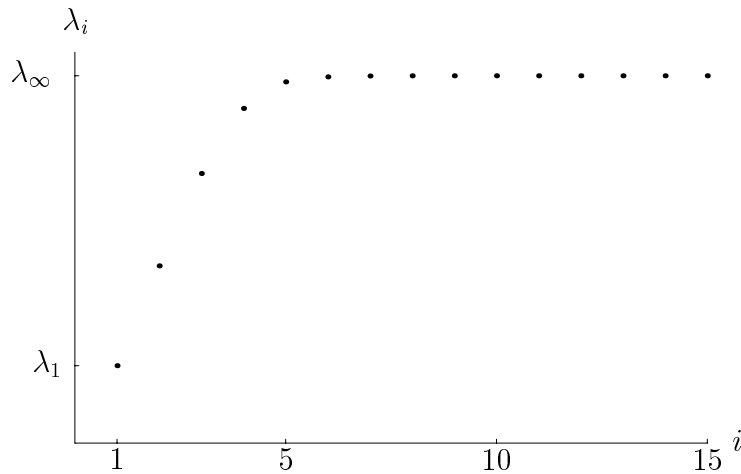


Abbildung 4.3: Typisches Konvergenzverhalten des größten Eigenwerts  $\lambda$  in Abhängigkeit der Zahl  $i$  der durchgeführten Iterationen. Als Beispiel wurde ein zufälliger gemischter Zustand eines  $4 \times 4$  Quantensystem gewählt.

## 4.6 Konvergenzverhalten

Um die Annäherung der Rekursion mit zunehmender Iteration  $i$  an den maximal gemischten Zustand zu verfolgen, ist es praktisch, dies in einem skalaren Maß  $d_i$  zum Ausdruck zu bringen. Die Entfernung der Dichtematrix  $\hat{\rho}_i$  von der Mitte der BLOCHKugel ist eine solche praktische Größe

$$d_i = \left\| \hat{\rho}_i - \frac{1}{n} \hat{1} \right\|. \quad (4.35)$$

Konvergenz und damit Nachweis der Separabilität bedeutet ausgedrückt in diesem skalaren Maß

$$\lim_{i \rightarrow \infty} d_i = 0. \quad (4.36)$$

In Abbildung 4.4 ist das typische Konvergenzverhalten der Rekursiven Entmischung eines zufällig ausgewählten, gemischten, separablen  $2 \times 2$  Quantensystems  $\hat{\rho}_0$  dargestellt. Nach anfänglicher zügigen Annäherung kommt ab einem Wert von ungefähr

$$d_i = \sqrt{\frac{1}{n-1} - \frac{1}{n}} = \frac{1}{2\sqrt{3}}$$

ein Bereich geringer Annäherungsgeschwindigkeit, der wiederum von einem Bereich schneller Annäherung mit anschließender vollständiger Konvergenz gefolgt wird. Die durchgezogene, vertikale Linie markiert dasjenige  $i$ , ab welchem der Zustand  $\hat{\rho}_0$  exakt als eine konvexe Linearkombination der  $\{\hat{\rho}_{\text{ps}_i}\}$  zusammen mit der Identität  $\hat{1}$  geschrieben werden kann. Bei diesem Wert von  $i$  hat das Verfahren der Rekursiven Entmischung also eine komplette, exakte Zerlegung des Zustands  $\hat{\rho}_0$  in reine Produktzustände berechnet. Damit ist natürlich auch gleichzeitig die Separabilität von  $\hat{\rho}_0$  nachgewiesen. Das beste

herkömmliche hinreichende, allgemeine Separabilitätskriterium, Gleichung (3.27), zeigt die Separabilität von  $\hat{\rho}_i$  erst im blau hinterlegten Bereich an. Wie man daraus erkennt, ist mit der Methode der Rekursiven Entmischung, im Gegensatz zu den bisher bekannten Kriterien, ein Nachweis von Separabilität auch von Zuständen möglich, die nicht in der Nähe des maximal gemischten Zustands ( $d_i \approx 0$ ) liegen.

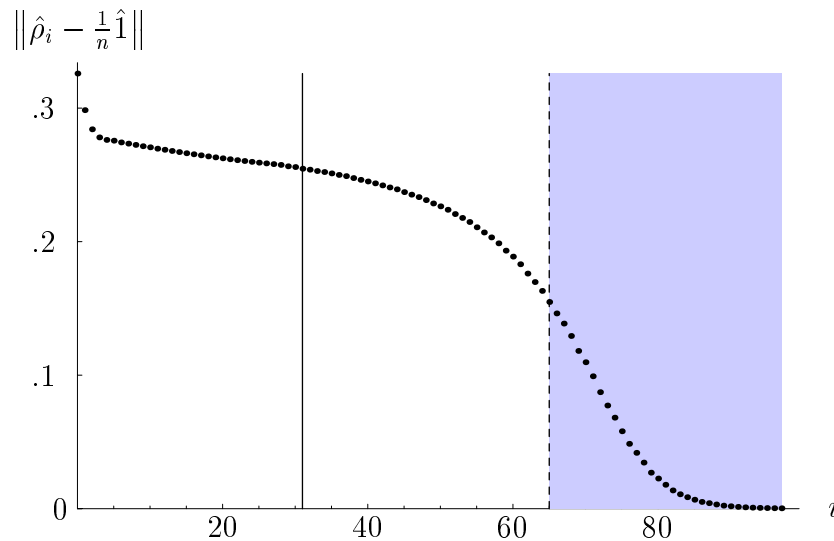


Abbildung 4.4: Typisches Konvergenzverhalten der Folge  $\{\|\hat{\rho}_i - \frac{1}{n}\hat{1}\|\}$  für einen zufällig gewählten, separablen Zustand  $\hat{\rho}_0$  eines  $2 \times 2$  Quantennetzwerks. Die durchgezogene vertikale Linie markiert das  $i$ , ab welchem  $\hat{\rho}_0$  als konvexe Linearkombination dargestellt werden kann. Der blau hinterlegte Bereich ist derjenige, in welchem herkömmliche hinreichende Separabilitätskriterien die Separabilität von  $\hat{\rho}_i$  garantieren.

## 4.7 Fixpunkte

Nach Theorem 35 ist ein Zustand  $\hat{\rho}$  separabel, wenn die Rekursionsfolge, Definition 34, gegen  $\frac{1}{n}\hat{1}$  konvergiert. In diesem Abschnitt soll der Frage nachgegangen werden, ob der maximal gemischte Zustand der einzig mögliche Grenzwert der Rekursiven Entmischung eines separablen Zustands  $\hat{\rho}_s$  ist.

Da die rekursive Folge  $\{d_i\} = \{\|\hat{\rho}_i - \frac{1}{n}\hat{1}\|\}$  monoton fallend und auf den Bereich

$$0 \leq d_i \leq \sqrt{1 - \frac{1}{n}} \quad (4.37)$$

beschränkte ist, muss sie auch gegen einen Grenzwert konvergieren. Die Grenzwerte einer rekursiven Folge sind deren Fixpunkte. Es stellt sich somit die Frage nach den Fixpunkten der rekursiven Folge.

**Korollar 38.**

$$\hat{\rho}_F \text{ Fixpunkt} \Leftrightarrow \forall \hat{\rho}_{ps} : \text{Tr} \{ \hat{\rho}_F \hat{\rho}_{ps} \} \leq \text{Tr} \{ \hat{\rho}_F^2 \}$$

*Beweis.* Folgt aus Theorem 36 durch Negation.  $\square$

Für einen Fixpunkt muss also gelten, dass er auf oder außerhalb aller möglichen "Thaleskreise" (Abbildung 4.2) gebildet durch alle reinen Produktzustände liegt. Wie man sieht ist dies eine extreme Bedingung an einen Zustand. Nur ganz spezielle Dichtematrizen kommen damit in eine nähere Auswahl.

Für verschränkte Zustände bewegt sich die Rekursionsfolge immer im Raum der nicht-separablen Zustände. Im Folgenden werden deshalb nur Fixpunkte innerhalb des separablen Zustandsraums untersucht.

**Lemma 39.** Für jede separable Dichtematrix  $\hat{\rho}_s$  gilt:

$$\hat{\rho}_s \text{ Fixpunkt} \Leftrightarrow \forall \text{ Zerlegungen } \hat{\rho}_s = \sum_i p_i \hat{\rho}_{ps_i}, \forall i : \text{Tr} \{ \hat{\rho}_s \hat{\rho}_{ps_i} \} = \text{Tr} \{ \hat{\rho}_s^2 \}$$

*Beweis.* Für eine gegebene Zerlegung wird geprüft, ob ein  $\hat{\rho}_{ps_i}$  der Zerlegung die Relation  $\text{Tr} \{ \hat{\rho}_s \hat{\rho}_{ps_i} \} - \text{Tr} \{ \hat{\rho}_s^2 \} > 0$  erfüllt. Sei  $\text{Tr} \{ \hat{\rho}_s \hat{\rho}_{ps_i} \} - \text{Tr} \{ \hat{\rho}_s^2 \} = c_i$ . Multiplikation mit  $p_i$  und Summation über alle  $i$  ergibt wegen  $\sum_i p_i = 1$ :

$$0 = \sum_i p_i c_i$$

Da  $p_i > 0$  gilt muss zum Erfüllen dieser Gleichung mindestens ein  $c_i > 0$  sein, oder alle  $c_i = 0$ . Daraus folgt mit Korollar 38, dass, falls nicht alle  $c_i = \text{Tr} \{ \hat{\rho}_s \hat{\rho}_{ps_i} \} - \text{Tr} \{ \hat{\rho}_s^2 \} = 0$  sind,  $\hat{\rho}_s$  kein Fixpunkt ist.  $\square$

Dieses Lemma sagt aus, dass jeder Fixpunkt  $\hat{\rho}_F$  ein Schnittpunkt aller möglichen "Thaleskreise" aus dem Wertebereich  $R(\hat{\rho}_F)$  sein muss.

**Theorem 40.** Der einzige separable Fixpunkt der Rekursiven Entmischung, der nicht auf dem Rand des separablen Zustandsraums liegt, ist der maximal gemischte Zustand  $\frac{1}{n} \hat{1}$ .

*Beweis.* Die "Thaleskreise" aller reinen Produktzustände schneiden sich, außer auf dem Rand des separablen Zustandsraums, in genau einem Punkt, dem Mittelpunkt der BLOCH-Kugel.  $\square$

Auf dem Rand des separablen Zustandsraums können noch weitere separable Fixpunkte liegen. Das folgende Lemma liefert einige besondere Fixpunkte auf dem separablen Zustandsraum:

**Lemma 41.** Diejenigen Zustände, deren nicht verschwindende Eigenwerte  $\lambda_i$  alle identisch  $\lambda_i = \lambda = \frac{1}{r(\hat{\rho}_F)}$  sind, gehören zu den Fixpunkte  $\hat{\rho}_F$  der Rekursiven Entmischung.

*Beweis.* Sei  $\hat{\rho}_F = \sum_{i=1}^m p_i \hat{\rho}_{ps_i}$  eine Zerlegung der separablen Dichtematrix  $\hat{\rho}_F$  mit Rang  $r(\hat{\rho}_F)$ . Sei  $V$  das Eigensystem von  $\hat{\rho}_F$ . Definiert man sich die  $m$  reellen Vektoren  $|b_i\rangle$

$$|b_i\rangle := \sum_{k=1}^{r(\hat{\rho}_s)} |k\rangle \langle k| V \hat{\rho}_{ps_i} V^{-1} |k\rangle := \sum_{k=1}^{r(\hat{\rho}_s)} b_{ik} |k\rangle, \quad (4.38)$$

so läßt sich die Gleichung  $\text{Tr}\{\hat{\rho}_F \hat{\rho}_{ps_i}\} = \text{Tr}\{\hat{\rho}_F^2\}$  in der Eigenbasis von  $\hat{\rho}_F$  als

$$\sum_{k=1}^{r(\hat{\rho}_s)} \lambda_k b_{ik} = \sum_{k=1}^{r(\hat{\rho}_s)} \lambda_k^2 \quad (4.39)$$

mit den Eigenwerten  $\lambda_k$  von  $\hat{\rho}_F$  schreiben. Quadratische Erweiterung führt auf

$$\sum_k (\lambda_k - \frac{1}{2} b_{ik})^2 = \frac{1}{4} \sum_k b_{ik}^2, \quad (4.40)$$

was in vektorieller Notation zu einem Satz von  $m$  Kugelgleichungen

$$\left| \vec{\lambda} - \frac{1}{2} \vec{b}_i \right|^2 = \left| \frac{1}{2} \vec{b}_i \right|^2 \quad (4.41)$$

mit Mittelpunkten  $\frac{1}{2} \vec{b}_i$  und Radien  $\frac{1}{2} |\vec{b}_i|$  führt. Nach Theorem 30 benötigt man mindestens  $m \geq r(\hat{\rho}_F)$  verschiedene reine Produktzustände  $\hat{\rho}_{ps_i}$  für die Zerlegung von  $\hat{\rho}_F$  wobei  $r(\hat{\rho}_F)$  dieser  $\hat{\rho}_{ps_i}$  linear unabhängig sind, da sie den Wertebereich  $R(\hat{\rho}_F)$  aufspannen. Dies bedeutet aber nicht, dass man damit auch  $r(\hat{\rho}_F)$  verschiedene Vektoren  $\vec{b}_i$  erhält. (Für ein Beispiel, bei dem dies nicht der Fall ist, siehe die Zerlegung Formel (4.77)). Für die Vektoren  $\vec{b}_i$  gilt wegen  $\text{Tr}\{\hat{\rho}_{ps_i}\} = 1$  die Bedingung  $\sum_{k=1}^{r(\hat{\rho})} b_{ik} = 1$  und damit liegen sie in der Hyperebene senkrecht zu  $\vec{n} = (1, 1, \dots, 1)$  mit dem Abstand  $1/r(\hat{\rho})$  vom Nullpunkt. Falls man  $r(\hat{\rho}_F)$  Kugeln mit dieser Anordnung hat, schneiden sie sich in genau 2 Punkten. Einer dieser Schnittpunkte ist die Trivillösung  $\vec{\lambda} = 0$  der jedoch wegen  $\text{Tr}\{\hat{\rho}_F\} = \sum_k \lambda_k = 1$  keine gültige Dichtematrix entspricht. Der andere Schnittpunkt ist durch  $\lambda_k = \frac{1}{r(\hat{\rho}_s)}$  gegeben, denn diese erfüllen mit  $\lambda_k = \sum_{k=1}^{r(\hat{\rho}_s)} \lambda_k^2$  immer Gleichung (4.39), unabhängig von den Koeffizienten  $b_{ik}$ .  $\square$

Im einfachsten interessanten Fall, dem  $2 \times 2$  System, ergeben sich mit diesem Lemma die folgenden Fixpunkte

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{F_1} = \hat{U} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \hat{U}^{-1}, \quad \hat{\rho}_{F_2} = \hat{U} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \hat{U}^{-1}, \\ \hat{\rho}_{F_3} = \hat{U} \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \hat{U}^{-1}, \quad \hat{\rho}_{F_4} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.42)$$

wobei  $\hat{U}$  eine unitäre Transformation ist. Das Abstandsmaß  $d_i = \|\hat{\rho}_i - \frac{1}{n}\hat{1}\|$  zum Mittelpunkt ist für die Fixpunkte unabhängig von der Rotation  $\hat{U}$

$$d_{F_1} = \frac{\sqrt{3}}{2}, \quad d_{F_2} = \frac{1}{2},$$

$$d_{F_3} = \frac{1}{2\sqrt{3}}, \quad d_{F_4} = 0.$$

Der Fixpunkt  $\hat{\rho}_{F_3}$  ist nach Gleichung (3.24) immer ein separabler Zustand, wohingegen  $\hat{\rho}_{F_1}$  und  $\hat{\rho}_{F_2}$  nur dann separabel sind, falls  $\hat{U}$  ein dyadisches Produkt zweier lokaler unitärer Transformationen ist. Wie in Abschnitt 4.10.2 gezeigt wird, existieren noch weitere Fixpunkte auf dem separablen Zustandsrand. Die separablen Fixpunkte, die auf dem Rand des separablen Zustandsraums liegen, können, wie in Kapitel 4.4.2 angesprochen, im geometrischen Bild, Abbildung 4.1, als die von allen ihnen am nächsten liegenden reinen Produktzuständen gleich weit entfernten Zustände gedeutet werden.

### Stabilität der Fixpunkte

Zur Untersuchung der Stabilität der Fixpunkte kann man den Fixpunktsatz benutzen. Hierzu betrachtet man die Größe

$$\lambda = \frac{d_{i+1} - d_F}{d_i - d_F}. \quad (4.43)$$

Da es sich bei den  $d_i$  um eine monoton fallende Folge handelt, gilt immer  $d_{i+1} \geq d_i$ . Nähert man sich dem Fixpunkt von "oben",  $d_i = d_F + \varepsilon$ ,  $d_{i+1} = d_F + \kappa$  mit  $\kappa < \varepsilon$  und  $\kappa, \varepsilon > 0$ , so ist  $|\lambda| = \frac{\kappa}{\varepsilon} < 1$  und es handelt sich um einen anziehenden Fixpunkt. Ist man "unterhalb" des Fixpunkts,  $d_i = d_F - \kappa$ ,  $d_{i+1} = d_F - \varepsilon$  mit  $\kappa < \varepsilon$  und  $\kappa, \varepsilon > 0$ , so ist  $|\lambda| = \frac{\varepsilon}{\kappa} < 1$  und man hat einen abstoßenden Fixpunkt vorliegen. Bei dem Verfahren der Rekursiven Entmischung kann es also auch passieren, dass man in einen Fixpunkt ungleich dem maximal gemischten Zustand hineinfließt. Dies passiert insbesondere bei rangreduzierten Dichtematrizen, also bei den speziellen Zuständen, die auf dem Rand des Zustandsraums liegt. Dieses Problem läßt sich lösen, in dem bei Auftreten eines solchen Falles die Dichtematrix  $\hat{\rho}_i$  vom Fixpunkt um eine kleine Distanz  $\varepsilon$  näher an den maximal gemischten Zustand gebracht wird

$$\hat{\rho}'_i = (1 - \varepsilon)\hat{\rho}_i + \varepsilon \frac{1}{n}\hat{1}.$$

Diese kleine  $\varepsilon$  Störung bewirkt, dass der rangreduzierte Fixpunkt abstoßend wird und das Verfahren weiter gegen den maximal gemischten Zustand konvergiert. Ein reiner Produktzustand ist, da er an der maximalen oberen Grenze von  $d_i = \sqrt{1 - \frac{1}{n}}$  liegt, immer ein abstoßender Fixpunkt. Der Zustand  $\frac{1}{n}\hat{1}$  ist jedoch, da er an der unteren Schranke von  $d_i = 0$  liegt, immer anziehend.

### Untersuchung der Umgebung eines Fixpunkts

Im folgenden soll die Umgebung des Zustands

$$\hat{\rho}_{F_3} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.44)$$

als ein Beispiel für einen Fixpunkt näher untersucht werden. (Für die Untersuchung eines weiteren Fixpunkts, siehe Abschnitt 4.10.2.) Die Abbildung 2.8 zeigt den Zustand im Raum der Diagonaldichtematrizen. Zur Bestimmung aller von  $\hat{\rho}_{F_3}$  subtrahierbaren reinen Produktzustände, d.h. aller Produktzustände im Wertebereich  $R_s(\hat{\rho}_{F_3})$ , wird das Extremalkriterium für die Subtrahierbarkeit, Theorem 26 zusammen mit der in Kapitel 4.5 vorgestellten Methode zum Auffinden der zu  $\hat{\rho}_{F_3}$  abstandsmäßig am nächsten liegenden  $\hat{\rho}_{ps}$  angewandt. Das Extremalkriterium besagt, dass genau die Zustände  $\hat{\rho}_{ps}$  von  $\hat{\rho}_{F_3}$  subtrahierbar sind, die

$$\text{Tr} \{ \hat{\rho}_{F_3} \hat{\rho}_{F_3}^{-1} \hat{\rho}_{ps} \} = 1 = \max \quad (4.45)$$

erfüllen. Die Pseudoinverse  $\hat{\rho}_{F_3}^{-1}$  ist in diesem Fall mit Definition 13 sehr leicht auszurechnen, woraus sich  $\hat{\rho}_{F_3} \hat{\rho}_{F_3}^{-1} = 3 \hat{\rho}_{F_3}$  ergibt. Damit läßt sich das Extremalkriterium umformen zu

$$\text{Tr} \{ \hat{\rho}_{F_3} \hat{\rho}_{ps} \} = \frac{1}{3} = \max \quad (4.46)$$

und man erkennt, dass dies wegen  $\text{Tr} \{ \hat{\rho}_{F_3}^2 \} = \frac{1}{3}$  genau der Anforderung

$$\| \hat{\rho}_{F_3} - \hat{\rho}_{ps} \| = \min \quad (4.47)$$

entspricht. Die Frage nach den reinen Produktzuständen im Wertebereich  $R_s(\hat{\rho}_{F_3})$  ist also äquivalent zur Frage nach den zu  $\hat{\rho}_{F_3}$  am nächsten liegenden reinen Produktzuständen. Damit haben alle überhaupt von  $\hat{\rho}_{F_3}$  subtrahierbaren reinen Produktzustände den gleichen, minimalen Abstand zu  $\hat{\rho}_{F_3}$ . Jeder Fixpunkt erfüllt diese besondere Eigenschaft.

Schritt eins der Methode zum Auffinden des nächstgelegenen  $\hat{\rho}_{ps}$  ist die Wahl eines lokalen Zustands  $|x\rangle$  für das erste Subsystem. Da hier nicht nur ein einziger nächster reiner Produktzustand gefunden werden soll, sondern alle überhaupt möglichen, setzt man  $|x\rangle$  als den allgemeinst möglichen Zustand

$$|x\rangle = \cos \varphi |1\rangle + \sin \varphi e^{i\psi} |2\rangle \quad (4.48)$$

an. Für die Matrix  $m_2$ , Gleichung (4.33), erhält man mit  $\hat{\rho} = \hat{\rho}_{F_3} \hat{\rho}_{F_3}^{-1}$

$$m_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cos \varphi \end{pmatrix}. \quad (4.49)$$

Diese Matrix hat die Eigenwerten  $\{1, \cos \varphi\}$  und zugehörige Eigenvektoren  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ . Damit ist immer, unabhängig von  $|x\rangle$ , mindestens ein Eigenwert identisch 1 (d.h. maximal) und  $|y\rangle$  ist zu  $|y\rangle = |1\rangle$  festgelegt. Wählt man  $|x\rangle = |1\rangle$  erhält man wegen  $\cos \varphi = 1$  ein entartetes Eigenwertspektrum und das zweite Qubit, Zustand  $|y\rangle$ , ist nun frei wählbar. Damit erhält man die Menge aller zu  $\hat{\rho}_{F_3}$  nächsten reinen Produktzustände  $\{|\phi\rangle\} = \{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle\}$  zu

$$|\phi_1\rangle = |1\rangle \otimes |y\rangle = \cos \varphi |1, 1\rangle + \sin \varphi e^{i\psi} |1, 2\rangle = \cos \varphi |1\rangle + \sin \varphi e^{i\psi} |2\rangle, \quad (4.50)$$

$$|\phi_2\rangle = |x\rangle \otimes |1\rangle = \cos \varphi |1, 1\rangle + \sin \varphi e^{i\psi} |2, 1\rangle = \cos \varphi |1\rangle + \sin \varphi e^{i\psi} |3\rangle. \quad (4.51)$$

Im tetraedrischen Raum der Diagonalzustände sind von dieser Menge nur die Eckpunkte  $|1\rangle, |2\rangle$  und  $|3\rangle$  sichtbar. Bei der Menge  $\{|\phi\}_1$  handelt es sich um eine "Kugelschale", die den Mittelpunkt  $\frac{1}{2}(|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|)$  und die Eckpunkte  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$  hat, aber ansonsten außerhalb des Diagonalzustandsraums verläuft. Bei  $\{|\phi\}_2$  ist der Mittelpunkt  $\frac{1}{2}(|1\rangle\langle 1| + |3\rangle\langle 3|)$  und die Kugel geht durch die Punkte  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$  und verläuft ansonsten ebenfalls in einer anderen Dimension.

Wie man in Abbildung 2.8 gut erkennen kann, muss für den Zustand  $\hat{\rho}_{F_3}$  aus Gründen der Symmetrie noch eine dritte "Kugel" von nächsten reinen Zuständen existieren, nämlich die Kugel mit Mittelpunkt  $\frac{1}{2}(|2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3|)$  und Eckpunkten  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$ . Die entsprechenden Zustände sind

$$|\phi_3\rangle = \cos \varphi |1, 2\rangle + \sin \varphi e^{i\psi} |2, 1\rangle = \cos \varphi |2\rangle + \sin \varphi e^{i\psi} |3\rangle. \quad (4.52)$$

Im Unterschied zu  $|\phi_1\rangle$  und  $|\phi_2\rangle$  sind die Zustände  $|\phi_3\rangle$  jedoch nicht separabel! Wie man hier erkennt, wird durch die Einführung des separablen Unterraums die ansonsten perfekte Symmetrie des Diagonalzustandsraums gebrochen. Die Festlegung der Partitionierung des Gesamtsystems auf zwei Qubits und der damit verbundene Übergang der Indizierung

$$|1\rangle \rightarrow |1, 1\rangle, \quad |2\rangle \rightarrow |1, 2\rangle, \quad |3\rangle \rightarrow |2, 1\rangle, \quad |4\rangle \rightarrow |2, 2\rangle, \quad (4.53)$$

führt nicht zu einer Auszeichnung von *einzelnen* Basiszuständen, fasst man jedoch immer zwei Basiszustände zusammen, so wird eine Unterscheidung möglich und die Symmetrie ist gebrochen. Ohne Unterteilung in Qubits sind die Zustände  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$  und  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |3\rangle)$  äquivalent - führt man Qubits ein, so sind  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 1\rangle + |1, 2\rangle)$  und  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 2\rangle + |2, 1\rangle)$  jedoch aufgrund ihrer Separabilität bzw. Verschränkung nicht mehr zueinander äquivalent.

Der Zustand  $\hat{\rho}_{F_3}$  läßt sich zwar durch eine gleichverteilte Mischung all seiner zu ihm

nächstgelegenen reinen Zustände zerlegen

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_{F_3} &= \frac{1}{3} \frac{1}{4\pi^2} \int_{|\phi\rangle \in \{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle\}} (d|\phi\rangle) |\phi\rangle \langle\phi| & (4.54) \\
&= \frac{1}{3} \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2\pi} d\psi \begin{pmatrix} 2 \cos^2 \varphi & \cos \varphi \sin \varphi e^{-i\psi} & \cos \varphi \sin \varphi e^{-i\psi} & 0 \\ \cos \varphi \sin \varphi e^{i\psi} & 1 & \cos \varphi \sin \varphi e^{-i\psi} & 0 \\ \cos \varphi \sin \varphi e^{i\psi} & \cos \varphi \sin \varphi e^{i\psi} & 2 \sin^2 \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & (4.55)
\end{aligned}$$

jedoch ist dies keine Zerlegung in separable Zustände, da die  $|\phi_3\rangle$  verschränkt sind. Nur die triviale Zerlegung in die Eckpunkte

$$\hat{\rho}_{F_3} = \frac{1}{3} (|1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2| + |3\rangle \langle 3|) \quad (4.56)$$

ist eine Zerlegung in gleich gewichtete, reine Produktzustände.

## 4.8 Reduktion der Zerlegung

Das Verfahren der Rekursiven Entmischung liefert bei Konvergenz gegen den maximal gemischten Zustand eine Zerlegung der separablen Dichtematrix  $\hat{\rho}_s$  in  $m$  reine Produktzustände  $\hat{\rho}_{ps}$ , wobei  $m$  die Anzahl der durchgeführten Iterationen ist. Diese Zahl  $m$  kann, insbesondere für Zustände nahe der Grenze zwischen Separabilität und Verschränkung, groß werden. Wie in Kapitel 2.2.4 gezeigt worden ist, existiert für jede separablen Dichtematrix eine Zerlegung in maximal  $n^2$  reine Produktzustände. In diesem Abschnitt wird ein Verfahren dargestellt, wie man aus denen bei der Rekursiven Entmischung erhaltenen  $m > n^2$  reinen Produktzustände eine neue Zerlegung in maximal  $n^2$  Stück erhält. Neben dieser Reduktion der benötigten Zerlegungsmatrizen hat die hier vorgestellte Methode den weiteren Vorteil, eine *exakte* Zerlegung der Dichtematrix  $\hat{\rho}_s$  in reine Produktzustände zu liefern. Das Restglied der ursprünglichen Rekursiven Entmischung wird hier nicht mehr benötigt.

Die Abbildung 2.7 zeigt anschaulich das zu lösende Problem. Nummeriert man alle Eckpunkte  $X_i$ , beginnend bei einem beliebigen Eckpunkt  $X_1$ , der Reihe nach durch, so liefert der folgende Algorithmus eine Lösung des Problems

1. Sei  $k = 1$ . Sei  $X' = X = \{X_i\}$  die Menge aller Eckpunkte.
2. Entferne das Element  $X_k$  aus der Menge  $X'$ .

3. Ist der einzuschließende Punkt nicht in der konvexen Hülle gebildet durch die  $X'$ , dann füge  $X_k$  wieder zur Menge  $X'$  hinzu.
4.  $k = k + 1$ ; falls  $k > m$  fertig, ansonsten gehe zu Schritt 2.

Die übrigbleibende Menge  $X'$  bildet die gesuchte minimale konvexe Hülle in welcher der einzuschließende Punkt liegt. Dieser Algorithmus kann geometrisch in der Grafik 2.7 als "Wegstreichen von Dreiecken" interpretiert werden. Wie man leicht erkennt, funktioniert der Algorithmus nur bei einer diskreten Menge von Eckpunkten. Genau eine solch diskrete Menge wird aber von der Rekursiven Entmischung geliefert. Angewandt auf den hier vorliegenden Fall erhält man also als Ergebnis eine Zerlegung der Dichtematrix  $\hat{\rho}_s$  in maximal  $n^2$  reine Produktzustände die aus der Menge der  $\{\hat{\rho}_{ps_i}\}$  stammen. Die zugehörigen Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  müssen mit Hilfe der linearen Algebra neu berechnet werden.

Das Hauptproblem bei dem Algorithmus ist es, festzustellen, ob ein Punkt innerhalb oder außerhalb der konvexen Hülle liegt. Um dieser Frage nachzugehen, wird von der komplexwertigen Beschreibung auf der Dichtematrixebene zur reellwertigen Darstellung im BLOCHvektorbild gewechselt

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_0 &\rightarrow \vec{\lambda}_0, \\ \hat{\rho}_{ps_i} &\rightarrow \vec{\lambda}_{ps_i}.\end{aligned}\tag{4.57}$$

Die BLOCHvektoren sind Vektoren im  $n^2 - 1$  dimensionalem Raum. Gesucht ist nun eine Lösung des Gleichungssystems

$$\vec{\lambda}_0 = \sum_{i=1}^m p_i \vec{\lambda}_{ps_i}\tag{4.58}$$

mit Nebenbedingungen  $0 \leq p_i \leq 1$  und  $\sum_i p_i = 1$  und der Forderung nach einer maximalen Zahl von  $p_i = 0$ . Das Gleichungssystem (4.58) ist wegen  $m > n^2 - 1$  unterbestimmt. Löst man das System nach  $n^2 - 1$  Variablen  $p_1, \dots, p_{n^2-1}$  auf und reduziert die Anzahl unbestimmter Variablen mit  $p_{n^2} = (\sum_{i \neq n^2} p_i) - 1$  um eine weitere, so erhält man  $m - n^2$  Ungleichungen der Form

$$0 \leq p_k \leq 1, \quad \text{für } n^2 < k < m,\tag{4.59}$$

und  $n^2$  Ungleichungen der Form

$$0 \leq p_i(p_{n^2+1}, \dots, p_m) \leq 1, \quad \text{für } 1 \leq i \leq n^2.\tag{4.60}$$

Ein solches System von insgesamt  $m$  Ungleichungen kann mit bekannten numerischen Verfahren gelöst werden. In seiner allgemeinsten Form von beliebigen Ungleichungen benützt man den "Cylindrical Algebraic Decomposition" Algorithmus [77]. Für den hier vorliegenden Fall von linearen Ungleichungen kann man jedoch einen effektiveren Algorithmus einsetzen, der auf dem "Simplex Linear Optimization" Verfahren der Linearen Programmierung basiert<sup>1</sup>. Als Ergebnis bekommt man direkt, ohne zusätzliche Schritte, eine Lösung mit höchstens  $n^2$  von Null verschiedenen  $p_i$ .

<sup>1</sup>Für eine Implementierung, siehe z.B. das Computeralgebrasystem *Mathematica*, (Wolfram Research), und seine Funktion "InequalityInstance".

## 4.9 Verfahrens-Grenzen

Die Rekursive Entmischung beweist für einen Zustand  $\hat{\rho}$  bei Konvergenz eindeutig dessen Separabilität. Damit ist die Rekursive Entmischung ein hinreichendes Kriterium für Separabilität. Anders herum ist Nicht-Konvergenz ein notwendiges Kriterium für Verschränkung. Es stellt sich nun natürlich die Frage, ob jeder separable Zustand (außer den Fixpunkten) zu Konvergenz führt, d.h. ob es nicht nur ein hinreichendes, sondern auch ein notwendiges Kriterium für Separabilität darstellt. Ein solches sowohl notwendiges als auch hinreichendes Kriterium wäre eine allgemein anwendbare Lösung des Separabilitätsproblems.

Theorem 36 und 37 geben einen gewissen Einblick in diese Problematik. Zwar ist eine Annäherung mittels Subtraktion an den maximal gemischten Zustand immer möglich, jedoch muss der Zustand, der durch das optimale  $p_i$  (Theorem 36) entsteht nicht zwingend innerhalb des Raums der separablen Zustände liegen. Würde man von einer separablen Dichtematrix starten und dann durch ein zu großes  $p_i$  den separablen Zustandsraum verlassen, so würde ein verschränkter Zustand  $\hat{\rho}_i$  in der Folge auftreten und es könnte keine Konvergenz mehr gegen den maximal gemischten Zustand erreicht werden. Ob und wann ein solcher Fall auftreten kann, hängt von der Verteilung der reinen Produkt-Dichtematrizen in der Menge aller reinen Zustände ab. Die Grafik 4.5 zeigt geometrisch einen solchen Fall. Für alle separablen Zustände im blauen Bereich führt die maximale Annäherung an die Mitte zu einem Verlassen des separablen Zustandsraums, da der Thaleskreis die Grenze zwischen verschränkten und separablen Zustände mehr als zweimal schneidet. Wie man leicht erkennt, kann dieses Problem nur bei Zuständen auftreten, die nahe an der Grenze zur Verschränkung liegen. Alle anderen Zustände sind davon nicht betroffen.

Als reales Beispiel für einen solchen problematischen Zustand kann für ein  $2 \times 2$  System der Zustand

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} 0.361643 & 0.101254 - 0.0927374 i & -0.0414794 + 0.0958088 i & -0.0430116 + 0.0454575 i \\ 0.101254 + 0.0927374 i & 0.35576 & 0.0741374 + 0.092011 i & -0.075766 + 0.0468255 i \\ -0.0414794 - 0.0958088 i & 0.0741374 - 0.092011 i & 0.172729 & -0.00900376 + 0.0281657 i \\ -0.0430116 - 0.0454575 i & -0.075766 - 0.0468255 i & -0.00900376 - 0.0281657 i & 0.109868 \end{pmatrix}$$

dienen. Sucht man mit dem in Kapitel 4.5 beschriebenen Verfahren den zu  $\hat{\rho}$  abstandsmäßig nächsten reinen Produktzustand  $\hat{\rho}_{ps}$ ,

$$\hat{\rho}_{ps} = \begin{pmatrix} 0.510092 & 0.424967 - 0.156613 i & -0.0438797 + 0.152022 i & 0.0101182 + 0.140125 i \\ 0.424967 + 0.156613 i & 0.402133 & -0.0832322 + 0.11318 i & -0.0345927 + 0.119847 i \\ -0.0438797 - 0.152022 i & -0.0832322 - 0.11318 i & 0.0490814 & 0.0408907 - 0.0150695 i \\ 0.0101182 - 0.140125 i & -0.0345927 - 0.119847 i & 0.0408907 + 0.0150695 i & 0.0386936 \end{pmatrix}$$

so erhält man für die Subtraktion

$$\hat{\rho}' = \frac{1}{1-p} (\hat{\rho} - p \hat{\rho}_{ps})$$

zur maximal mögliche Annäherung von  $\hat{\rho}'$  an den total gemischten Zustand den Subtraktionsfaktor

$$p = \frac{\text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}_{ps} \} - \text{Tr} \{ \hat{\rho}^2 \}}{1 - \text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}_{ps} \}} = 0.233 . \quad (4.61)$$

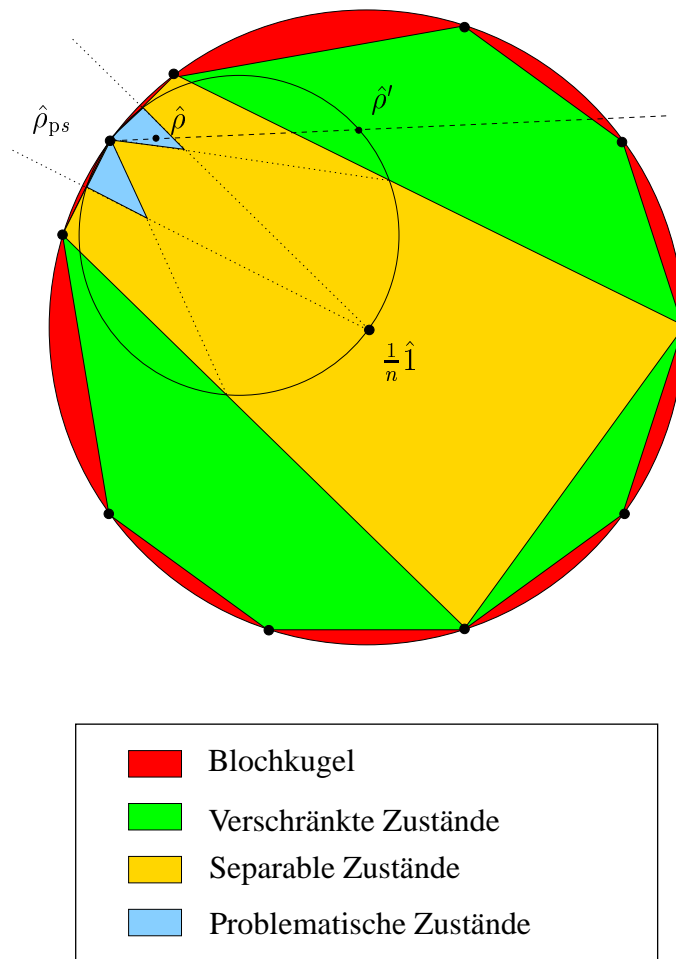


Abbildung 4.5: Konstruktion eines speziellen Zustandsraums, bei dem von einer kleinen Menge separabler Zustände die maximale Annäherung an den total gemischten Zustand zu einem Verlassen des separablen Unterraums führt.

Der für diese Subtraktion maximal möglichen Faktor, ohne den Gesamtzustandsraum zu verlassen, ist

$$p_{\max} = \frac{1}{\text{Tr}\{\hat{\rho}_p \hat{\rho}^{-1}\}} = 0.412. \quad (4.62)$$

Bei einer Subtraktion mit Faktor  $p$  verläßt man den separablen Zustandsraum, da nach dem PPT Kriterium der kleinste Eigenwert der partiell transponierten Dichtematrix

$$\lambda_{\min}(\hat{\rho}^{T_2}) = -0.0021 \quad (4.63)$$

und damit negativ ist. Der Grund, warum gerade für diesen Zustand  $\hat{\rho}$  dieses Problem auftritt, hängt mit der Nähe von  $\hat{\rho}$  zum separablen Zustandsrand zusammen. Die Dichtematrix  $\hat{\rho}$  besitzt den Abstand  $d = \|\hat{\rho} - \frac{1}{4}\hat{1}\| = 0.40266$  vom maximal gemischten Zustand. Berechnet man den Zustand  $\hat{\rho}'' = \frac{1}{1-p}(\hat{\rho} - p\frac{1}{4}\hat{1})$  mit  $p$  so, dass er auf den separablen

Zustandsrand liegt, so ergibt sich als Abschätzung des Abstand von  $\hat{\rho}$  zum separablen Zustandsrand

$$d_s \leq \|\hat{\rho} - \hat{\rho}''\| = 0.00063 . \quad (4.64)$$

Der Zustand  $\hat{\rho}$  liegt also näher als 99.8 % an der Grenze zwischen separablen und verschränkten Zuständen. Für Zustände, die nicht nahe am Rand aller Zustände liegen, konnte ein solches Problem nicht beobachtet werden.

Um eine Wahrscheinlichkeit angeben zu können, mit der ein solches Problem auftritt, muss man sich erst auf eine bestimmte Zustandsverteilung einigen. Es liegt nahe, die in Kapitel 1.4 eingeführte Gleichverteilung auf dem Zustandsraum der gemischten Dichteoperatoren zu betrachten. Damit hängt die Wahrscheinlichkeit für ein solches Problem nur noch von der Größe  $m$  des ausgespurten Systems ab. Wie gezeigt wurde, nimmt mit zunehmender Größe  $m$  des Hilffsystems die Wahrscheinlichkeit zu, einen Zustand nahe des maximal gemischten Zustands zu bekommen. Je größer  $m$  ist, desto unwahrscheinlicher wird also das Auftreten dieses Problems. Die Wahrscheinlichkeit, zufällig einen solchen Problemzustand zu erzeugen, ist in Abbildung 4.6 durch statistische Auswertung für ein  $2 \times 2$  System berechnet worden.

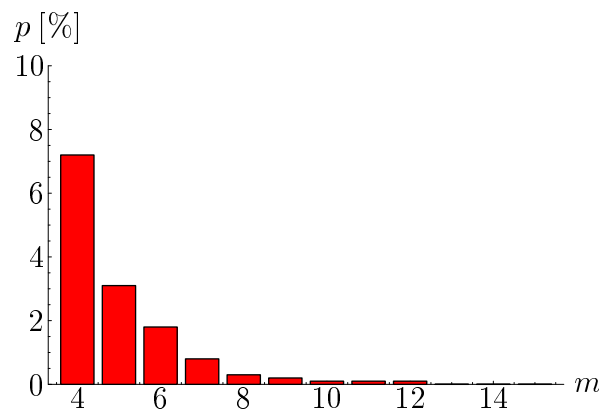


Abbildung 4.6: Wahrscheinlichkeit  $p$  für einen problematischen Zustand in Abhängigkeit des Parameters  $m$  der Zufallsverteilung.

Im Verlauf der Iterationen der Rekursiven Entmischung kann es auch vorkommen, dass die Subtraktionen anfänglich im separablen Zustandsraum stattfinden, dann aber die Folge  $\hat{\rho}_i$  den separablen Zustandsraum verläßt und die Folge in einen Problemfall hineinläuft. Betrachtet man die Gesamt-Zuverlässigkeit der Rekursiven Entmischung in ihrer Standardausführung, so ergibt sich für ein System bestehend aus zwei Qubits das folgende Bild:

Für alle Verteilungen mit  $m > 8$  konnte in weniger als 1 % ein Problem beobachtet werden - hier ist die Rekursive Entmischung ein statistisch nahezu 100 %iges, sowohl notwendiges also auch hinreichendes Separabilitätskriterium. Für  $4 < m \leq 8$ , ergaben sich in ca. 5 % der Fälle Probleme und im maximal ungünstigsten Fall, bei  $m = 4$  ist die Rekursive Entmischung immer noch zu ca. 85 % zuverlässig. Eine solche hohe

Zuverlässigkeit wird von keinem anderen bisher bekannten, allgemeinen, hinreichenden Separabilitätskriterium erreicht.

Bei der Rekursiven Entmischung kann es vorkommen, dass die Folge  $\hat{\rho}_i$  im Verlauf der Iteration in die Nähe des Randes des Gesamtzustandsraums kommt. Falls sich ein Subtraktionsfaktor  $p_i > p_{\max_i}$  ergibt erhält man dann eine rangreduzierte Dichtematrix  $\hat{\rho}_i$  und die Rekursion kann auf dem Zustandsrand weiterverfolgt werden (siehe dazu auch Abschnitt 4.10.3).

Um diese soeben beschriebenen, bei bestimmten Dichtematrizen auftretenden Problem zu lösen, können mehrerer Ideen in Augenschein genommen werden. Eine Möglichkeit ist, nicht immer das zur maximalen Annäherung optimale  $p$  zu benutzen und stattdessen einen kleineren Subtraktionsfaktor zu verwenden. Wählt man  $p$  nur klein genug, so sollte immer eine Annäherung an einen Fixpunkt ohne Verlassen des separablen Zustandsraums möglich sein. Auf jeden Fall muss immer ein  $p \leq \min(p_{\max}, p'_{\max})$ , siehe Gleichung (3.11), gewählt werden. Auch die Wahl von  $\hat{\rho}_{ps}$  kann eventuell verbessert werden. Wählt man für Dichtematrizen die nahe am Zustandsrand liegen reine Produktzustände aus den Wertebereich der tatsächlich rangreduzierten Dichtematrix, so kann dies helfen. Als dritte Möglichkeit käme statt einer Minimierung des Abstands zum total gemischten Zustand eine Maximierung des kleinsten Eigenwerts von  $\hat{\rho}$ , oder eine Betrachtung des Abstands der partiell transponierten Matrix  $\left\| \hat{\rho}^{T_2} - \frac{1}{n} \hat{1} \right\|$  bzw. deren kleinster Eigenwert für solche Problemfälle in Frage. All diese Möglichkeiten benötigen weitere Untersuchungen und sind keine fertigen Rezepte zur Lösung. Auf diesem Gebiet der Frage nach der Rekursiven Entmischung als allgemeines Separabilitätskriterium besteht deshalb noch weiterer Forschungsbedarf.

## 4.10 Beispiele

### 4.10.1 Zufälliger $5 \times 3$ Zustand

Als Beispiel für ein etwas höherdimensionales Quantensystem wird hier die Rekursive Entmischung eines  $5 \times 3$  System betrachtet. Es wird gezeigt, dass in diesem Fall nur die Methode der Rekursiven Entmischung Separabilität nachweist, da alle anderen herkömmlich bekannten Separabilitätskriterien hier keine Aussage ermöglichen.

Zur Erzeugung des zufällig gemischten 15 dimensionalen Zustands  $\hat{\rho}$  wurde das in Kapitel 1.4 beschriebene Verfahren benutzt. Dabei wurde ein 900 dimensionaler reiner, zufälliger Zustand erzeugt und anschließend ein 60 dimensionales Hilfssystem ausgespurt. Die fertige Dichtematrix  $\hat{\rho}$ , siehe Anhang B, wurde auf PPT untersucht, um Separabilität nicht von vorneherein ausschließen zu müssen. Der Abstand des Zustands vom maximal gemischten Zustand ist

$$d = \left\| \hat{\rho} - \frac{1}{n} \hat{1} \right\| = 0.0167754, \quad (4.65)$$

und der kleinste Eigenwert beträgt

$$\lambda_{\min} = 0.019055. \quad (4.66)$$

Da dies kleiner als  $\frac{1}{2+15} = 0.0588235$  ist, ermöglicht das Separabilitätskriterium Gleichung (3.25) keine Aussage. Probiert man das beste allgemein anwendbare herkömmliche hinreichende Separabilitätskriterium, Gleichung (3.27) aus, so ergibt sich für  $\hat{\rho}$

$$\sum_{i=0}^{24} \sum_{j=0}^8 \left| \tilde{K}_{ij} \right| = 6.70094 > 2 \quad (4.67)$$

und damit kann auch dieses Kriterium keine Separabilität nachweisen. Wendet man jedoch die Rekursive Entmischung auf  $\hat{\rho}$  an, so erhält man die in Abbildung 4.7 dargestellte Konvergenz gegen den maximal gemischten Zustand und damit einen Nachweis der Separabilität. Man benötigt ca. 500 Iteration für eine vollständige Konvergenz. Der blau markierte Bereich zeigt, ab welcher Iteration herkömmliche Separabilitätskriterien greifen. Die durchgezogene Linie bei  $i = 236$  markiert die Stelle, ab der mit dem in Kapitel 4.8 gezeigten Verfahren eine exakte Zerlegung von  $\hat{\rho}$  in  $15^2 = 225$  reine Produktzustände berechnet werden konnte. Die Marke  $i = 225$  ist mit einer gepunkteten Linie versehen.

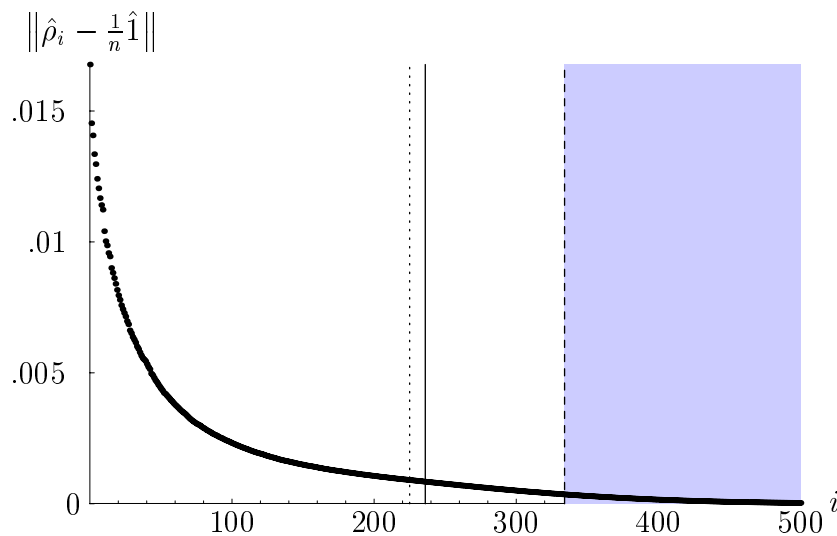


Abbildung 4.7: Beispiel für den Nachweis von Separabilität an einem  $5 \times 3$  Quantensystem mit der Methode der Rekursiven Entmischung.

## 4.10.2 WERNER-Zustände

### Definition

WERNER-Zustände [68] bestehen aus einer Mischung des maximal gemischten Zustand mit einem maximal verschränkten Zustand. Der Parameter  $\alpha$  beschreibt das Mischungsverhältnis. Für diese spezielle Klasse von Zuständen konnte analytisch ein allgemeines

Separabilitätskriterium gefunden werden; siehe Kapitel 3.3. Im folgenden soll der einfachste WERNER-Zustand, ein  $2 \times 2$  System mit

$$\hat{\rho}_W(\alpha) = (1 - \alpha) \frac{1}{4} \hat{1} + \alpha \frac{1}{2} (|00\rangle + |11\rangle) (\langle 00| + \langle 11|) \quad (4.68)$$

$$= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + \alpha & 0 & 0 & 2\alpha \\ 0 & 1 - \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \alpha & 0 \\ 2\alpha & 0 & 0 & 1 + \alpha \end{pmatrix}, \quad (4.69)$$

mit Hilfe der Rekursiven Entmischung untersucht werden. Die Grenze zwischen separablen und verschränkten WERNER-Zuständen liegt hier bei  $\alpha = \frac{1}{3}$ . Alles darüber ist verschränkt. Der Zustand  $\hat{\rho}_W(\frac{1}{3})$  liegt genau auf dem Rand des separablen Zustandsraums und ist deshalb auch separabel. Die Eigenwerte von  $\hat{\rho}_W(\alpha)$  sind

$$\lambda_1 = \frac{1}{4}(1 + 3\alpha), \quad \lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = \frac{1}{4}(1 - \alpha). \quad (4.70)$$

### Nächste reine Produktzustände

Um die zu  $\hat{\rho}_W(\alpha)$  am nächsten liegenden, reinen Produktzustände zu finden, berechnet man die Operatoren  $\hat{m}_1$  und  $\hat{m}_2$ , Kapitel 4.5, für die allgemein parametrisierten Zustände  $|x\rangle = |y\rangle \doteq \{\cos \varphi, e^{i\psi} \sin \varphi\}$  und erhält für beide Matrizen identisch

$$\hat{m}_1 = \hat{m}_2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + \alpha \cos 2\varphi & 2e^{i\psi} \alpha \cos \varphi \sin \varphi \\ 2e^{-i\psi} \alpha \cos \varphi \sin \varphi & 1 - \alpha \cos 2\varphi \end{pmatrix}. \quad (4.71)$$

Die Eigenwerte und Eigenvektoren dazu sind

$$\lambda_1 = \frac{1}{4}(1 - \alpha), \quad |\lambda_1\rangle \doteq \begin{pmatrix} -e^{i\psi} \sin \varphi \\ \cos \varphi \end{pmatrix}, \quad (4.72)$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{4}(1 + \alpha), \quad |\lambda_2\rangle \doteq \begin{pmatrix} e^{i\psi} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix}. \quad (4.73)$$

Damit ist  $\max_{\hat{\rho}_{ps}} \text{Tr}\{\hat{\rho}_{ps} \hat{\rho}\} = \frac{1}{4}(1 + \alpha)$  unabhängig von der Wahl von  $\varphi$  und  $\psi$  und es existiert eine kontinuierliche Mengen von nächsten reinen Produktzuständen

$$|\text{ps}\rangle = |x\rangle \otimes |\lambda_2\rangle \doteq \begin{pmatrix} \cos^2 \varphi \\ e^{-i\psi} \cos \varphi \sin \varphi \\ e^{i\psi} \cos \varphi \sin \varphi \\ \sin^2 \varphi \end{pmatrix}, \quad (4.74)$$

da  $|x\rangle \otimes |\lambda_2\rangle$  und  $|\lambda_2\rangle \otimes |y\rangle$  durch die Transformation  $\psi \rightarrow -\psi$  ineinander übergehen. Die Entfernung von  $\hat{\rho}_W(\alpha)$  zu diesen nächsten reinen Produktzuständen beträgt

$$\|\hat{\rho}_W(\alpha) - |\text{ps}\rangle \langle \text{ps}|\| = \frac{1}{4}(3\alpha^2 - 2\alpha + 3). \quad (4.75)$$

Die Menge aller  $|\text{ps}\rangle$  bilden ein zwei-dimensionales Gebiet auf der Oberfläche einer 4-D Kugel um den Zustand  $\hat{\rho}_W(\alpha)$  herum. Summiert man alle  $|\text{ps}\rangle \langle \text{ps}|$  gleichverteilt auf, so ergibt sich

$$\hat{\rho}' = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2\pi} d\psi |\text{ps}\rangle \langle \text{ps}| = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}. \quad (4.76)$$

Da  $\hat{\rho}' \neq \hat{\rho}_W(\alpha)$  gilt, bilden die  $|\text{ps}\rangle$  keinen "Umfangskreis" auf der Kugeloberfläche.

### Analytische Zerlegung

Jeder WERNER-Zustand  $\hat{\rho}_W(\alpha)$  lässt sich in ein gleichverteiltes Gemisch aus den zu ihm nächsten, reinen Produktzuständen  $|\text{ps}\rangle \langle \text{ps}|$  zusammen mit dem maximal gemischten Zustand zerlegen. Eine explizite Zerlegung erhält man aus den  $\hat{\rho}_{\text{ps}}(\varphi, \psi) = |\text{ps}\rangle \langle \text{ps}|$  mittels sukzessiver Subtraktion zu:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_W(\alpha \leq \frac{1}{3}) = & (1 - 3\alpha) \frac{1}{4} \hat{1} + 3\alpha \frac{1}{4} \left( \hat{\rho}_{\text{ps}}(0, 0) + \hat{\rho}_{\text{ps}}(\arccos(\frac{1}{\sqrt{3}}), 0) \right) \\ & + \hat{\rho}_{\text{ps}}(\arccos(\frac{1}{\sqrt{3}}), \frac{2\pi}{3}) + \hat{\rho}_{\text{ps}}(\arccos(\frac{1}{\sqrt{3}}), -\frac{2\pi}{3}) \end{aligned} \quad (4.77)$$

Der hintere Teil dieser Zerlegung entspricht der Zerlegung des Grenzzustands  $\alpha = \frac{1}{3}$ . Dies ist gleichzeitig die minimal mögliche Zerlegung des Grenzzustands in nur 4 reine Produktzustände. Für eine nicht minimale Zerlegung, siehe [78].

### Zerlegung mittels Rekursiver Entmischung

Mit Hilfe der Rekursiven Entmischung lässt sich jeder WERNER-Zustand mit  $\alpha < \frac{1}{3}$  direkt in maximal 16 reine Produktzustände zerlegen. Möchte man eine explizite Zerlegung des Grenzzustands

$$\hat{\rho}_W(\frac{1}{3}) = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad (4.78)$$

so kann man die bei einer vollständige Zerlegung von  $\hat{\rho}_W(\alpha < \frac{1}{3})$  gewonnen reinen Produktzustände  $\hat{\rho}_{\text{ps}_i}$  als Ausgangszustände für eine Zerlegung von  $\hat{\rho}_W(\frac{1}{3})$  mittels dem in Abschnitt 4.8 beschriebenen Verfahren verwenden. Als Ergebnis erhält man eine numerisch exakte Zerlegung des Grenzzustands in separable Zustände. Der Anhang A enthält als Beispiel 15 auf diese Art berechnete, reine Produktzustände, die zusammenaddiert genau  $\hat{\rho}_W(\frac{1}{3})$  ergeben. Die Gewichtungsfaktoren (Wahrscheinlichkeiten) der einzelnen Zustände sind in Abbildung 4.8 dargestellt.

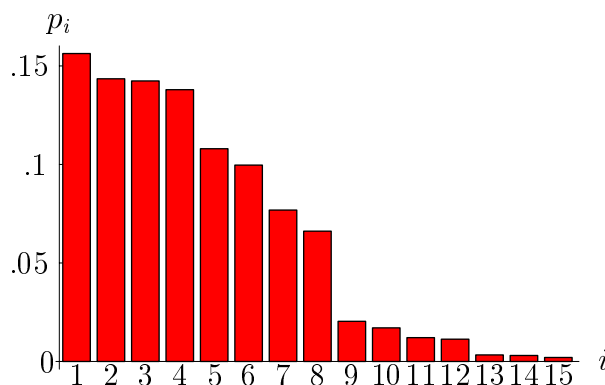


Abbildung 4.8: Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  für die Zerlegungsmatrizen des Grenzzustands  $\hat{\rho}_W(\frac{1}{3})$ .

### Konvergenzverhalten

Da der Aufwand der Rekursiven Entmischung, d.h. die Zahl der Iterationen bis zur Konvergenz, mit zunehmender Nähe zum separablen Zustandsrand zunimmt, erwartet man bei Annäherung von  $\alpha$  an  $\frac{1}{3}$  eine immer langsamere Konvergenz. Der Grenzzustand selbst kann nicht gegen den maximal gemischten Zustand konvergieren. Abbildung 4.9 zeigt die Zahl der Iterationen bis zur vollständigen Konvergenz

$$\left\| \hat{\rho}_k - \frac{1}{4} \hat{1} \right\| < 10^{-7} \quad (4.79)$$

in Abhängigkeit des Parameters  $\alpha$ . Betrachtet man im Vergleich dazu die Zahl  $k$  der Iteration, die notwendig sind, um mit Hilfe der Rekursiven Entmischung eine explizite Zerlegung (Kapitel 4.3 und 4.8) zu bekommen, so sieht man deutliche Unterschiede. Wie aus Abbildung 4.10 hervorgeht, ist  $k$  ungefähr konstant, bis sich ein nicht eindeutiger Anstieg in der Nähe der Grenze  $\alpha = \frac{1}{3}$  zeigt. Es kann also auch vorkommen, dass Zustände nahe der Grenze zur Verschränktheit mit nur wenigen Iterationen rekonstruiert werden können. Grund für die Unregelmäßigkeit in Abbildung 4.10 ist die numerische Ungenauigkeit der Bestimmung des nächsten reinen Produktzustands und das zufällige Moment verursacht durch eine eventuelle Uneindeutigkeit des nächsten reinen Produktzustands.

Die verschränkten WERNER-Zustände  $\alpha > \frac{1}{3}$  lassen sich mit Hilfe der Rekursiven Entmischung sofort erkennen, denn für sie findet sich kein reiner Produktzustand, der bei einer Subtraktion zu einer Annäherung an den maximal gemischten Zustand führen würde. Mathematisch bedeutet das für alle  $\hat{\rho}_{ps}$

$$\text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_{ps} \hat{\rho}_W(\alpha > \frac{1}{3}) \right\} < \text{Tr} \left\{ \left( \hat{\rho}_W(\alpha > \frac{1}{3}) \right)^2 \right\},$$

und damit folgt wegen Theorem 37 die Verschränkung für  $\alpha > \frac{1}{3}$ .

Geometrisch bedeutet dies, dass die verschränkten WERNER-Zustände außerhalb aller Thaleskreise liegen (siehe Abschnitt 4.4.2). Der Grenzzustand  $\alpha = \frac{1}{3}$  ist ein Fixpunkt der Rekursiven Entmischung auf dem Rand der separablen Zustände.

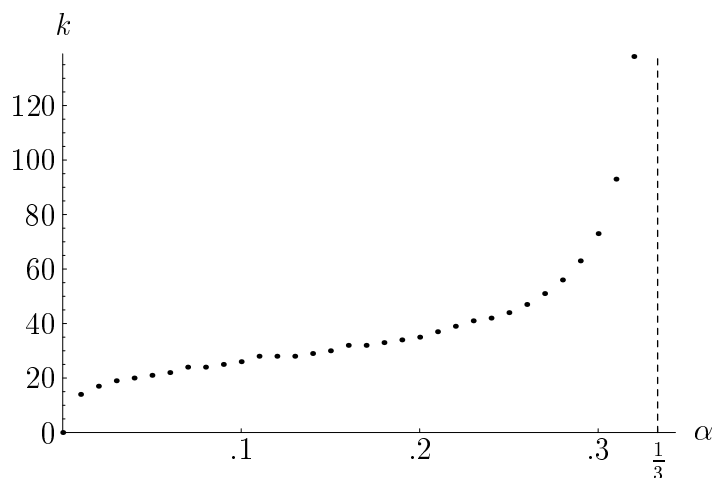


Abbildung 4.9: Anzahl der bis zur vollständigen Konvergenz gegen den maximal gemischten Zustand notwendigen Iterationsschritte  $k$  für den  $2 \times 2$  WERNER-Zustand mit Parameter  $\alpha$ .

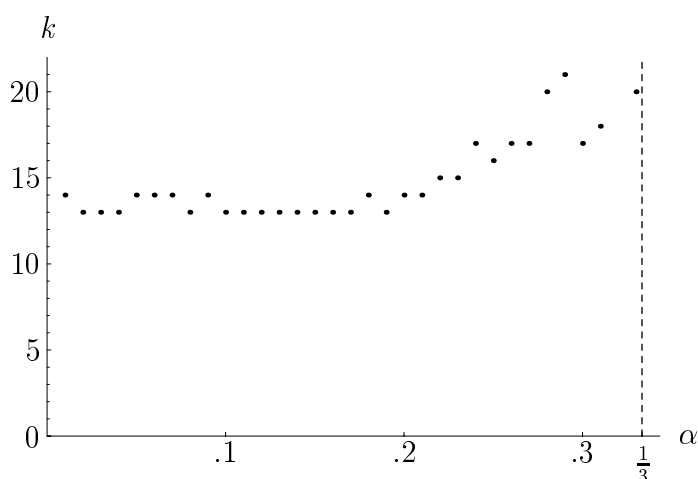


Abbildung 4.10: Anzahl der bis zur exakten Zerlegung notwendigen Iterationsschritte  $k$  für den  $2 \times 2$  WERNER-Zustand mit Parameter  $\alpha$ .

### 4.10.3 Randzustände

Für Zustände, die auf dem Rand des Gesamtzustandsraums liegen, ist die Methode der rekursiven Entmischung nicht ohne Änderungen anwendbar. Ein Zustand des Randes ist entweder verschränkt, oder er liegt auf dem Rand des separablen Zustandsraums. In beiden Fällen kann ohne Umwege keine Konvergenz gegen den maximal gemischten Zustand erreicht werden. Eine Möglichkeit dies zu lösen besteht darin, zu einem Zustand, der auf dem separablen Zustandsrand liegt, eine kleine  $\varepsilon$  "Störung"

$$\hat{\rho}' = (1 - \varepsilon)\hat{\rho} + \varepsilon\frac{1}{n}\hat{1} \quad (4.80)$$

zu addieren und anschließend die normale Rekursive Entmischung anzuwenden. Mit dieser kleinen "Störung" verschiebt man die Dichtematrix weg vom separablen Zustandsrand in Richtung Zentrum. Mit Hilfe des in Abschnitt 4.8 beschriebenen Verfahrens kann

dann eventuell (für  $\varepsilon \rightarrow 0$  immer) eine exakte Zerlegung nicht nur von  $\hat{\rho}'$ , sondern auch von  $\hat{\rho}$  berechnet werden. Diese Methode der kleinen "Störung" kann auch für Zustände angewandt werden, die zwar auf dem separablen Zustandsrand, aber nicht auf dem Gesamtzustandsrand liegen.

Eine weitere, aufwendigere, aber exaktere Möglichkeit, um Separabilität von rangreduzierten Dichtematrizen zu untersuchen, besteht darin, nicht mehr Konvergenz gegen den maximal gemischten Zustand, sondern gegen einen Fixpunkt auf dem separablen Zustandsrand zu fordern. Dazu muss zuerst einmal der separable Wertebereich der rangreduzierten Dichtematrix  $\hat{\rho}$  bestimmt werden, was mit Theorem 26 möglich wird. Als Beispiel soll die rangreduzierte Dichtematrix

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} 0.304641 & -0.0745273 + 0.0148643 i & 0.0818712 - 0.0960967 i & 0.07801 - 0.0764081 i \\ -0.0745273 - 0.0148643 i & 0.32418 & -0.0853428 - 0.0216451 i & -0.0748008 - 0.0556756 i \\ 0.0818712 + 0.0960967 i & -0.0853428 + 0.0216451 i & 0.147756 & -0.00647421 + 0.0964671 i \\ 0.07801 + 0.0764081 i & -0.0748008 + 0.0556756 i & -0.00647421 - 0.0964671 i & 0.223424 \end{pmatrix}$$

betrachtet werden, die nach Kapitel 1.4 durch Ausspuren eines drei-dimensionalen Hilfsystems erzeugt wurde. Die Eigenwerte von  $\hat{\rho}$  sind

$$\lambda_1 = 0.519314, \quad \lambda_2 = 0.280929, \quad \lambda_3 = 0.199757, \quad \lambda_4 = 0. \quad (4.81)$$

Separable Zustände  $\hat{\rho}_{\text{ps}}$  im Wertebereich von  $\hat{\rho}$  sind genau die Zustände, die

$$\text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}^{-1} \hat{\rho}_{\text{ps}} \} = 1 = \max \quad (4.82)$$

erfüllen. Berechnet man entsprechend Gleichung (4.33) die Matrizen  $m_1$  und  $m_2$  für ein allgemein parametrisiertes Qubit  $|x\rangle = |y\rangle \doteq \{ \cos \varphi, e^{i\psi} \sin \varphi \}$ , so ist ein Eigenwert immer identisch 1 was bedeutet, dass ein Qubit frei gewählt werden kann und das andere dann durch das Eigensystem von  $m_1$  bzw.  $m_2$  festgelegt ist. Damit erhält man eine Parametrisierung aller reinen Produktzustände im Wertebereich von  $\hat{\rho}$ , d.h. aller von  $\hat{\rho}$  subtrahierbaren, reinen separablen Zustände. Abbildung 4.11 zeigt für diese Zustände den maximal möglichen Subtraktionsfaktor  $p_{\text{max}}$  nach Theorem 16. Der Faktor  $p_{\text{max}}$  ist, wie gefordert, für alle diese Zustände größer als Null.

Für den Iterationsschritt der Rekursiven Entmischung muss nun von diesen Zustände derjenige mit maximalem  $\text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}_{\text{ps}} \}$  gefunden werden. Abbildung 4.12 zeigt diejenigen Zustände, für die eine Annäherung an den maximal gemischten Zustand erreicht werden kann. Die Extrema hiervon sind diejenigen reinen Produktzustände, die zu einer maximalen Annäherung an den total gemischten Zustand führen.

Führt man diese Schritte bei jeder Iteration durch, so erhält man das in Bild 4.13 dargestellte Konvergenzverhalten. Wie man sieht konvergiert die Folge gegen

$$d_\infty = \frac{1}{2\sqrt{3}} \quad (4.83)$$

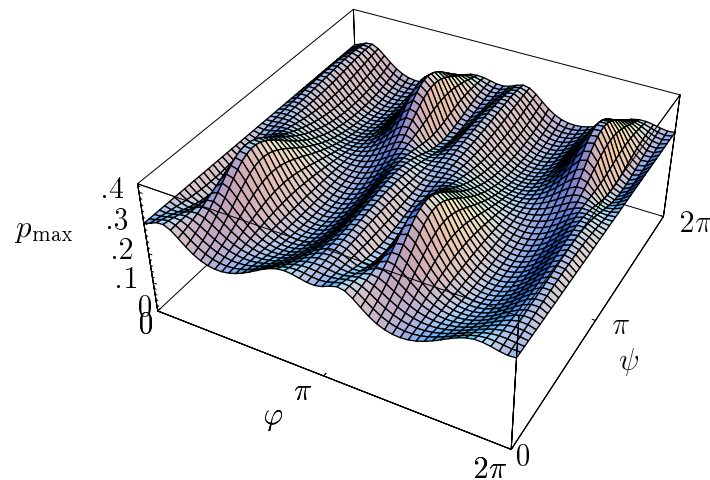


Abbildung 4.11: Maximaler Subtraktionsfaktor  $p_{\max}$  für die Menge aller reinen Produktzustände im Wertebereich des rangreduzierten Zustands  $\hat{\rho}$ .

was genau dem Abstand des Fixpunktes  $\hat{\rho}_{F_3}$ , Gleichung (4.42) entspricht. Für die Eigenwerte von  $\hat{\rho}_i$  ergibt sich eine Konvergenz gegen

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = \frac{1}{3}, \quad \lambda_4 = 0 \quad (4.84)$$

und damit gilt hier

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \hat{\rho}_i = \hat{\rho}_{F_3}. \quad (4.85)$$

Damit hat die leicht abgeänderte Rekursive Entmischung für diesen Randzustand Separabilität nachgewiesen und eine explizite Zerlegung von  $\hat{\rho}$  geliefert.

#### 4.10.4 Verschränkte Zustände

Bei der Anwendung der rekursiven Entmischung auf einen verschränkten Zustand können zwei Fälle auftreten.

1. Es findet sich kein reiner Produktzustand, der bei Subtraktion zu einer Annäherung an den maximal gemischten Zustand führt, Theorem 37.

All diese verschränkten Zustände liegt in dem blau markierten Bereich von Abbildung 4.2.

2. Die Folge  $\{\hat{\rho}_i\}$  konvergiert gegen einen Fixpunkt außerhalb der separablen Zustandsmenge, d.h. gegen einen Zustand auf dem Rand des in Abbildung 4.2 blau markierten Bereichs.

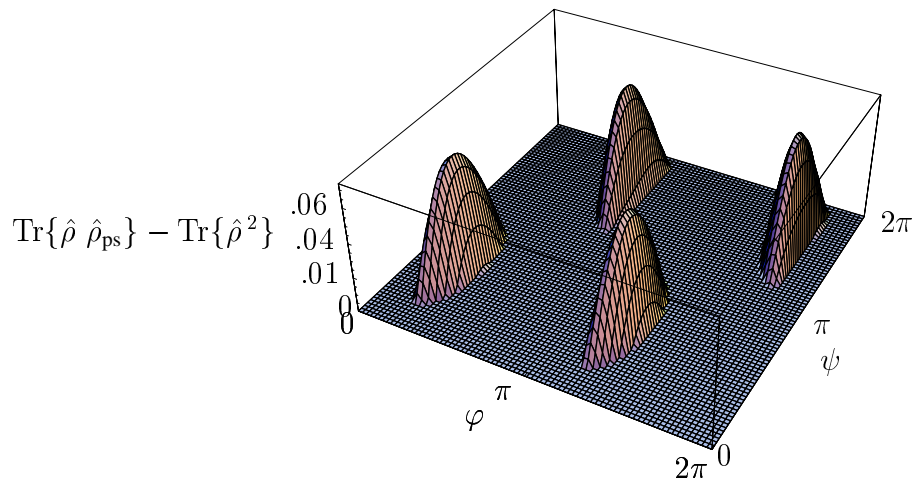


Abbildung 4.12: Menge der zu einer Annäherung an den maximal gemischten Zustand führenden reinen Produktzustände aus dem Wertebereich des rangreduzierten Zustands  $\hat{\rho}$ .

Als ein typisches Beispiel für den zweiten Fall kann die Dichtematrix

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} 0.252628 & 0.00624919 + 0.0209122 i & -0.110512 + 0.147168 i & -0.0599061 + 0.00374553 i \\ 0.00624919 - 0.0209122 i & 0.355324 & 0.0874006 + 0.0228666 i & 0.0493747 + 0.00826237 i \\ -0.110512 - 0.147168 i & 0.0874006 - 0.0228666 i & 0.250507 & 0.12593 + 0.0473979 i \\ -0.0599061 - 0.00374553 i & 0.0493747 - 0.00826237 i & 0.12593 - 0.0473979 i & 0.141542 \end{pmatrix}$$

dienen. Das Konvergenzverhalten für diesen verschränkten Zustand ist in Grafik 4.14 zu sehen. Es findet sehr schnell Konvergenz gegen einen Zustand weit weg vom maximal gemischten Zustand statt. Der Grenzwert liegt auch über dem Wert  $d_{F_3} = \frac{1}{2\sqrt{3}}$  des Fixpunktes  $\hat{\rho}_{F_3}$ .

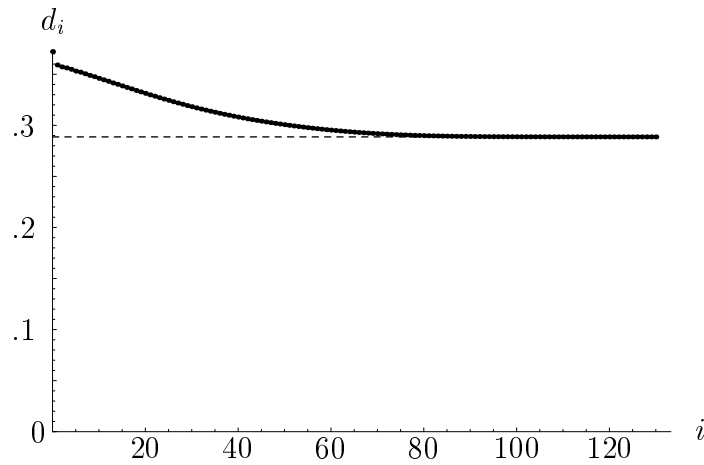


Abbildung 4.13: Konvergenzverhalten der Folge  $\{d_i = \|\hat{\rho}_i - \frac{1}{n}\hat{1}\|\}$  für den rangreduzierten Zustand  $\hat{\rho}$ . Die Konvergenz erfolgt gegen den Fixpunkt  $\hat{\rho}_{F_3}$ .

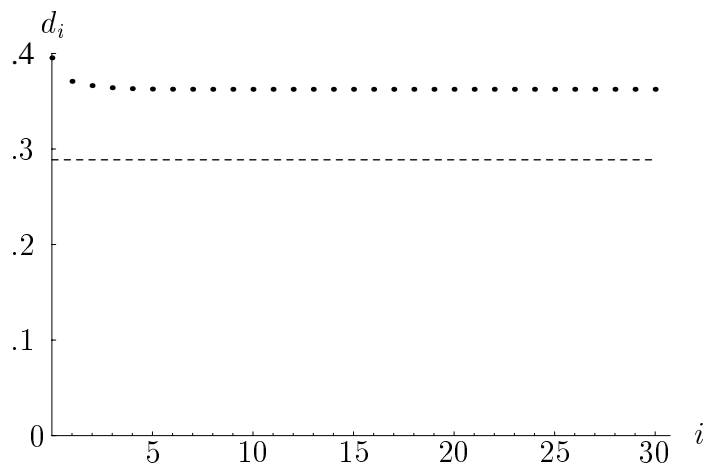


Abbildung 4.14: Typisches Konvergenzverhalten der Folge  $\{d_i = \|\hat{\rho}_i - \frac{1}{n}\hat{1}\|\}$  für einen verschränkten Zustand  $\hat{\rho}$ . Die Konvergenz erfolgt gegen einen inseparablen Fixpunkt weit weg vom maximal gemischten Zustand.

# Zusammenfassung

Diese Abhandlung befasst sich mit den besonderen Eigenschaften von Zuständen eines physikalischen Systems, beschrieben durch die Quantenmechanik, die für die außergewöhnlichen Aspekte der Quantenphysik verantwortlich sind. Insbesondere die in den letzten Jahren aufgekommene Idee der Quanteninformationsverarbeitung basiert in hohem Maße auf der Nutzung solcher Zustände. Die ungewohnten Eigenschaften treten erst bei einer Unterteilung des Gesamtsystems in Untersysteme und der damit erfolgenden Definition eines Quantennetzwerks in Erscheinung. Ist ein Zustand eines solchen Quantennetzwerks separabel und damit darstellbar als eine Summe seiner lokalen Eigenschaften, so handelt es sich um einen rein klassisch interpretierbaren Zustand. Benötigt man zur Darstellung eines Zustands auch nichtlokale Eigenschaften, so handelt es sich um einen verschränkten und damit nicht-separablen Zustand. Die Frage nach der Separabilität eines Zustands in einem Quantennetzwerk ist also von entscheidender Bedeutung für die Charakterisierung von Zuständen. Die Klärung dieser bisher ungelösten Frage der Separabilität von Quantenzuständen steht im Mittelpunkt dieser Arbeit.

Das erste Kapitel beschäftigt sich mit den Eigenschaften und der Erzeugung von "typischen", zufälligen Quantenzuständen. Um einen Zustand per Zufall auswählen zu können, benötigt man die Definition einer Gleichverteilung auf dem Raum aller Zustände. Es zeigt sich, dass für reine Zustände die Forderung nach der Invarianz der Verteilung gegenüber unitären Drehungen im Raum die Wahl der Gleichverteilung eindeutig festlegt. Parametrisiert man einen Zustand mit Hilfe von gaussverteilten Zufallsvariablen, so erhält man durch anschließende Normierung Zustände, die einer solchen Gleichverteilung gehorchen. Möchte man zufällige Bewegungen im quantenmechanischen Zustandsraum beschreiben, so benötigt man durch Zufall erzeugte Zeitentwicklungsoperatoren. Solche zufälligen unitären Operatoren können durch eine besondere Parametrisierung unitärer Matrizen erzeugt werden. Im Gegensatz zu reinen Zuständen ist für gemischte Zustände die Wahl einer Gleichverteilung durch physikalische Forderungen nicht eindeutig festgelegt. Da gemischte Zustände in der Realität jedoch immer durch Betrachtung eines Teilsystems eines insgesamt reinen Zustands entstehen, kann durch die Wahl einer Gleichverteilung reiner Zustände in einem höherdimensionalen Raum mit anschließendem Ausspüren des Hilfsystems eine physikalisch motivierte Gleichverteilung auch für gemischte Zustände definiert werden. Die so definierte Gleichverteilung hängt ausschließlich von der Größe des ausgespurten Systems ab. Mit Hilfe einer solchen Gleichverteilung lassen sich Zustandsgrößen wie beispielsweise die Entropie oder Reinheit eines zufälligen, gemischten Quantenzustands berechnen.

Im zweiten Kapitel wird die Struktur des Zustandsraums untersucht, um damit die Grund-

lagen für eine Diskussion des Separabilitätsproblems zu legen. Die Beschreibung eines Zustands kann auf verschiedene Art und Weise erfolgen. Mit dem Dichtematrix-Formalismus und der BLOCHvektor-Beschreibung stehen zwei zueinander äquivalente Möglichkeiten zur Verfügung, die jeweils unterschiedliche Vor- und Nachteile besitzen. Als ein wichtiges mathematisches Hilfsmittel wird der Abstand zweier Zustände mit Hilfe der Spur definiert und mit dem Skalarprodukt des BLOCHvektorraums verglichen. Die Möglichkeit der Addition zweier Zustände dient als Ausgangspunkt für eine geometrische Deutung des Gesamtzustandsraums. Es zeigt sich, dass der Zustandsraum eine konvexe Menge ist, mit den reinen Produktzuständen als Eckpunkten und allen rangreduzierten Dichtematrizen auf dem Rand. In höheren Dimensionen bedeutet dies, dass nicht mehr alle Zustände innerhalb der BLOCHkugel gültige quantenmechanische Zustände sind. Als Gegenstück zur Addition wird die bisher fast unbekannte Möglichkeit der Subtraktion von Zuständen eingeführt. Die Kriterien für die maximal mögliche Subtraktion verschiedener Klassen von Zuständen und deren Deutung im Zustandsraum werden herausgearbeitet. Mit der Einführung eines neuen Extremalkriteriums zur Klärung der Frage, wann ein reiner Zustand subtrahierbar ist, wird die Möglichkeit geschaffen, wichtige Zusatzbedingungen wie beispielsweise Separabilität an die Menge der subtrahierbaren Zustände zu stellen.

Die Unterteilung des Systems in Untersysteme führt zu einer Symmetriebrechung im Gesamtzustandsraum, die eine Aufspaltung in einen separablen und einen verschränkten Unterraum bewirkt. Die mathematische Definition der Separabilität führt in Verbindung mit der Additivität reiner Produktzustände zu einer ganz speziellen Einbettung des separablen Unterraums in den Gesamttraum. Dabei wird die separable Zustandsmenge durch die konvexe Hülle der reinen Produktzustände gebildet, die wiederum eine Untermenge der Eckpunkte des gesamten Zustandsraums sind. Der maximal gemischte Zustand liegt, als der für klassische Systeme im Gleichgewicht typische Zustand, im Zentrum des separablen Unterraums. Anhand dieser geometrischen Darstellung der Separabilität läßt sich erklären, warum bei der Addition eines verschränkten zu einem separablen Zustand genau ein Grenzpunkt und bei der Addition zweier verschränkter Zustände maximal zwei Grenzpunkte bezüglich der Separabilität existieren. Die bei einer Zerlegung einer separablen Dichtematrix überhaupt vorkommenden reinen Produktzustände lassen sich als genau diejenigen Zustände identifizieren, die von der Dichtematrix subtrahierbar sind. Es wird gezeigt, dass immer eine Zerlegung existiert, so dass ein frei wählbarer, subtrahierbarer Produktzustand darin vorkommt. Die Anzahl der für eine Zerlegung notwendigen Zustände ist sowohl nach unten, als auch nach oben begrenzt.

Die bei der Analyse des Zustandsraum gewonnenen Erkenntnisse werden im dritten Kapitel für eine Deutung der bisher existierenden Separabilitätskriterien benutzt. Für reine Zustände ist das Separabilitätsproblem gelöst, wohingegen für gemischte Zustände nur Teillösungen existieren. Die bisher bekannten, notwendigen Separabilitätskriterien lassen sich nur für Zustände in der Nähe des maximal gemischten Zustands anwenden; die hinreichenden Separabilitätskriterien funktionieren nur in der Nähe der maximal verschränkten Zustände. Bis auf den Spezialfall eines Systems bestehende aus nur zwei 2-Niveau Systemen oder einem zwei und einem 3-Niveau System existieren keine anwendbaren, allgemeinen Separabilitätskriterien. Nur für Sonderfälle wie stark rangreduzierte Zustände oder WERNER-Zustände ist Separabilität exakt nachweisbar. Betrachtet man

Quantensysteme mit einem hochdimensionalen Zustandsraum, so wird gezeigt, dass die Verschränkung zwischen zwei großen Teilsystemen im Allgemeinen ihren Maximalwert annimmt. Die Verschränkung innerhalb eines Teilsystems jedoch verschwindet mit dessen zunehmender Größe, was einem Übergang in einen Gleichgewichtszustand maximaler Entropie entspricht. Weitere Berechnungen zeigen, dass die Wahrscheinlichkeit für ein verschränktes Teilsystem exponentiell mit der Größe des Gesamtsystems abnimmt.

Da die bisherigen Separabilitätskriterien nur für ganz spezielle Zustände Separabilität zeigen können, wird im vierten Kapitel mit der Rekursiven Entmischung ein völlig neuartiges Verfahren für den Nachweis von Separabilität vorgestellt. Es basiert auf der besonderen Struktur des Zustandsraums und dem Wissen, dass in der Nähe des maximal gemischten Zustands Separabilität leicht nachweisbar ist. Das Verfahren besteht in der Bildung einer Rekursionsfolge, wobei bei jedem Iterationsschritt die folgenden zwei Operationen durchgeführt werden:

- Suche den zu der Dichtematrix nächsten reinen Produktzustand.
- Subtrahiere diesen Produktzustand so, dass eine maximale Annäherung an den vollständig gemischten Zustand erreicht wird.

Mit Hilfe dieses Verfahrens kann bei Konvergenz gegen den maximal gemischten Zustand nicht nur die Separabilität nachgewiesen werden, sondern man erhält dann für einen separablen Zustand gleichzeitig eine explizite Zerlegung in reine Produktzustände und damit eine klassisch interpretierbare Darstellung des Ausgangszustands. Der aufwendigste Teil der Rekursiven Entmischung ist die Suche nach dem nächsten Produktzustand einer gegebenen Dichtematrix. Hierfür wird eine neue Methode vorgestellt, die in Verbindung mit dem im zweiten Kapitel hergeleiteten Extremalkriterium gleichzeitig auch für die Bestimmung aller überhaupt in einer Zerlegung möglicherweise vorkommenden Zustände benutzt werden kann. Die Rekursive Entmischung kann anschaulich im geometrischen Bild des Zustandsraums erklärt werden. Die Deutung der maximalen Annäherung an den vollständig gemischten Zustand führt nebenbei zu der Identifikation eines Subraums, der nur verschränkte Zustände beinhaltet. Von zentraler Wichtigkeit sind die Fixpunkte der rekursiven Folge. Es wird gezeigt, dass innerhalb des separablen Zustandsraums nur der maximal gemischte Zustand ein Fixpunkt ist. Alle anderen Fixpunkte liegen entweder auf dem Rand der separablen Zustände oder es handelt sich um verschränkte Fixpunkte. Hat man mit Hilfe der Rekursiven Entmischung eine explizite Zerlegung eines separablen Zustands berechnet, so wird eine Methode beschrieben, mit der man daraus immer eine Zerlegung in maximal  $n^2$  reine Produktzustände berechnen kann, wobei  $n$  die Dimension des Gesamt-HILBERTraums ist. Für die Untersuchung der Zuverlässigkeit der Rekursiven Entmischung wird eine statistische Analyse vorgenommen, die auch Vorschläge für die Behandlung von schwierigen Zuständen beinhaltet. Dieses interessante Gebiet eignet sich als Ausgangspunkt weiterer Forschung.

Als Beispiel für die praktische Anwendung der Rekursiven Entmischung wird diese an verschiedenen Zustandstypen vorgeführt. Für die Untersuchung eines etwas größeren Systems wird die explizite Zerlegung eines zufällig erzeugten, separablen  $5 \times 3$  Quantenzustands berechnet. Die Anwendung der Rekursiven Entmischung auf die Familie der

WERNER-Zustände ergibt nicht nur deren Separabilitätseigenschaften, sondern sie führt auch zu der sehr interessanten Menge aller reinen Produktzustände, die dem WERNER-Zustand am nächsten liegen. Untersucht man einen separablen Zustand, der auf dem Zustandsrand liegt, so wird anhand eines Beispiels dessen Konvergenzverhalten gegen einen Fixpunkt auf dem separablen Zustandsrand dargestellt. Verschränkte Zustände hingegen zeigen keine Konvergenz gegen einen separablen Fixpunkt.

Diese Beispiele zeigen die hohe Zuverlässigkeit der Rekursiven Entmischung als Separabilitätskriterium und bieten interessante Einblicke in die Struktur von Separabilität und Verschränkung.

# English Overview

Quantum theory is a fascinating, active field of research in physics today. The ever increasing possibility of working experimentally with systems in the quantum domain fuels the need to explore the full consequences of the foundations of physics laid by quantum mechanics. With the emergence of quantum information processing proposals during the last decade, the former purely theoretical questions like non-locality and super-correlations turned into essential ingredients for any practical implementation of concepts like quantum computing, quantum cryptography or quantum teleportation.

Quantum information processing would become superior to its classical variants, because of the special state space the information of a system is stored in. Changes to classical bits have to take place in classical phase space, while quantum bits (qubits) can be transformed by applying unitary operations in the rich structure of the LIOUVILLE-space. The overwhelming potential power of quantum devices is based, on one hand, on the exponentially increasing size of the state space, if the number of qubits grows, and, on the other hand, on the possibility of effectively implementing local unitary transformations. Both of these exceptional properties can not be simulated by classical means.

Only if the system is partitioned into qubits and treated as a quantum network, the true quantum power is unleashed. The resulting possibility of the existence of so called non-local, entangled states can be viewed as the characteristic feature of quantum information. If the state of a system described by quantum mechanics was separable and therefore representable by a sum of its local properties, it could be interpreted as a purely classical mixture. If a state is entangled, no classical interpretation and no representation by just local properties exists. To determine whether a state is separable or not, is therefore a very important task. This so far unresolved question is at the heart of this thesis.

In this english overview, only a short description of the research done can be given. Proofs, examples and in detail examinations can only be found in the complete text.

## Uniform Distribution of Quantum States

This chapter deals with the question of how a "typical" quantum state looks like, what properties it has and how to generate one. "Typical" means, that such a state is randomly chosen among all possible states. This directly leads to the question of a uniform distribution of states in the overall state space. The main criterion, a uniform distribution has to fulfil, is invariance under unitary transformations  $\hat{U}$ .

For pure states, this requirement for the distribution  $P$  of a state  $|\psi\rangle$  in HILBERT-space,

$$P_{\hat{U}|\psi\rangle} = P_{|\psi\rangle} , \quad (4.86)$$

determines uniquely the form of  $P$ . As one can show by looking at infinitesimal rotations, a (not normalized) state  $|\psi\rangle$ , with dimension  $n$ , parametrized by

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^n (a_j + ib_j) |j\rangle , \quad (4.87)$$

obeys a uniform distribution, if the parameters  $x_j$  ( $x = a, b$ ) are chosen according to a GAUSSIAN distribution

$$P_{|\psi(\{x_j\})\rangle} = \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \right)^{2n} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{j=1}^{2n} x_j^2} . \quad (4.88)$$

Therefore, a random pure state can be generated by independently choosing the parameters  $x_j$  from a GAUSSIAN distribution and normalization can be imposed afterwards. Clearly the distribution is invariant under unitary transformations, since the sum in the exponent is nothing but the BLOCH-vector length, which is known to be constant for pure states under arbitrary rotations. If the standard deviation  $\sigma$  is chosen as

$$\sigma = \frac{1}{\sqrt{2n}} , \quad (4.89)$$

the randomly generated states will become normalized automatically, if  $n$  is large. After normalization, the new parameters  $\tilde{x}_j$  are distributed as

$$P_{\tilde{x}_j}(\tilde{x}_j) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{(n-1)!}{\Gamma(n-\frac{1}{2})} (1-\tilde{x}_j^2)^{n-\frac{3}{2}} . \quad (4.90)$$

If one is interested in "typical" motions of a quantum state, one has to look at randomly generated unitary time evolution operators. To achieve this, a parametrization of a unitary matrix with independent variables needs to be found. In case of a two-dimensional system, the well known EULER angles can be used for that. In higher dimensions, the HURWITZ-parametrization, that splits up the total rotation into many two dimensional rotations, will do the job.

In the most general case of mixed quantum states, the demand of invariance under unitary transformations does not yet uniquely specify the probability distribution. The difference compared to the pure case comes from the now undetermined distribution of eigenvalues. To take the eigenvalue distribution as the mathematical appealing uniform distribution has no physical motivation. To find a distribution based on physical reasoning, one has to recognize, that any mixed state can be viewed as being built by neglecting one subsystem within a pure state in a higher dimensional space. Using the notation of the partial trace over subsystem 2, any mixed state  $\hat{\rho}$  can be written as

$$\hat{\rho} = \text{Tr}^{(2)} \{ |\psi\rangle \langle \psi| \} , \quad (4.91)$$

with some pure state  $|\psi\rangle$ . A uniform distribution on the space of mixed states can now be introduced by choosing the uniform distribution of pure states for  $|\psi\rangle$ . Since the choice of  $|\psi\rangle$  is not unique, there is not a single mixed state distribution. The distribution will depend on the size  $m$  of the additional HILBERT-space. If  $m < n$ , rank reduced density operators  $\hat{\rho}$  will be produced. Otherwise the resulting probability distribution for the eigenvalues of  $\hat{\rho}$  is given by [11, 12]

$$P_m(\lambda_1, \dots, \lambda_n) = C_{n,k} \delta(1 - \sum_{i=1}^n \lambda_i) \prod_{i=1}^n \theta(\lambda_i) \prod_{i=1}^n \lambda_i^{m-n} \prod_{j=1}^n \prod_{i=1}^{j-1} (\lambda_i - \lambda_j)^2, \quad (4.92)$$

and is shown in figure 4.15 for various  $m$  in case of a qubit ( $n = 2$ ). With increasing size  $m$ , the peaks of the distribution become sharper and converge against  $\lambda = \frac{1}{2}$ , which corresponds to the maximal mixed state  $\hat{\rho} = \frac{1}{2}\hat{1}$ . This behaviour can be related to the emergence of the maximum entropy principle in thermodynamics [14].

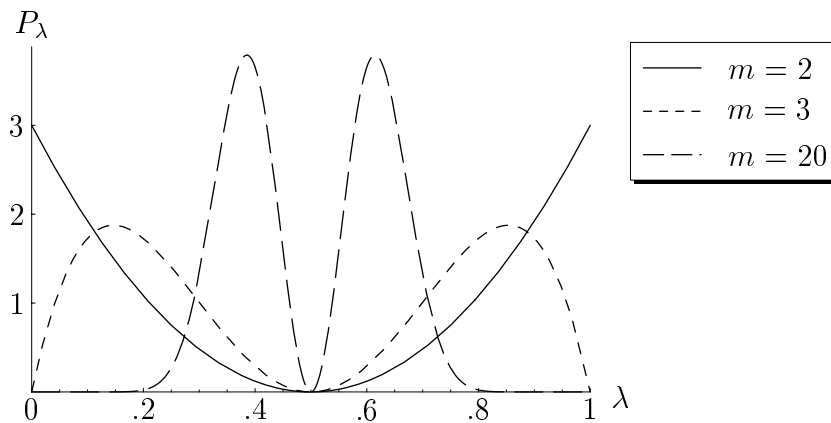


Figure 4.15: Probability distribution  $P_\lambda$  for the eigenvalues  $\lambda$  of a randomly chosen, mixed qubit, depending on the size  $m$  of the traced out, additional system.

### Structure of Quantum State Space

Any state of a physical system can be specified using the mathematical formalism of a state space. The choice of space is up to the scientist, but quantum theory with its formulation in density operator notation gives us a very handy one. If  $\hat{\rho}$  is a physical reasonable state in LIOUVILLE-space, it has to fulfil three criteria: Hermiticity  $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$ , normalization  $\text{Tr}\{\hat{\rho}\} = 1$  and semi-positivity  $\hat{\rho} \geq 0$ . All three criteria result from the fact, that any useful theory needs to be based on probability theory (a deterministic theory is a special case of a statistical theory). Instead of describing a state in terms of a density operator  $\hat{\rho}$ , it is sometimes more appealing to use the BLOCH-vector picture, where any

state can be viewed as an ordinary vector in a real valued vector space. The advantage of the BLOCH-picture is an intuitive understanding of the dynamics as a rotation, but the price to pay is a loss of knowledge, what it means for a state, to be physical reasonable.

The rich structure of the quantum state space is the reason for the existence of superposition and non-local states. The dimension of the state space is  $n^2 - 1$ , if it is to describe the equivalence of an  $n$ -level quantum system, and the main geometric properties of the state space are convexity and compactness. All pure states lie on the surface of the BLOCH-sphere and span the convex hull as vertices. All rank reduced density operators form the edge of the convex set. The completely mixed state  $\frac{1}{n}\hat{1}$  can be viewed as the center of the state space, since all pure states are equally far away from it, and therefore  $\frac{1}{n}\hat{1}$  is the center of the BLOCH-sphere.

Addition of states is a well known operation in quantum theory. The convex sum (mixture) of two density operators is always a physical reasonable state again. The less well known operation of subtracting one state from another, does not have this nice property in general. The problem is the positivity of the resulting operator [19].

**Theorem 42.** *The state  $\hat{\rho}_2 = \frac{1}{1-p}(\hat{\rho} - p\hat{\rho}_1)$  is a physical reasonable state  $\hat{\rho}_2 \geq 0$ , if and only if the kernels  $K$  of the linear operators  $\hat{\rho}$  and  $\hat{\rho}_1$  satisfy  $K(\hat{\rho}) \subseteq K(\hat{\rho}_1)$ , and  $p \leq p_{\max}$ , with*

$$p_{\max} = \frac{1}{\lambda_{\max} \left( \hat{\rho}^{-\frac{1}{2}} \hat{\rho}_1 \hat{\rho}^{-\frac{1}{2}} \right)} > 0 .$$

The denominator is the largest eigenvalue of the matrix  $\hat{\rho}^{-\frac{1}{2}} \hat{\rho}_1 \hat{\rho}^{-\frac{1}{2}}$ , with the power of an operator defined as its power taken in spectral decomposition. If the state being subtracted is a pure state,  $\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_p$ , the maximal allowed subtraction factor  $p_{\max}$  can be simplified.

**Theorem 43.** *The state  $\hat{\rho}_2 = \frac{1}{1-p}(\hat{\rho} - p\hat{\rho}_p)$  with pure state  $\hat{\rho}_p = |\varphi\rangle\langle\varphi|$  is a physical reasonable state  $\hat{\rho}_2 \geq 0$ , if and only if  $|\varphi\rangle$  is in the range  $R$  of  $\hat{\rho}$ ,  $|\varphi\rangle \in R(\hat{\rho})$ , and  $p \leq p_{\max}$  with*

$$p_{\max} = \frac{1}{\text{Tr} \{ \hat{\rho}_p \hat{\rho}^{-1} \}} > 0 .$$

To check, whether a given pure state  $\hat{\rho}_p$  can be subtracted from  $\hat{\rho}$ , the following extremal criterion turns out to be very fruitful.

**Theorem 44.**  *$\hat{\rho}_p$  subtractable from  $\hat{\rho}$ , i.e.  $\hat{\rho}_p \in R(\hat{\rho}) \iff \text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}^{-1} \hat{\rho}_p \} = 1 = \max$*

As one can easily see, any pure state is subtractable from a full rank density operator  $\hat{\rho}$ . The power of this extremal criterion comes from the possibility of introducing further restrictions on  $\hat{\rho}_p$  like e.g. separability.

The partitioning of a quantum system into subsystems breaks the symmetry of the overall state space. To simplify notation, only quantum networks consisting of two parts are considered henceforth. A separable, classical interpretable state, can always be written as

$$\hat{\rho}_s = \sum_i p_i \hat{\rho}_{ps_i} , \quad (4.93)$$

with  $\hat{\rho}_{ps_i}$  being a pure product state  $\hat{\rho}_{ps_i} = \hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)}$ . This formula defines separability, but it does not tell us how to construct the decomposition for given  $\hat{\rho}_s$ . The question whether a given  $\hat{\rho}$  is separable or entangled, is the so called separability problem. This problem is – in its most general form – so far unsolved.

Since the addition of separable states will lead to a separable state again, the separable subspace is also a convex set. The vertices are now the pure product states  $\hat{\rho}_{ps}$ . Figure 4.16 gives an abstract picture of the overall state space, its properties and its partition into an entangled and a separable subspace. This picture gives a good intuitive grasp of the state space structure for quantum networks. All the so far mentioned properties are considered. (The number of vertices is arbitrarily chosen and does not form a continuous set, as it is the case in reality.)

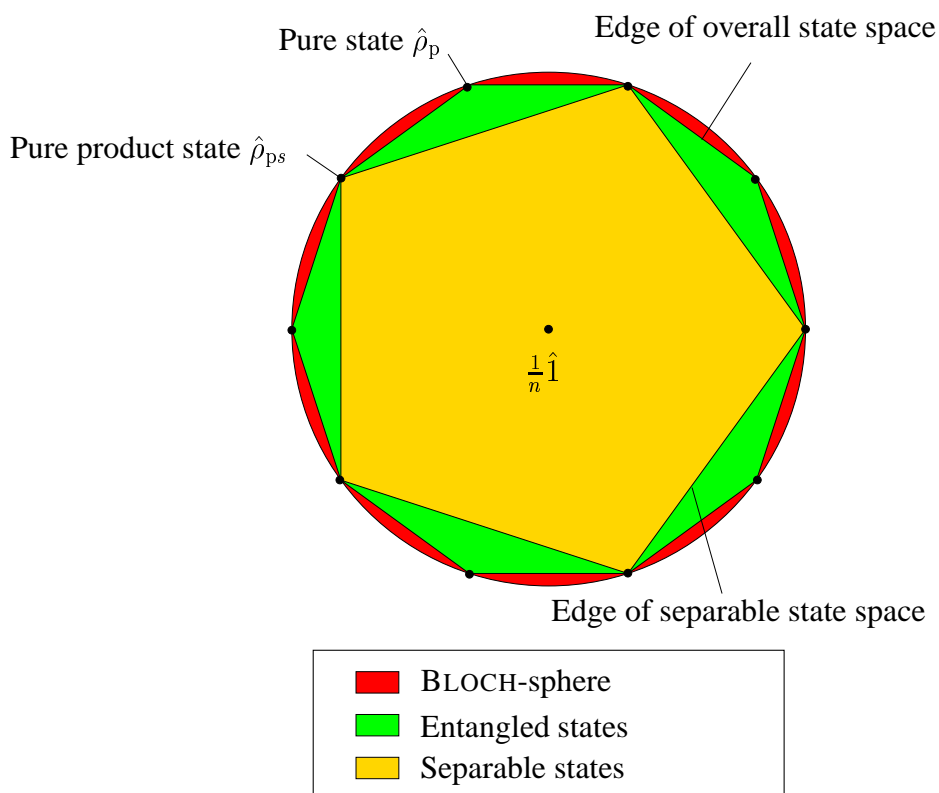


Figure 4.16: Abstract picture of the state space of a quantum network and its partition into an entangled and a separable subspace.

As an example, this picture easily explains, why the addition of an entangled and a separable state can lead either to a separable or entangled result, with exactly one sharp transition point in between. If two entangled states are summed up, the result is entangled, there are two transition points, or there is just one separable state in between.

### Entanglement Criteria

The quest for an applicable, general separability criterion has not succeeded yet. For pure states, it is easy to decide, whether a state contains non-local properties or if it is a product state. Various measures of entanglement exist for this case. In the case of mixed quantum states, the so far known applicable, general separability criteria are either only necessary or only sufficient.

The best necessary criteria so far is the PPT criteria [34] that says, that any separable state  $\hat{\rho}$  has a positive partial transpose  $\hat{\rho}^{T_2} \geq 0$ . If the dimension of the HILBERT-space is very small ( $n \leq 6$ ), this criteria is also sufficient [35, 36].

A very useful tool for separability was found by BRAUNSTEIN et. al. [51] for  $n = 2^N$  quantum networks:

$$\hat{\rho} = (1 - \varepsilon) \frac{1}{n} \hat{1} + \varepsilon \hat{\rho}', \quad \varepsilon \leq \frac{2}{2 + n^2} \quad \Rightarrow \quad \hat{\rho} \text{ separabel} \quad (4.94)$$

This itself is not a general separability criterion, since one needs to have a state of this special form to be able to apply it, but using the principle of maximal subtraction of density operators, one can use this to find

$$\lambda_{\min}(\hat{\rho}) \geq \frac{n}{2 + n^2} \quad \Rightarrow \quad \hat{\rho} \text{ separabel} . \quad (4.95)$$

Another criteria can be found when looking at the distance (in terms of the HILBERT-SCHMIDT-norm) of a state  $\hat{\rho}$  from the center  $\frac{1}{n} \hat{1}$ ,

$$\left\| \hat{\rho} - \frac{1}{n} \hat{1} \right\| \leq \frac{2}{2 + n^2} \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} \quad \Rightarrow \quad \hat{\rho} \text{ separabel} , \quad (4.96)$$

proofing that any state in a (small) sphere around the maximal mixed state is separable. In general, all sufficient separability criteria found so far only work for states very close to  $\frac{1}{n} \hat{1}$ .

For the case of large quantum systems (discrete, finite HILBERT-space), one can use the introduced uniform distribution of quantum states to derive conclusions about the entanglement. If  $n_1$  and  $n_2$  are the dimension of System 1 and 2, respectively, the mean entanglement  $\langle E \rangle$  between these two subsystems (based on the VON NEUMANN entropy) can be shown to be

$$\langle E \rangle \approx 1 - \frac{n_1}{2n_2 \ln n_1} , \quad (4.97)$$

if  $1 \ll n_1 \leq n_2$  holds. Figure 4.17 shows the convergence of  $\langle E \rangle$  towards its maximum value 1 for a qubit ( $n_1 = 2$ ) with increasing size  $n_2$  of subsystem two. Two large quantum systems typically become entangled with each other, if brought into contact.

A different picture emerges if the entanglement *inside* one subsystem is considered. As a simple measure, the purity  $P(\hat{\rho}) = \text{Tr}\{\hat{\rho}^2\}$  can be used. For  $n_1 \leq n_2$  the mean purity of one subsystem turns out to be

$$\langle P \rangle = \frac{n_1 + n_2}{n_1 n_2 + 1}. \quad (4.98)$$

For large  $n_1$  and  $n_2$ , the purity goes to zero which proves, that the state is not entangled any more. If one plots the probability of being entangled for a  $n_1 = 4$  system dependent on the size  $n_2$ , figure 4.18 is obtained. The solid line shows a fit to an exponential decay. A large quantum system coupled to another large systems typically does not contain any entanglement.

These conclusions turn out to be fruitful for a discussion of the second law of thermodynamics based on quantum mechanical principles [14].

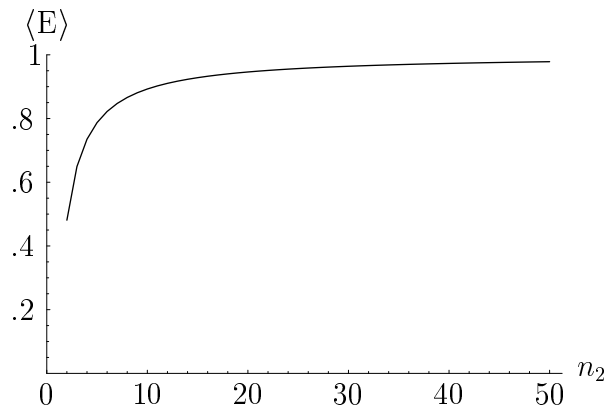


Figure 4.17: Mean entanglement  $\langle E \rangle$  between two subsystems of a pure  $2 \times n_2$  quantum system, dependent on the dimension  $n_2$ .

### Recursive Demixing

As shown, there exists so far no reliable, general separability criterion for quantum systems other than  $2 \times 2$  or  $2 \times 3$ . In this chapter, a new method named "Recursive Demixing" is introduced, that can not only be used as a more reliable criterion, but can even give the explicit decomposition of a separable state into a mixture of pure product states.

The main idea behind recursive demixing is, that proofing separability gets easier, the closer one gets to the completely mixed state. The question of which pure product states have to be chosen in the decomposition of a separable state is therefore transferred to the question how to get closer to  $\frac{1}{n} \hat{1}$ . By using the operation of subtracting pure product density matrices from a given state  $\hat{\rho}$ , the goal is to get as close to the center  $\frac{1}{n} \hat{1}$  as possible

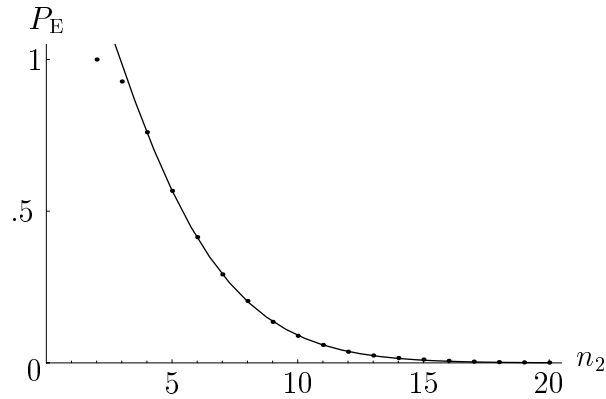


Figure 4.18: Probability  $P_E$ , of subsystem one ( $n_1 = 4$ ) containing entanglement, dependent on the dimension  $n_2$  of subsystem two. The solid line is a fit to an exponential decay.

with each subtraction. If one is able to subtract pure product states from  $\hat{\rho}$  so that only  $\frac{1}{n}\hat{1}$  is left, separability of  $\hat{\rho}$  is proven. For an entangled state  $\hat{\rho}$ , no convergence to the maximal mixed state can be achieved.

Recursive demixing is therefore an iterative method leading to a series of states  $\{\hat{\rho}_i\}$ . Let  $\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}$  be the density operator to be examined. The essential two operations in each iteration step are:

1. Find the closest pure product state  $\hat{\rho}_{\text{ps}_i}$  to the state  $\hat{\rho}_{i-1}$ .
2. Subtract  $\hat{\rho}_{\text{ps}_i}$  from  $\hat{\rho}_{i-1}$  so, that the resulting density operator  $\hat{\rho}_i$  is as close to  $\frac{1}{n}\hat{1}$  as possible

$$\hat{\rho}_i := \min_{\{p_i, \|\hat{\rho}_i - \frac{1}{n}\hat{1}\|\}} \frac{1}{1 - p_i} (\hat{\rho}_{i-1} - p_i \hat{\rho}_{\text{ps}_i}) . \quad (4.99)$$

Using this notation, the new separability criterion can be formulated:

**Theorem 45.** *Let  $\{\hat{\rho}_i\}$  be the series given by recursive demixing of  $\hat{\rho}_0$ :*

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \hat{\rho}_i = \frac{1}{n}\hat{1} \quad \Rightarrow \quad \hat{\rho}_0 \text{ separable}$$

The series  $\{\hat{\rho}_i\}$  for a separable state  $\hat{\rho}_0$  will usually converge against  $\frac{1}{n}\hat{1}$  without ever hitting  $\frac{1}{n}\hat{1}$  exactly. If one is only interested in the question whether  $\hat{\rho}_0$  is separable and not in the complete decomposition itself, one can stop the iteration, as soon as separability of  $\hat{\rho}_i$  has been proven with one of the existing sufficient separability criteria that work in the vicinity of the totally mixed state. On the other hand, if one wants to obtain an explicit decomposition of a separable state  $\hat{\rho}_0$ , one can stop the iteration as soon as  $\hat{\rho}_0$  can be written as a convex linear combination of the pure product states  $\hat{\rho}_{\text{ps}_i}$ .

The knowledge gained from the examination of the structure of the quantum state space can now be used to visualize the recursive demixing method in a geometrical way. Figure 4.19 shows the convergence of the series  $\{\hat{\rho}_i\}$  against  $\frac{1}{n}\hat{1}$  starting from a separable state  $\hat{\rho}_0$  by subtracting the nearest pure product state in each iteration step. For an entangled state, no convergence against  $\frac{1}{n}\hat{1}$  can be obtained, because subtracting a pure product state from an entangled one will always lead to a state that is further away from the border between separable and entangled states. As one can easily see, the method of recursive demixing in its standard form will not work for states that lie exactly on the edge of the separable state space. Nevertheless, a slightly modified version of the recursive demixing will lead to convergence against a special point on the border and therefore proving separability again.

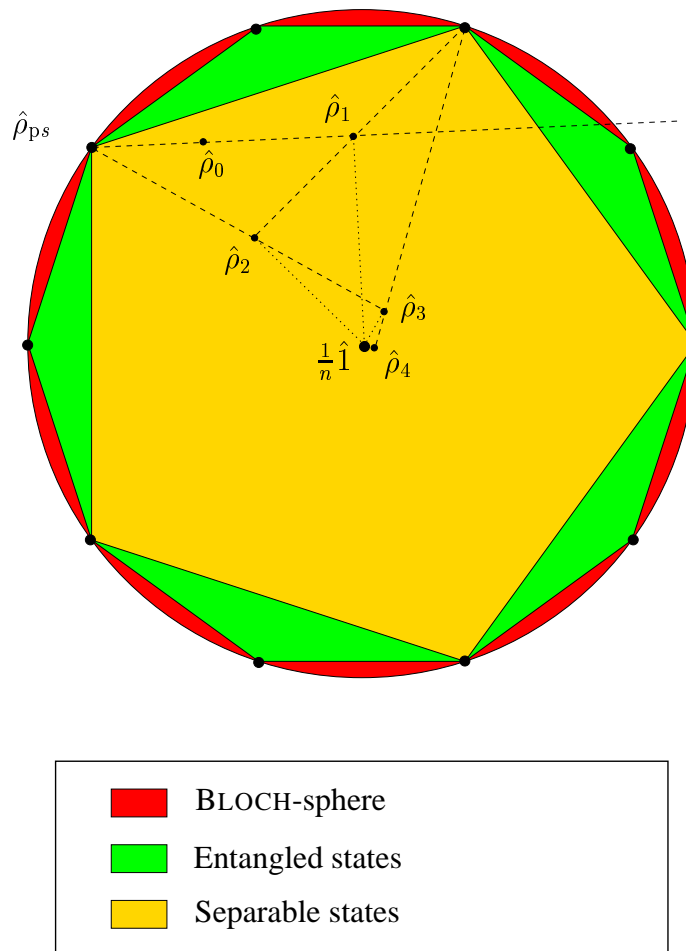


Figure 4.19: Geometrical interpretation of the recursive demixing method for a separable state  $\hat{\rho}_0$ , using the abstract picture of the quantum state space. With each subtraction of the nearest pure product state, the series  $\{\hat{\rho}_i\}$  approaches the completely mixed state  $\frac{1}{n}\hat{1}$ , finally converging.

The calculated pure product states  $\hat{\rho}_{ps_i}$  can be used to reconstruct the state  $\hat{\rho}_0$ ,

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_0 &= \sum_{i=1}^k p'_i \hat{\rho}_{ps_i} + p_R p_{\max} \frac{1}{n} \hat{1} + p_R (1 - p_{\max}) \hat{\rho}_R, \\ p'_i &= p_i \prod_{j=1}^{i-1} (1 - p_j), \quad p_R = \prod_{j=1}^k (1 - p_j), \quad p_{\max} = n \lambda_{\min}(\hat{\rho}_k), \\ \hat{\rho}_R &= \frac{1}{1 - p_{\max}} \left( \hat{\rho}_k - p_{\max} \frac{1}{n} \hat{1} \right),\end{aligned}\tag{4.100}$$

with  $p_{\max} \rightarrow 1$  in case of convergence.

It can be shown, that to be able to get closer to  $\frac{1}{n} \hat{1}$  in each iteration step  $\hat{\rho}_{i-1} \rightarrow \hat{\rho}_i$ , a pure product state  $\hat{\rho}_{ps_i}$  needs to be found, satisfying the condition

$$\text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{ps_i} \} > \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1}^2 \} .\tag{4.101}$$

**Theorem 46.** *The best possible approach to  $\frac{1}{n} \hat{1}$  in each iteration step is achieved, if  $\hat{\rho}_{ps_i}$  is chosen so, that*

$$\| \hat{\rho}_{i-1} - \hat{\rho}_{ps_i} \| = \min ,\tag{4.102}$$

and the subtraction factor equals

$$p_i = \frac{\text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{ps_i} \} - \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1}^2 \}}{1 - \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{i-1} \hat{\rho}_{ps_i} \}} .\tag{4.103}$$

These results can be found analytically or with the help of geometrical arguments. The difference between entangled and separable states exploited in the recursive demixing method is, that for a separable state, there always exists a nearest neighbour pure product state  $\hat{\rho}_{ps_i}$ , that leads to an approach to  $\frac{1}{n} \hat{1}$  if subtracted. For entangled states, this is not always the case. Only for fixpoints of the recurrence relation no approach is achieved. It can be proven, that no fixpoint except  $\frac{1}{n} \hat{1}$  exists *inside* the set of separable states (at the edge, others exist).

It is not guaranteed, that the state, after subtraction with this factor  $p_i$ , may not leave the separable state space. Otherwise the recursive demixing method would not only be a sufficient, but also a necessary separability criterion. Further examinations show, that for most separable states, the separable state space is not left.

As shown, the task of finding the nearest pure product state to a given density operator is the crucial step in the recursive demixing method. The following theorem tells how to achieve this:

**Theorem 47.** *Let  $|x\rangle$  ( $|y\rangle$ ) be a state of subsystem one (two) only:*

$$\begin{aligned}\max_{\hat{\rho}_{ps}} \text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{\rho}_{ps} \} &= \max_{|x\rangle} \lambda_{\max}(\hat{m}_2(\hat{\rho}, |x\rangle)) \\ &= \max_{|y\rangle} \lambda_{\max}(\hat{m}_1(\hat{\rho}, |y\rangle))\end{aligned}\tag{4.104}$$

The two matrices  $\hat{m}_1, \hat{m}_2$  are local operators defined according to

$$\begin{aligned}\hat{m}_1 &:= \hat{\rho}_{kb,cd} \bar{y}_b y_d |k\rangle \langle c|, \\ \hat{m}_2 &:= \hat{\rho}_{ak,cd} \bar{x}_a x_c |k\rangle \langle d|.\end{aligned}\tag{4.105}$$

Based on this theorem and a coupled eigenvalue equation of  $\hat{m}_1$  and  $\hat{m}_2$ , the nearest pure product state can be found by randomly choosing a starting value for  $|x\rangle$  and iteratively calculating the eigensystems of the matrices  $\hat{m}_1$  and  $\hat{m}_2$ . Besides this, in combination with theorem 44, all pure product states, that are subtractable from a given rank-reduced state  $\hat{\rho}$ , can be found using this theorem.

As an example of the recursive demixing method, figure 4.20 shows the convergence against the completely mixed state for a randomly chosen  $5 \times 3$  quantum state  $\hat{\rho}$ , herewith proofing its separability. For a complete convergence, around 500 iterations have been necessary. The blue area marks the range, in which the so far known, best, sufficient separability criteria work. As one can see, compared to the recursive demixing method, the existing criteria only work, if the distance to  $\frac{1}{n}\hat{1}$  is very small. The solid vertical line marks the iteration at  $i = 236$ , at which it was possible, to decompose  $\hat{\rho}$  into a convex linear combination of the calculated pure product states  $\hat{\rho}_{ps_i}$ . What is more, an algorithm was found, to reduce the number of pure product states necessary for the decomposition to only  $n^2$ . For this example, the result of the recursive demixing method is an exact decomposition of the  $5 \times 3$  quantum state  $\hat{\rho}$  in  $15^2 = 225$  pure product states.

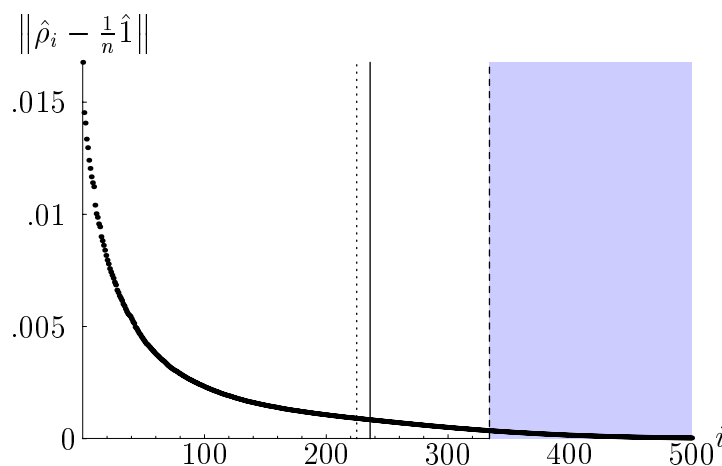


Figure 4.20: Example for proofing separability using the method of Recursive Demixing for a randomly chosen  $5 \times 3$  quantum system.

Further explicit examples include the decomposition of states belonging to the WERNER-state family and of rank reduced states lying at the edge of the overall state space.

The method of recursive demixing turns out to be a powerful tool in the examination of separability properties of quantum networks, not being restricted to  $n \leq 6$  and also applicable to systems with more than two subsystems.



# Anhang

## A. Grenz-WERNER-Zustand

Der Grenz-WERNER-Zustand  $\hat{\rho}_W(\frac{1}{3})$  läßt sich durch die folgenden 15 reinen Produktzustände darstellen.

$$\hat{\rho}_{ps1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\rho}_{ps2} = \begin{pmatrix} 0.200892 & 0.00394015 + 0.222864 i & 0.00393723 - 0.222866 i & 0.247318 - 3.27786 \cdot 10^{-6} i \\ 0.00394015 - 0.222864 i & 0.247316 & -0.247163 - 0.00873896 i & 0.00484707 - 0.274367 i \\ 0.00393723 + 0.222866 i & -0.247163 + 0.00873896 i & 0.24732 & 0.00485075 + 0.274369 i \\ 0.247318 + 3.27786 \cdot 10^{-6} i & 0.00484707 + 0.274367 i & 0.00485075 - 0.274369 i & 0.304473 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\rho}_{ps3} = \begin{pmatrix} 0.876095 & 0.161118 + 0.162867 i & 0.161115 - 0.162853 i & 0.0599043 + 1.86167 \cdot 10^{-6} i \\ 0.161118 - 0.162867 i & 0.0599075 & -0.000644628 - 0.0599008 i & 0.0110171 - 0.0111359 i \\ 0.161115 + 0.162853 i & -0.000644628 + 0.0599008 i & 0.0599011 & 0.0110161 + 0.0111356 i \\ 0.0599043 - 1.86167 \cdot 10^{-6} i & 0.0110171 + 0.0111359 i & 0.0110161 - 0.0111356 i & 0.00409604 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\rho}_{ps4} = \begin{pmatrix} 0.333275 & -0.28474 + 0.0158981 i & -0.284731 - 0.015901 i & 0.244025 + 2.85974 \cdot 10^{-6} i \\ -0.28474 - 0.0158981 i & 0.244032 & 0.242508 + 0.0271679 i & -0.208488 - 0.0116431 i \\ -0.284731 + 0.015901 i & 0.242508 - 0.0271679 i & 0.244018 & -0.208482 + 0.0116403 i \\ 0.244025 - 2.85974 \cdot 10^{-6} i & -0.208488 + 0.0116431 i & -0.208482 - 0.0116403 i & 0.178676 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\rho}_{ps5} = \begin{pmatrix} 0.259399 & 0.249912 - 0.0486754 i & 0.24992 + 0.0486718 i & 0.249913 - 5.03676 \cdot 10^{-6} i \\ 0.249912 + 0.0486754 i & 0.249906 & 0.231647 + 0.0937885 i & 0.240774 + 0.0468906 i \\ 0.24992 - 0.0486718 i & 0.231647 - 0.0937885 i & 0.24992 & 0.24078 - 0.0468968 i \\ 0.249913 + 5.03676 \cdot 10^{-6} i & 0.240774 - 0.0468906 i & 0.24078 + 0.0468968 i & 0.240774 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\rho}_{ps6} = \begin{pmatrix} 0.501461 & 0.00657081 - 0.321865 i & 0.0065706 + 0.321867 i & 0.206678 + 1.68008 \cdot 10^{-7} i \\ 0.00657081 + 0.321865 i & 0.206677 & -0.206506 + 0.0084349 i & 0.00270807 + 0.132657 i \\ 0.0065706 - 0.321867 i & -0.206506 - 0.0084349 i & 0.20668 & 0.00270819 - 0.132658 i \\ 0.206678 - 1.68008 \cdot 10^{-7} i & 0.00270807 - 0.132657 i & 0.00270819 + 0.132658 i & 0.0851829 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\rho}_{ps7} = \begin{pmatrix} 0.347014 & -0.164157 - 0.238857 i & -0.16415 + 0.238861 i & 0.242065 - 6.12619 \cdot 10^{-6} i \\ -0.164157 + 0.238857 i & 0.242065 & -0.0867608 - 0.225982 i & -0.114506 + 0.166621 i \\ -0.16415 - 0.238861 i & -0.0867608 + 0.225982 i & 0.242064 & -0.11451 - 0.166618 i \\ 0.242065 + 6.12619 \cdot 10^{-6} i & -0.114506 - 0.166621 i & -0.11451 + 0.166618 i & 0.168856 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\rho}_{ps8} = \begin{pmatrix} 0.0422823 & 0.0605655 - 0.0569082 i & 0.0605648 + 0.0569063 i & 0.163344 - 1.7385 \cdot 10^{-6} i \\ 0.0605655 + 0.0569082 i & 0.163348 & 0.0101626 + 0.163028 i & 0.233978 + 0.219844 i \\ 0.0605648 - 0.0569063 i & 0.0101626 - 0.163028 i & 0.163341 & 0.23397 - 0.219842 i \\ 0.163344 + 1.7385 \cdot 10^{-6} i & 0.233978 - 0.219844 i & 0.23397 + 0.219842 i & 0.631029 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\rho}_{ps9} = \begin{pmatrix} 0.398547 & -0.304017 - 0.0181171 i & -0.304053 + 0.0181109 i & 0.232759 + 6.39086 \cdot 10^{-6} i \\ -0.304017 + 0.0181171 i & 0.232731 & 0.231112 - 0.0276369 i & -0.177552 + 0.0105759 i \\ -0.304053 - 0.0181109 i & 0.231112 + 0.0276369 i & 0.232786 & -0.177572 - 0.010582 i \\ 0.232759 - 6.39086 \cdot 10^{-6} i & -0.177552 - 0.0105759 i & -0.177572 + 0.010582 i & 0.135936 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\rho}_{\text{ps10}} = \begin{pmatrix} 0.0169014 & -0.0402952 + 0.0169647 i & -0.0402966 - 0.0169681 i & 0.113104 + 6.88961 \cdot 10^{-6} i \\ -0.0402952 - 0.0169647 i & 0.113097 & 0.0790408 + 0.0809016 i & -0.269648 - 0.113544 i \\ -0.0402966 + 0.0169681 i & 0.0790408 - 0.0809016 i & 0.113111 & -0.269671 + 0.113534 i \\ 0.113104 - 6.88961 \cdot 10^{-6} i & -0.269648 + 0.113544 i & -0.269671 - 0.113534 i & 0.75689 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\rho}_{\text{ps11}} = \begin{pmatrix} 0.609713 & 0.0530072 + 0.318598 i & 0.05305 - 0.318668 i & 0.171128 + 0.0000163106 i \\ 0.0530072 - 0.318598 i & 0.171088 & -0.161904 - 0.0554249 i & 0.014886 - 0.0894196 i \\ 0.05305 + 0.318668 i & -0.161904 + 0.0554249 i & 0.171168 & 0.014881 + 0.0894419 i \\ 0.171128 - 0.0000163106 i & 0.014886 + 0.0894196 i & 0.014881 - 0.0894419 i & 0.0480305 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\rho}_{\text{ps12}} = \begin{pmatrix} 0.581669 & 0.232913 - 0.225986 i & 0.232795 + 0.225958 i & 0.181003 + 0.0000347131 i \\ 0.232913 + 0.225986 i & 0.181061 & 0.0054285 + 0.180922 i & 0.072464 + 0.0703358 i \\ 0.232795 - 0.225958 i & 0.0054285 - 0.180922 i & 0.180945 & 0.0724542 - 0.0702993 i \\ 0.181003 - 0.0000347131 i & 0.072464 - 0.0703358 i & 0.0724542 + 0.0702993 i & 0.0563243 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\rho}_{\text{ps13}} = \begin{pmatrix} 0.241848 & 0.0446702 + 0.241768 i & 0.0446829 - 0.24176 i & 0.249932 + 0.0000142284 i \\ 0.0446702 - 0.241768 i & 0.249939 & -0.233426 - 0.0893219 i & 0.0461776 - 0.249847 i \\ 0.0446829 + 0.24176 i & -0.233426 + 0.0893219 i & 0.249926 & 0.0461622 + 0.249843 i \\ 0.249932 - 0.0000142284 i & 0.0461776 + 0.249847 i & 0.0461622 - 0.249843 i & 0.258287 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\rho}_{\text{ps14}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\rho}_{\text{ps15}} = \begin{pmatrix} 0.0595601 & 0.0980691 + 0.0370196 i & 0.0980747 - 0.0370104 i & 0.184489 + 0.0000187202 i \\ 0.0980691 - 0.0370196 i & 0.184486 & 0.138482 - 0.121898 i & 0.303784 - 0.114639 i \\ 0.0980747 + 0.0370104 i & 0.138482 + 0.121898 i & 0.184493 & 0.303778 + 0.114672 i \\ 0.184489 - 0.0000187202 i & 0.303784 + 0.114639 i & 0.303778 - 0.114672 i & 0.571461 \end{pmatrix}$$

Die dazugehörigen Wahrscheinlichkeiten sind:

$$p_1 = 0.156286$$

$$p_2 = 0.143474$$

$$p_3 = 0.142376$$

$$p_4 = 0.137938$$

$$p_5 = 0.10798$$

$$p_6 = 0.0996696$$

$$p_7 = 0.0768447$$

$$p_8 = 0.0661426$$

$$p_9 = 0.0203871$$

$$p_{10} = 0.0170692$$

$$p_{11} = 0.0121009$$

$$p_{12} = 0.011319$$

$$p_{13} = 0.00333336$$

$$p_{14} = 0.00304878$$

$$p_{15} = 0.00203151$$

## B. Beispiel: $5 \times 3$ Zustand

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} 0.066581 & -0.000508596 + 0.00352988 i & -0.00332922 + 0.00254266 i \\ -0.000508596 - 0.00352988 i & 0.0631503 & -0.00194692 + 0.00563514 i \\ -0.00332922 - 0.00254266 i & -0.00194692 - 0.00563514 i & 0.0639976 \\ -0.0122488 + 0.00496021 i & 0.0153074 + 0.00649413 i & -0.00724585 + 0.0104275 i \\ -0.00105007 + 0.00626897 i & 0.0085114 - 0.00122239 i & -0.00570693 - 0.00247543 i \\ -0.00582075 + 0.0010324 i & 0.000767085 + 0.00662495 i & 0.00495864 - 0.00234613 i \\ 0.000201991 - 0.00571805 i & -0.00445422 - 0.00512694 i & 0.000933048 - 0.00479976 i \\ 0.0035891 - 0.00722956 i & 0.00525705 + 0.00334236 i & -0.0110932 - 0.00484774 i \\ -0.00903376 + 0.00153966 i & -0.00583369 - 0.00163502 i & 0.00626472 - 0.00703033 i \\ -0.00534181 + 0.000807529 i & 0.00943927 - 0.00118873 i & 0.00409826 - 0.00815352 i \\ -0.00403227 + 0.00411661 i & -0.00330133 + 0.00148433 i & -0.00637558 - 0.00515361 i \\ 0.00822107 + 0.00196755 i & -0.000420126 + 0.00115943 i & -0.00506809 + 0.00133937 i \\ -0.00292099 + 0.00834982 i & -0.000190792 - 0.000111118 i & -0.00160336 - 0.00627933 i \\ 0.00232214 + 0.00400465 i & 0.00263766 + 0.0091023 i & 0.00797355 - 0.00657137 i \\ -0.00754864 - 0.00700114 i & -0.00142062 + 0.00469092 i & 0.00147714 - 0.00221911 i \\ \\ -0.0122488 - 0.00496021 i & -0.00105007 - 0.00626897 i & -0.00582075 - 0.0010324 i & 0.000201991 + 0.00571805 i \\ 0.0153074 - 0.00649413 i & 0.0085114 + 0.00122239 i & 0.000767085 - 0.00662495 i & -0.00445422 + 0.00512694 i \\ -0.00724585 + 0.0104275 i & -0.00570693 + 0.00247543 i & 0.00495864 + 0.00234613 i & 0.000933048 + 0.00479976 i \\ 0.0901839 & 0.00988596 + 0.00715025 i & -0.00187082 + 0.000933672 i & -0.00429488 + 0.00532668 i \\ 0.00988596 - 0.00715025 i & 0.0673425 & -0.00816816 + 0.00580676 i & -0.00144207 + 0.00548296 i \\ -0.00187082 - 0.000933672 i & -0.00816816 - 0.00580676 i & 0.057887 & -0.00889946 - 0.00282986 i \\ -0.00429488 - 0.00532668 i & -0.00144207 - 0.00548296 i & -0.00889946 + 0.00282986 i & 0.063243 \\ 0.00305929 - 0.00712035 i & -0.00706503 + 0.00525626 i & -0.00513848 + 0.00343452 i & -0.00205719 + 0.000992418 i \\ 0.00296271 - 0.00923833 i & 0.000451224 + 0.00535624 i & 0.005615 - 0.00788046 i & -0.000442088 - 0.00564421 i \\ 0.000837526 + 0.0022214 i & -0.00266809 - 0.00178496 i & 0.00685665 - 0.00628186 i & -0.00355389 - 0.00211327 i \\ -0.00250174 - 0.0117201 i & -0.00199622 + 0.0117527 i & -0.00331911 + 0.0109829 i & -0.000566963 - 0.0111855 i \\ -0.00227203 + 0.00188535 i & -0.0107216 + 0.00204324 i & 0.0066292 + 0.004133 i & -0.000530401 - 0.00986889 i \\ 0.032577 - 0.00264373 i & 0.00111842 + 0.00474617 i & -0.00109776 - 0.00532254 i & -0.00105664 - 0.00891093 i \\ -0.0108769 - 0.0100109 i & -0.00415894 + 0.00280885 i & -0.000251772 - 0.00967085 i & -0.00985115 - 0.00286559 i \\ 0.0128419 + 0.00905596 i & 0.0101273 + 0.00610256 i & 0.000431364 + 0.00713411 i & -0.00275346 - 0.00641711 i \\ \\ 0.0035891 + 0.00722956 i & -0.00903376 - 0.00153966 i & -0.00534181 - 0.000807529 i & -0.00403227 - 0.00411661 i \\ 0.00525705 - 0.00334236 i & -0.00583369 + 0.00163502 i & 0.00943927 + 0.00118873 i & -0.00330133 - 0.00148433 i \\ -0.0110932 + 0.00484774 i & 0.00626472 + 0.00703033 i & 0.00409826 + 0.00815352 i & -0.00637558 + 0.00515361 i \\ 0.00305929 + 0.00712035 i & 0.00296271 + 0.00923833 i & 0.000837526 - 0.0022214 i & -0.00205719 + 0.0117201 i \\ -0.00706503 - 0.00525626 i & 0.000451224 - 0.00535624 i & -0.00266809 + 0.00178496 i & -0.00199622 - 0.0117527 i \\ -0.00513848 - 0.00343452 i & 0.005615 + 0.00788046 i & 0.00685665 + 0.00628186 i & -0.00331911 - 0.0109829 i \\ -0.00205719 - 0.000992418 i & -0.000442088 + 0.00564421 i & -0.00355389 + 0.00211327 i & -0.000566963 + 0.0111855 i \\ 0.0576954 & -0.00196392 + 0.00143834 i & 0.00381693 + 0.00769133 i & 0.00464278 + 0.000465637 i \\ -0.00196392 - 0.00143834 i & 0.0666212 & -0.00749979 + 0.000767152 i & 0.000178265 + 0.00511646 i \\ 0.00381693 - 0.00769133 i & -0.00749979 - 0.000767152 i & 0.0620367 & 0.00225912 + 0.00285059 i \\ 0.00464278 - 0.000465637 i & 0.000178265 - 0.00511646 i & 0.00225912 - 0.00285059 i & 0.064154 \\ 0.00396226 - 0.00375299 i & 0.00691292 - 0.00624027 i & 0.0000955634 - 0.00405204 i & 0.00299819 - 0.00461955 i \\ 0.00879782 + 0.00437831 i & 0.0115637 - 0.000993832 i & -0.00846891 + 0.00706933 i & 0.00883478 + 0.00662854 i \\ -0.000103226 + 0.00373975 i & 0.00218221 - 0.00816395 i & 0.00206785 - 0.00641147 i & 0.00273496 + 0.00319443 i \\ 0.00646206 + 0.00392073 i & 0.00120518 + 0.00164331 i & 0.00359539 + 0.00886028 i & -0.00831332 - 0.00403614 i \\ \\ 0.00822107 - 0.00196755 i & -0.00292099 - 0.00834982 i & 0.00232214 - 0.00400465 i & -0.00754864 + 0.00700114 i \\ -0.000420126 - 0.00115943 i & -0.000190792 + 0.000111118 i & 0.00263766 - 0.0091023 i & -0.00142062 - 0.00469092 i \\ -0.00506809 - 0.00133937 i & -0.00160336 + 0.00627933 i & 0.00797355 + 0.00657137 i & 0.00147714 + 0.00221911 i \\ -0.00227203 - 0.00188535 i & 0.032577 + 0.00264373 i & -0.0108769 + 0.0100109 i & 0.0128419 - 0.00905596 i \\ -0.0107216 - 0.00204324 i & 0.00111842 - 0.00474617 i & -0.00415894 - 0.00280885 i & 0.0101273 - 0.00610256 i \\ 0.0066292 - 0.004133 i & -0.00109776 + 0.00532254 i & -0.000251772 + 0.00967085 i & 0.000431364 - 0.00713411 i \\ -0.000530401 + 0.00986889 i & -0.00105664 + 0.00891093 i & -0.00985115 + 0.00286559 i & -0.00275346 + 0.00641711 i \\ 0.00396226 + 0.00375299 i & 0.00879782 - 0.00437831 i & -0.000103226 - 0.00373975 i & 0.00646206 - 0.00392073 i \\ 0.00691292 + 0.00624027 i & 0.0115637 + 0.000993832 i & 0.00218221 + 0.00816395 i & 0.00120518 - 0.00164331 i \\ 0.0000955634 + 0.00405204 i & -0.00846891 - 0.00706933 i & 0.00206785 + 0.00641147 i & 0.00359539 - 0.00886028 i \\ 0.00299819 + 0.00461955 i & 0.00883478 - 0.00662854 i & 0.00273496 - 0.00319443 i & -0.00831332 + 0.00403614 i \\ 0.0669996 & 0.00420623 - 0.0113595 i & 0.00394158 + 0.00309947 i & 0.00266635 + 0.00691926 i \\ 0.00420623 + 0.0113595 i & 0.081356 & 0.00394158 - 0.00309947 i & 0.00266635 - 0.00691926 i \\ 0.00394158 - 0.00309947 i & -0.00919553 - 0.0013281 i & -0.00919553 + 0.0013281 i & -0.00125445 + 0.00249556 i \\ 0.00266635 - 0.00691926 i & -0.00125445 - 0.00249556 i & 0.0674076 & 0.00317814 - 0.00114529 i \\ 0.00317814 + 0.00114529 i & & 0.0613443 & 0.0613443 \end{pmatrix}$$



# Literaturverzeichnis

- [1] M. Woodroffe, *Probability with Applications* (McGraw-Hill, 1975).
- [2] S. Skyora, *Quantum Theory and the Bayesian Inference Problem*, *J. Stat. Phys.* **11**, 17 (1974).
- [3] W. K. Wootters, *Random Quantum States*, *Foundations of Physics* **20**(11), 1365–1378 (1990).
- [4] K. Życzkowski und M. Kuś, *Random Unitary Matrices*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **27**, 4235–4245 (1994).
- [5] K. Życzkowski, P. Horodecki, M. Horodecki und R. Horodecki, *Dynamics of Quantum Entanglement*, quant-ph/0008115 (2000).
- [6] M. Poźniak, K. Życzkowski und M. Kuś, *Composed Ensembles of Random Unitary Matrices*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, 1059–1071 (1998).
- [7] F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos* (Springer-Verlag, Berlin 1991).
- [8] K. Życzkowski, P. Horodecki, A. Sanpera und M. Lewenstein, *Volume of the set of separable states*, *Phys. Rev. A* **58**(2), 883 (1998).
- [9] K. Życzkowski, *Volume of the set of separable states. II*, *Phys. Rev. A* **60**(5), 3496 (1999).
- [10] B. Schumacher, *Sending Entanglement Through Noisy Quantum Channels*, *Phys. Rev. A* **54**(4), 2614 (1996).
- [11] E. Lubkin, *Entropy of an  $n$ -system from its korrelation with a  $k$ -reservoir*, *J. Math. Phys.* **19**(5), 1028–1031 (1978).
- [12] S. Lloyd und H. Pagels, *Complexity as Thermodynamic Depth*, *Annals of Physics* **188**, 186–213 (1988).
- [13] K. Życzkowski und H. Sommers, *Induced Measures in the Space of Mixed Quantum States*, quant-ph/0012101 (2000).
- [14] J. Gemmer, A. Otte und G. Mahler, *Quantum Approach to a Derivation of the Second Law of Thermodynamics*, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1927 (2001).

- [15] K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications* (Plenum Press, New York and London 1981).
- [16] G. Mahler und V. A. Weberruß, *Quantum Networks: Dynamics of Open Nanostructures* (Springer-Verlag, Berlin 1995).
- [17] A. Otte und G. Mahler, *Adapted-Operator Representations: Selective versus Collective Properties of Quantum Networks*, Phys. Rev. A **62**, 012303 (2000).
- [18] A. Otte, *Physik und Quanteninformation - Darstellung, Symmetrie und Dynamik* (Universität Stuttgart, Diplomarbeit, 1998).
- [19] B. Kraus, J. I. Cirac, S. Karnas und M. Lewenstein, *Separability in  $2 \times N$  Composite Quantum Systems*, quant-ph/9912010 (2000).
- [20] [http://www.cs.ut.ee/~toomas\\_l/linalg/lin2/node11.html](http://www.cs.ut.ee/~toomas_l/linalg/lin2/node11.html).
- [21] <Http://Www.Cs.Brown.Edu/Research/Ai/Dynamics/Tutorial/Postscript/SingularValueDecomposition.Ps>.
- [22] M. Lewenstein und A. Sanpera, *Separability and Entanglement of Composite Quantum Systems*, Phys. Rev. Lett. **80**(11), 2261 (1998).
- [23] G. Mahler und A. Otte, *Nanoscopic Quantum Networks: Collective versus Selective Control*, ECCTD'99, Proceedings of the European Conf. on Circuit Theory and Design (ed. by C. Beccari, M. Biey, P. P. Civalleri, M. Gilli), Stresa (Italy) **II** (1999).
- [24] G. Mahler und A. Otte, *Exploring the Ultimate Limits of Control: Quantum Networks for Non-Classical Information Processing*, NATO ASI-Series E: Frontiers of nano-optoelectronic systems (ed. by L. Pavesi, E. V. Buzaneva), Kluwer Academics Publ.S. 431 (2000).
- [25] G. Mahler und A. Otte, *Nanoscopic Quantum Networks: Collective versus Selective Control*, Int. S. Circ. Theor. Appl. **29**, 93 (2001).
- [26] S. Karnas und M. Lewenstein, *Separable Approximations of Density Matrices of Composite Quantum Systems*, quant-ph/0011066 (2000).
- [27] A. Sanpera, R. Tarrach und G. Vidal, *Local Description of Quantum Inseparability*, Phys. Rev. A **58**(2), 826–830 (1998).
- [28] A. Sanpera, R. Tarrach und G. Vidal, *Quantum Separability, Time Reversal and Canonical Decompositions*, quant-ph/9707041 (1997).
- [29] R. B. Lockhart, *Optimal Ensemble Length of Mixed Separable States*, quant-ph/9908050 (1999).
- [30] P. Horodecki, *Separability Criterion and Inseparable Mixed States with Positive Partial Transposition*, Phys. Lett. A **232**, 333–339 (1997).

- 
- [31] V. Vedral, M. B. Plenio, M. A. Rippin und P. L. Knight, *Quantifying Entanglement*, Phys. Rev. Lett. **78**(12), 2275 (1997).
- [32] J. Schlienz, *Korrelationen und Invarianten in Gekoppelten Quantennetzwerken: Beschreibung im  $SU(n)$ -Formalismus*, Dissertation (Universität Stuttgart, 1997).
- [33] H. Araki und E. Lieb, *Entropy Inequalities*, Commun. Math. Phys. **18**, 160 (1970).
- [34] A. Peres, *Separability Criterion for Density Matrices*, Phys. Rev. Lett. **77**(8), 1413–1415 (1996).
- [35] M. Horodecki, P. Horodecki und R. Horodecki, *Separability of Mixed States: Necessary and Sufficient Conditions*, Phys. Lett. A **223**(1) (1996).
- [36] M. Horodecki, P. Horodecki und R. Horodecki, *Separability of Mixed States: Necessary and Sufficient Conditions*, quant-ph/9605038 (1996).
- [37] M. Lewenstein, D. Bruß, J. I. Cirac, B. Kraus, M. Kuś, J. Samsonowicz, A. Sanpera und R. Tarrach, *Separability and Distillability in Composite Quantum Systems - a Primer -*, quant-ph/0006064 (2000).
- [38] R. Horodecki und M. Horodecki, *Information-Theoretic Aspects of Inseparability of Mixed States*, Phys. Rev. A **54**(3), 1838–1843 (1996).
- [39] M. A. Nielsen und J. Kempe, *Separable States are More Disordered Globally Than Locally*, quant-ph/0011117 (2000).
- [40] D. Bruß und A. Peres, *Construction of Quantum States with Bound Entanglement*, Phys. Rev. A **61**, 030301 (2000).
- [41] M. Lewenstein, B. Kraus, P. Horodecki und J. I. Cirac, *Characterization of Separable States and Entanglement Witnesses*, quant-ph/0005112 (2000).
- [42] C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin und W. K. Wootters, *Mixed-State Entanglement and Quantum Error Correction*, Phys. Rev. A **54**, 3824 (1996).
- [43] M. Horodecki, P. Horodecki und R. Horodecki, *Mixed-State Entanglement and Distillation: Is There a "Bound" Entanglement in Nature?*, Phys. Rev. Lett. **80**, 5239 (1998).
- [44] J. S. Bell, *Physics* **1**, 195 (1964).
- [45] A. Aspect, J. Dalibard und G. Roger, *Experimental Tests of Realistic Local Theories Via Bell's Theorem*, Phys. Rev. Lett. **47**, 460–463 (1981).
- [46] A. Aspect, J. Dalibard und G. Roger, *Experimental Test of Bell's Inequalities Using Time-Varying Analyzers*, Phys. Rev. Lett. **49**, 1804 (1982).
- [47] N. Gisin, *Phys. Lett. A* **154**, 201 (1991).

- [48] M. Żukowski und Č. Brukner, *Bells's Theorem for General  $N$ -Qubit States*, quant-ph/0102039 (2001).
- [49] B. M. Terhal, *Bell Inequalities and the Separability Criterion*, Phys. Lett. A **271**, 319–326 (2000).
- [50] B. M. Terhal, *Bell Inequalities and the Separability Criterion*, quant-ph/9911057 (2000).
- [51] S. L. Braunstein, C. M. Caves, R. Jozsa, N. Linden, S. Popescu und R. Schack, *Separability of Very Noisy Mixed States and Implications for NMR Quantum Computing*, Phys. Rev. Lett. **83**(5), 1054–1057 (1999).
- [52] G. Vidal und R. Tarrach, *Robustness of entanglement*, Phys. Rev. A **59**, 141 (1999).
- [53] P. Horodecki, M. Lewenstein, G. Vidal und I. Cirac, *Operational Criterion and Constructive Checks for the Separability of Low-Rank Density Matrices*, Phys. Rev. A **62**, 032310 (2000).
- [54] A. O. Pittenger und M. H. Rubin, *Separability and Fourier representations of density matrices*, Phys. Rev. A **62**, 032313 (2000).
- [55] M. Lewenstein, B. Kraus, J. I. Cirac und P. Horodecki, *Optimization of Entanglement Witnesses*, quant-ph/0005014 (2000).
- [56] M. Horodecki, P. Horodecki und R. Horodecki, *Separability of  $n$ -Particle Mixed States: Necessary and Sufficient Conditions in Terms of Linear Maps*, Physics Letters A **283**, 1–7 (2001).
- [57] B. M. Terhal und P. Horodecki, *A Schmidt Number for Density Matrices*, quant-ph/9911117 (2000).
- [58] A. Sanpera, D. Bruß und M. Lewenstein, *Schmidt Number Witnesses and Bound Entanglement*, quant-ph/0009109 (2000).
- [59] M. Horodecki und P. Horodecki, *Reduction Criterion of Separability and Limits for a Class of Distillation Protocols*, Phys. Rev. A **59**(6), 4206 (1999).
- [60] S. Hill und W. K. Wootters, *Entanglement of a Pair of Quantum Bits*, Phys. Rev. Lett. **78**, 5022 (1997).
- [61] W. K. Wootters, *Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits*, Phys. Rev. Lett. **80**(10), 2245 (1998).
- [62] R. R. Tucci, *Relaxation Method for Calculating Quantum Entanglement*, quant-ph/0101123 (2001).
- [63] K. Audenaert, F. Verstraete und B. De Moor, *Variational Characterisations of Separability and Entanglement of Formation*, quant-ph/0006128 (2000).

- 
- [64] O. Rudolph, *A Separability Criterion for Density Operators*, quant-ph/0002026 (2000).
- [65] S. Wu, X. Chen und Y. Zhang, *A Necessary and Sufficient Criterion for Multipartite Separable States*, quant-ph/0006058 (2000).
- [66] P. Chen, L. Liang, C. Li und M. Huang, *Necessary and Sufficient Condition of Separability of Any System*, quant-ph/0102133 (2001).
- [67] T. Eggeling, K.G.H. Vollbrecht und M.M. Wolf, *Comment on: Necessary and Sufficient Condition of Separability of Any System*, quant-ph/0103003 (2001).
- [68] R. F. Werner, *Quantum States with Einstein-Podolsky-Rosen Correlations Admitting a Hidden-Variable Model*, Phys. Rev. A **40**, 4277 (1989).
- [69] A. Otte und G. Mahler, *Symmetry Considerations in Quantum Computing, Spin-Statistics Connection and Commutation Relations* (ed. by R. C. Hilborn and G. M. Tino), Am. Inst. Phys. **CP545**, 98 (2000).
- [70] A. O. Pittenger und M. H. Rubin, *Note on Separability of the Werner States in Arbitrary Dimensions*, quant-ph/0001110 (2000).
- [71] F. Verstraete, K. Audenaert und B. De Moor, *Maximally Entangled Mixed States of Two Qubits*, quant-ph/0011110 (2000).
- [72] S. Karnas und M. Lewenstein, *Separability and Entanglement in  $\mathcal{C}^2 \otimes \mathcal{C}^2 \otimes \mathcal{C}^N$  Composite Quantum Systems*, quant-ph/0102115 (2001).
- [73] D. N. Page, *Average Entropy of a Subsystem*, Phys. Rev. Lett. **71**(9), 1291 (1993).
- [74] S. Sen, *Average Entropy of a Quantum Subsystem*, Phys. Rev. Lett. **77**(1) (1996).
- [75] K. R. W. Jones, *Entropy of random quantum states*, Journal of Physics A: Mathematical and General **23**(23), L1247–L1251 (1990).
- [76] R. B. Lockhart, M. J. Steiner und K. Gerlach, *Geometry and Product States*, quant-ph/0010013 (2000).
- [77] A. Strzeboński, *Symbolic Solving of Systems of Real Algebraic Equations and Inequalities with Mathematica*, <http://netlab.lmcc.fju.edu.tw/4rd/PapersPdf/Camara%201092.pdf> (2000).
- [78] P. Deuar, W. J. Munro und K. Nemoto, *Upper Bound on the Region of Separable States Near the Maximally Mixed State*, quant-ph/0002002 (2000).



# Symbolverzeichnis

Symbol	Bedeutung
$\exists$	Es existiert
$\forall$	Für alle
$\langle x \rangle$	Mittelwert von $x$
$ x $	Betrag von $x$
$\bar{x}$	$x$ komplex konjugiert
$\ \hat{a}\ $	HILBERT-SCHMIDT-Norm des Operators $\hat{a}$
$\hat{\rho}^\dagger$	$\hat{\rho}$ hermitesch konjugiert
$\hat{\rho}^{T_i}$	Subsystem $i$ partiell Transponierte von $\hat{\rho}$
$\dim(x)$	Dimension von $x$
$E(\hat{\rho})$	Verschränkung von $\hat{\rho}$
$K(\hat{\rho})$	Kern von $\hat{\rho}$
$\hat{K}$	Korrelationstensor
$\vec{\lambda}$	BLOCHvektor
$\hat{\lambda}_i$	$i$ -ter Generator der $SU(n)$ Gruppe
$\lambda_{\max}(\hat{\rho})$	Größter Eigenwert von $\hat{\rho}$
$\lambda_{\min}(\hat{\rho})$	Kleinster Eigenwert von $\hat{\rho}$
$L$	BLOCHvektorlänge
$\mathbb{L}$	LIUVILLERAUM
$\mu$	Mittelwert
$\hat{M}$	Verschränkungstensor
$n$	Dimension des Gesamt-HILBERTRaums
$n_i$	Dimension des $i$ -ten Subsystems
$N$	Anzahl der Subsysteme
$p_{\max}$	Maximaler Subtraktionsfaktor
$P_x$	Wahrscheinlichkeitsverteilung von $x$
$P(\hat{\rho})$	Reinheit von $\hat{\rho}$
$\hat{P}$	Projektionsoperator
$\hat{P}^{(i)}$	Projektionsoperator des $i$ -ten Subsystems
$\hat{\rho}$	Dichtematrix
$\hat{\rho}_F$	Fixpunkt Dichtematrix
$\hat{\rho}_p$	Reine Dichtematrix
$\hat{\rho}_{ps}$	Reine, separable Dichtematrix
$\hat{\rho}_s$	Separable Dichtematrix
$\hat{\rho}_v$	Verschränkte Dichtematrix
$\hat{\rho}_W$	WERNER-Zustand
$\hat{\rho}^{(i)}$	Reduzierte Dichtematrix des $i$ -ten Subsystems
$r(\hat{\rho})$	Rang von $\hat{\rho}$
$R(\hat{\rho})$	Wertebereich von $\hat{\rho}$
$R_s(\hat{\rho})$	Separabler Wertebereich von $\hat{\rho}$
$\sigma$	Standardabweichung
$S(\hat{\rho})$	VON NEUMANN Entropie von $\hat{\rho}$
$S^{(i)}(\hat{\rho})$	VON NEUMANN Entropie des $i$ -ten Subsystems von $\hat{\rho}$
$\text{Tr}\{\hat{\rho}\}$	Spur von $\hat{\rho}$
$\text{Tr}^{(i)}\{\hat{\rho}\}$	Partielle Spur von $\hat{\rho}$ über das $i$ -te Subsystem
$\hat{U}$	Unitäre Transformation

# Index

- Abstandsmaß, 29
- Addition von Zuständen, 31
  - separabel – separabel, 46
  - verschränkt – separabel, 47
  - verschränkt – verschränkt, 47
- BELLSche Ungleichung, 60
- BLOCHvektor-Beschreibung, 27
- BLOCHvektorlänge, 12
- CAUCHY-SCHWARZsche Ungl. , 30
- Destillations-Verschränkung, 60
- Diagonalzustände, 51
- Dichtematrix-Beschreibung, 25
- Dreiecksungleichung, 29
- Eigenwert-Kriterium, 59, 64
- Eigenwertverteilung, 21
- Einbettung, 19
- Entropie, 56, 70
- Entropie-Kriterium, 58
- EPR-Zustand, 19, 44
- Erzeugungs-Verschränkung, 67
- EULER-Winkel, 16
- Extremalkriterium, 42
- Fixpunkt, 88
- Gaußverteilung, 10, 12
- Geometrische Eigenschaften
  - des separablen Zustandsraums, 48
  - des Zustandsraums, 31
- Gleichverteilung, 9
  - gemischter Zustände, 18
  - reiner Zustände, 11
- HILBERT-SCHMIDT-Norm, 21, 29
- HILBERTraum, 9
- HURWITZ-Parametrisierung, 16
- Information, 25
- Kern, 36
- Kompaktheit, 32
- konvexe Linearkombination, 31
- konvexer Zustandsraum, 32
- Korrelationstensor-Kriterium, 64
- normierte Zustandsparameter, 14
- positiv semidefinit, 26
- PPT-Kriterium, 57
- Quantennetzwerk, 44
- Rand des Zustandsraums, 32
- Randzustand, 104
- rangreduzierte Zustände, 32
- Reinheitsverteilung, 21
- Rekursive Entmischung, 75
- Satz von Carathéodory, 50
- Separabilität, 44
- Separabilitätskriterien, 55
- Separabilitätskriterien
  - allgemeine, nicht operable, 65
  - gemischter Zustände, 56
  - großer Systeme, 70
  - hinreichende, 61
  - notwendige, 56
  - reiner Zustände, 55
  - spezieller Zustandsklassen, 69
- Skalarprodukt, 29
- Spektralzerlegung, 19
- Spur-Kriterium, 58
- Subtraktion, 37
  - beliebiger, gemischter Zustände, 37
  - des maximal gemischten Zustands, 40
  - geometrische Deutung, 40
  - reiner Zustände, 38

- SU( $n$ )-Generatoren, 27
- Verschränkung, 44
- Verschränkungs-Operator, 65
- vollständig positive Abbildung, 66
- Wahrscheinlichkeitsverteilung, 9
- WERNER-Zustände, 69, 100
- Wertebereich, 34
- Wertebereich-Kriterium, 59
- zentraler Grenzwertsatz, 10
- Zerlegung
  - in reine Produktzustände, 45
  - in reine Zustände, 31
- zufälliger Quantenzustand, 9
- Zufallsmatrix
  - hermitesch, 18
  - unitär, 16
- Zufallsmethode, 64
- Zustand
  - gemischter, 26
  - reiner, 26
- Zustandsraum, 25



# Danksagung

Wirkliche Wissenschaft kann nur in einer kreativen Umgebung stattfinden. Alle Leute in meinem Umfeld sind deshalb eng mit der Entstehung dieser Arbeit verbunden.

Prof. Dr. G. Mahler hat mit seiner Art der Betreuung und seiner Offenheit gegenüber auch unkonventionellen Betrachtungen in der Physik einen sehr großen Anteil am Gelingen dieser Arbeit. Für viele Anregungen, Diskussionen und den nicht selbstverständlichen, kreativen Freiheiten möchte ich mich sehr bei ihm bedanken.

Apl. Prof. Dr. R. Friedrich danke ich für die freundliche Übernahme des Mitberichts und auch für interessante Gespräche.

Prof. Dr. Dr. h.c. mult. H. Haken und Prof. Dr. G. Wunner danke ich für die freundliche Aufnahme an das Institut und die gute Institutsausstattung.

Dr. J. Schlienz, M. Karremann und T. Wahl danke ich für die gute Atmosphäre im Zimmer, interessanten Anregungen, viel heißen Dampf und mancher Unterhaltung.

Dr. C. Granzow, Dr. R. Wawer, Dr. E. Binder, D. Preisser, A. Hamm und K. Böhringer danke ich für viele schöne Stunden am Institut.

J. Gemmer, M. Stollsteimer, F. Tonner und allen anderen Institutskollegen danke ich für viele Gespräche und die gute Stimmung.

T. Bartsch und PD Dr. J. Main danke ich für interessante Diskussionen zur Mittagszeit.

Der DFG danke ich für finanzielle Unterstützung im Rahmen des Schwerpunkts QIV.

Meinen Eltern und meinen Freunden danke ich für die vielfältige Unterstützung und viel Spaß.

Meiner Freundin Heike gilt mein besonderer Dank für viele liebevolle Tage.