

Запутанность в альтернированных открытых цепочках ядерных спинов $s = 1/2$ с XY-гамильтонианом

С. И. Доронин, А. Н. Пырков¹⁾, Э. Б. Фельдман

Институт проблем химической физики РАН
142432 Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 29 марта 2007 г.

После переработки 16 апреля 2007 г.

Изучена запутанность в открытой альтернированной цепочке ядерных спинов ($s = 1/2$), связанных спин-спиновыми взаимодействиями (ССВ), во внешнем магнитном поле в состоянии термодинамического равновесия. Вычислена редуцированная матрица плотности произвольно выбранной спиновой пары. Запутанность спиновой пары оценена согласно критерию Вуттерса. Найдена температура, при которой в выбранной паре возникает запутанное состояние. Показано, что количественные характеристики запутанности имеют осциллирующий характер в зависимости от положения спиновой пары в цепочке.

PACS: 03.67.Mn, 75.10.Jm

1. Введение. Исследование запутанности в квантово-механических системах получило широкое развитие в связи с работами по созданию квантовых компьютеров [1]. Запутанные состояния являются основным ресурсом квантового компьютера [1], позволяющим решать задачи, недоступные классическим компьютерам. Поэтому изучение запутанных состояний в многочастичных системах помимо теоретического интереса к основам квантовой механики приобрело и практическое содержание. Такое изучение удается провести только в сравнительно простых случаях, когда можно точно диагонализировать гамильтониан многочастичной системы.

На основе классических методов диагонализации гамильтонианов одномерных систем спинов ($s = 1/2$), связанных спин-спиновыми взаимодействиями (ССВ) [2, 3], были получены интересные результаты о запутанности в спиновых кольцах, бесконечных и конечных однородных открытых цепочках [4–8]. Однако в однородных моделях невозможно организовать адресацию кубитов, которая становится возможной в неоднородных системах при использовании различных ларморовых частот у разных спинов цепочки (кольца).

Недавно был диагонализирован XY-гамильтониан открытой альтернированной цепочки спинов ($s = 1/2$) [9, 10], а затем удалось на основе обобщения метода [9] диагонализировать гамильтониан в открытой цепочке с периодически изменяющимися константами ССВ и ларморовыми частотами [11]. Появилась возможность рассмотреть такую цепочку как

модельный квантовый регистр с адресацией кубитов. Другим достоинством такого регистра является возможность надежной передачи квантового состояния (кубита) с одного конца цепочки на другой в цепочках большей длины, чем в однородной цепочке [10, 12].

Для выяснения вопроса о применимости альтернированной открытой цепочки в качестве модельного квантового регистра мы исследуем запутанность произвольной пары ближайших соседей, когда по остальным спином цепочки, рассматриваемым как окружение, производится усреднение матрицы плотности системы, находящейся в состоянии термодинамического равновесия. Такое исследование можно провести для любой двухкубитной системы, используя критерий Вуттерса [13].

В разд.2 этого письма мы формулируем модель квантового регистра и получаем выражение для редуцированной матрицы плотности произвольной пары ближайших соседей в открытой альтернированной цепочке. Определение согласованности, используемой в качестве меры запутанности, приведено в разд.3. В разд.4 численно исследуется зависимость запутанности от температуры, длины цепочки, удаленности пары спинов от концов цепочки и отношения констант ССВ.

2. Модель квантового регистра и редуцированная матрица плотности. Рассмотрим конечную открытую альтернированную цепочку спинов ($s = 1/2$), описываемую XY-гамильтонианом, в сильном внешнем магнитном поле. Гамильтониан этой системы имеет вид:

¹⁾e-mail: pyrkov@icp.ac.ru

$$H = \sum_{n=1}^N \omega_n I_{nz} + \sum_{n=1}^{N-1} D_{n,n+1} (I_{n,x} I_{n+1,x} + I_{n,y} I_{n+1,y}). \quad (1)$$

где $I_{n\alpha}$ – проекция оператора углового момента спина n на ось α ($\alpha = x, y, z$), N – число спинов в цепочке, ларморова частота ω_n равна ω_1 при нечетном n и ω_2 при четном, константа ССВ $D_{n,n+1}$ равна D_1 при нечетном n и D_2 при четном. В дальнейших вычислениях используются результаты [9, 14], полученные при точной диагонализации гамильтониана (1).

Мы предполагаем, что описываемая система находится в состоянии термодинамического равновесия с матрицей плотности

$$\rho = e^{-\beta H} / Z, \quad (2)$$

где $\beta = \hbar/kT$, T – температура и $Z = \text{Tr}\{e^{-\beta H}\}$ – статистическая сумма. Рассматриваемый квантовый регистр определяется описанной альтернированной цепочкой во внешнем магнитном поле в состоянии термодинамического равновесия. Матрица плотности (2) может быть записана в следующем виде:

$$\rho = \sum_{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N=0}^3 \alpha_{12\dots N}^{\xi_1 \xi_2 \dots \xi_N} x_1^{\xi_1} \otimes \dots \otimes x_N^{\xi_N}, \quad (3)$$

где ξ_k ($k = 1, 2, \dots, N$) – одно из значений $\{0, 1, 2, 3\}$, $x_k^0 = I_k$ – единичная матрица размерности 2×2 , $x_k^1 = I_{kx}$, $x_k^2 = I_{ky}$, $x_k^3 = I_{kz}$ и $\alpha_{12\dots N}^{\xi_1 \xi_2 \dots \xi_N}$ – численный коэффициент. При исследовании запутанных состояний пары спинов (кубитов) i, j в квантовом регистре, остальные спины будут рассматриваться как окружение. Усредняя матрицу плотности (3) по окружению и учитывая, что $\text{Tr}\{x_k^{\xi_k}\} = 0$ ($k = 1, 2, \dots, N$; $\xi_k = 1, 2, 3$), получим для редуцированной матрицы плотности $\rho^{(ij)}$ спинов i, j следующее выражение:

$$\rho^{(ij)} = \sum_{\xi_i, \xi_j=0}^3 \alpha_{ij}^{\xi_i \xi_j} x_i^{\xi_i} \otimes x_j^{\xi_j}, \quad (4)$$

где коэффициенты $\alpha_{ij}^{\xi_i \xi_j}$ равны

$$\alpha_{ij}^{\xi_i \xi_j} = \frac{2^{N-2} \text{Tr}\{\rho x_i^{\xi_i} x_j^{\xi_j}\}}{\text{Tr}\{(x_i^{\xi_i})^2 (x_j^{\xi_j})^2\}}. \quad (5)$$

В формулах (3), (4) матрицы плотности нормированы на единицу. Поскольку $[H, I_z] = 0$, нетрудно найти, что

$$\alpha_{ij}^{01} = \alpha_{ij}^{10} = \alpha_{ij}^{02} = \alpha_{ij}^{20} = 0, \quad (6)$$

$$\alpha_{ij}^{13} = \alpha_{ij}^{23} = \alpha_{ij}^{31} = \alpha_{ij}^{32} = 0.$$

Из соображений симметрии вытекает, что $\alpha_{ij}^{12} = 4\text{Tr}\{\rho I_{ix} I_{jy}\} = 0$, $\alpha_{ij}^{21} = 4\text{Tr}\{\rho I_{iy} I_{jx}\} = 0$, и $\alpha_{ij}^{11} = 4\text{Tr}\{\rho I_{ix} I_{jx}\} = 4\text{Tr}\{\rho I_{iy} I_{jy}\} = \alpha_{ij}^{22}$. В результате редуцированную матрицу плотности $\rho^{(ij)}$ можно записать в виде

$$\rho^{(ij)} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & x & 0 \\ 0 & x & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где $a = 1/4 + \alpha_{ij}^{03}/2 + \alpha_{ij}^{30}/2 + \alpha_{ij}^{33}/4$, $b = 1/4 - \alpha_{ij}^{03}/2 + \alpha_{ij}^{30}/2 - \alpha_{ij}^{33}/4$, $c = 1/4 + \alpha_{ij}^{03}/2 - \alpha_{ij}^{30}/2 - \alpha_{ij}^{33}/4$, $d = 1/4 - \alpha_{ij}^{03}/2 - \alpha_{ij}^{30}/2 + \alpha_{ij}^{33}/4$ и $x = \alpha_{ij}^{11}/2$. Точные выражения для однофермионных энергий и собственных векторов [9, 14] позволяют получить матричные элементы $\rho^{(ij)}$ как функции температуры, длины цепочки, положения спинов и отношения констант ССВ. В этом письме мы не приводим громоздких выражений для этих матричных элементов.

3. Мера запутанности. Для системы, описываемой волновой функцией ψ и состоящей из двух кубитов (подсистем) A и B , запутанность количественно определяется с помощью энтропии [15]

$$E(\psi) = -\text{Tr}(\rho_A \log_2 \rho_A) = -\text{Tr}(\rho_B \log_2 \rho_B),$$

где редуцированная матрица плотности ρ_A (ρ_B) подсистемы A (B) определяется следом проектора $|\psi\rangle\langle\psi|$, взятом по соответствующей подсистеме B (A).

Представим себе простейшее сепарабельное состояние двух спинов, описываемое волновой функцией ψ , когда они ориентированы параллельно магнитному полю, направленному вдоль оси z . При инверсии двух спинов с помощью матрицы Паули $\sigma_y = 2I_y$ волновая функция $\bar{\psi} = (\sigma_y \otimes \sigma_y)\psi$ ортогональна ψ , то есть $(\bar{\psi}, \psi) = 0$. В то же время максимально запутанное состояние двух спинов при инверсии с точностью до знака переходит в себя, то есть $|(\bar{\psi}, \psi)| = 1$. Можно показать [15], что запутанность E определяется как шеноновская энтропия функции согласованности $C(\psi) = |(\bar{\psi}, \psi)|$:

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

где

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

и согласованность может быть использована как количественная мера запутанности двухкубитной системы. При этом сепарабельному состоянию соответствует $C = 0$, а максимально запутанному $C = 1$

($0 \leq C \leq 1$). Этот подход обобщен в [13] для произвольной двухкубитной системы. Пусть пара кубитов A и B описывается матрицей плотности ρ_{AB} . Тогда “инвертированная” матрица плотности $\tilde{\rho}_{AB}$ определяется следующим образом:

$$\tilde{\rho}_{AB} = (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho_{AB}^* (\sigma_y \otimes \sigma_y), \quad (8)$$

где “звездочка” обозначает комплексное сопряжение, и матричные представления $\rho_{AB}, \tilde{\rho}_{AB}$ рассматриваются в стандартном базисе $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$. Согласованность двухкубитной системы с матрицей плотности ρ_{AB} равна [13]

$$C_{AB} = \max\{0, 2\lambda - \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\} \quad (9)$$

$$\lambda = \max\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4\},$$

где $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$, и λ_4 – квадратные корни из собственных чисел произведения матриц $\rho_{AB} \tilde{\rho}_{AB}$. Хотя это произведение неэрмитово, оно имеет действительные и неотрицательные собственные значения [16].

Используя (7), можно найти, что

$$\lambda_1 = \lambda_4 = \sqrt{ad}, \quad \lambda_{2,3} = |x \pm \sqrt{bc}|. \quad (10)$$

Выражения (10) содержат всю информацию, необходимую для анализа запутанности пары спинов в открытых альтернированных цепочках.

4. Запутанные состояния спиновых пар.

Из выражений (9), (10) следует, что запутанные состояния спиновой пары возникают только при $\alpha_{ij}^{11} \neq 0$, когда в системе существуют поперечные спиновые корреляции ($\langle I_{ix} I_{jx} \rangle = \text{Tr}(\rho I_{ix} I_{jx}) \neq 0$). Численные расчеты, проведенные для девятиспиновой открытой неоднородной цепочки при учете ССВ удаленных спинов, показали, что даже в этом случае запутанность возникает только между ближайшими соседями. Ниже мы остановимся на запутанности ближайших соседей в открытых альтернированных цепочках с XY -гамильтонианом при нулевых ларморовых частотах.

На рис.1 показана зависимость согласованности первого и второго спинов от температуры. Запутанность возникает при $\beta D_1 \approx 1$, то есть при $T \approx 0.5$ мК когда $D_1 \approx 2\pi \cdot 10^4$ с⁻¹. Температура, при которой появляется запутанность в парах ближайших спинов, зависит от отношения констант ССВ, длины цепочки и удаленности спиновой пары от концов цепочки. Отметим, что именно при микрокельвиновых температурах в монокристалле CaF₂ наблюдались упорядоченные состояния ядерных спинов [17].

Численные расчеты (рис.2а) показывают, что согласованность, количественно характеризующая пар-

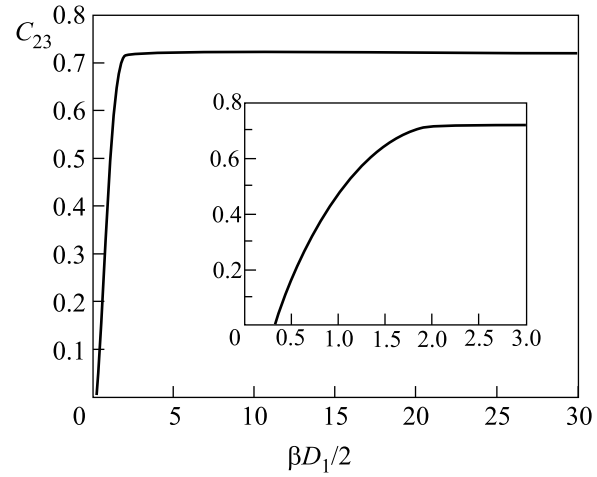


Рис.1. Зависимость согласованности спинов 2 и 3 от температуры в цепочке, состоящей из $N = 101$ спинов и $D_2/D_1 = 1.5$. На вставке показана зависимость согласованности от температуры в большем масштабе

ную запутанность, осциллирует. Качественное объяснение этих осцилляций состоит в следующем. Кубиты 1 и N находятся на концах цепочки. Поскольку ненулевой запутанностью обладают только ближайшие соседи, пара спинов 1 и 2 и пара спинов $N - 1$ и N имеют максимальную запутанность в однородной цепочке. Спин 2 может быть запутан как со спином 1, так и со спином 3. Поскольку спин 2 сильно запутан со спином 1, запутанность спинов 2 и 3 слабее. В результате спин 3 сильно запутан со спином 4 и т.д. Осцилляции затухают, когда спиновая пара удаляется от концов цепочки.

Осцилляции согласованности не затухают при удалении пары от концов альтернированной цепочки (рис.2b,c). Осцилляции согласованности, при которых она изменяется от нуля почти до единицы, происходят из-за различия констант ССВ в альтернированной цепочке. Зависимость согласованности от отношения констант ССВ представлена на рис.3. С ростом отношения D_2/D_1 согласованность пары спинов с меньшей константой ССВ убывает, а согласованность пары спинов с большей константой ССВ возрастает. Фактически получается димеризованная спиновая цепочка, которая качественно может рассматриваться как система невзаимодействующих спиновых пар при $D_2/D_1 \geq 2$.

Зависимость согласованности C_{12} спинов 1 и 2 от температуры для однородных цепочек разной длины дана на рис.4. Для небольших цепочек (небольших N) согласованность C_{12} возрастает при увеличении длины цепочки, когда N остается нечетным, и убывает при четных N . Простой анализ показывает, что

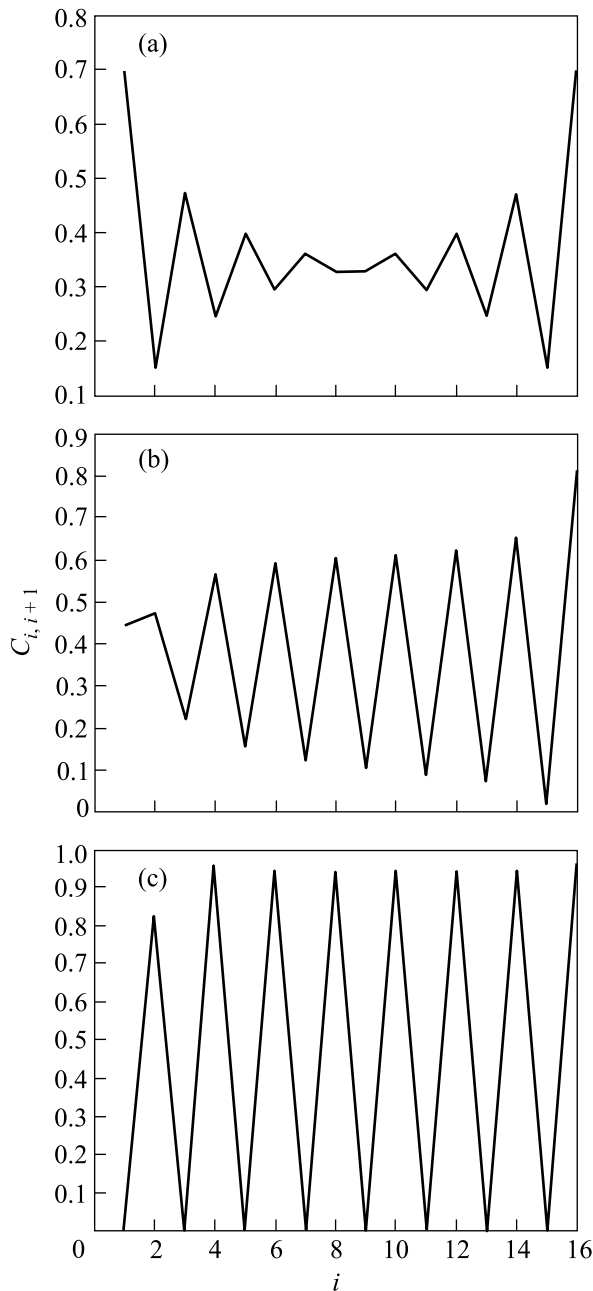


Рис.2. Зависимость согласованности от положения пары спинов $i, i+1$ внутри цепочки при $N = 17$, $\beta D_1/2 = 30$ для различных значений отношения констант ССВ. (а) $D_2/D_1 = 1$; (б) $D_2/D_1 = 1.17$; (с) $D_2/D_1 = 3$

это различие обусловлено влиянием удаленного конца цепочки на согласованность C_{12} . При увеличении N этот эффект исчезает. Для согласованности C_{23} спинов 2 и 3 наблюдается обратная ситуация, которая также объясняется влиянием удаленного конца цепочки. При переходе к альтернированной цепочке при увеличении отношения констант ССВ D_2/D_1 влияние эффекта димеризации цепочки доминирует

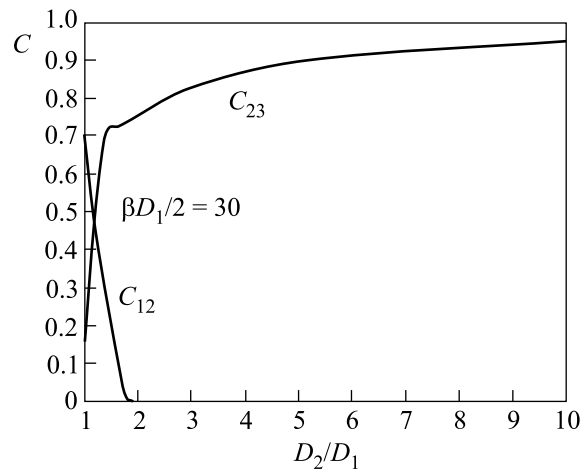


Рис.3. Зависимость согласованностей пар спинов 1, 2 и 2, 3 от отношения констант ССВ для цепочки из $N = 55$ спинов и $\beta D_1/2 = 30$

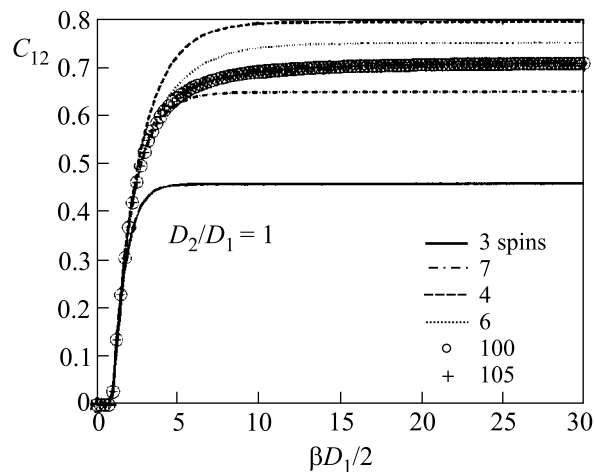


Рис.4. Зависимость согласованности спинов 1 и 2 от температуры при $N = 3, 4, 6, 7, 100, 105$. Поведение согласованности C_{12} разное для цепочек с четным и нечетным числом спинов

по сравнению с влиянием удаленного конца цепочки, и поведение запутанности не зависит от четности и нечетности числа спинов в цепочке.

5. Заключение. Мы исследовали запутанность в открытых альтернированных цепочках. Развитые методы точной диагонализации открытых альтернированных спиновых цепочек позволяют изучать запутанность спиновых пар при различных параметрах системы и разных температурах цепочки.

Аналогичные методы могут быть применены для исследования парной запутанности в более сложных моделях открытых цепочек с периодически меняющимися константами ССВ [11]. Методы точной диагонализации в таких цепочках [11] полезны для раз-

личных задач квантовой теории информации, решаемых с помощью модельных квантовых регистров, когда введена адресация кубитов. Для реализации адресации кубитов необходимо, чтобы разность ларморовых частот различных спинов существенно превосходила константы ССВ. При этом замедляются флип-флоп процессы, ответственные за формирование запутанных состояний, и вопросы эффективности таких квантовых регистров требуют дополнительных исследований.

Авторы благодарны Д.Э. Фельдману, А.К. Хитри-ну, Д.-С. Ли за стимулирующие дискуссии. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 07-07-00048).

1. M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press, 2000.
2. E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, *Ann. Phys. (N.Y.)* **16**, 407 (1961).
3. H. V. Cruz and L. L. Gonsalves, *J. Phys. C* **14**, 2785 (1981).
4. K. M. O'Connor and W. K. Wootters, *Phys. Rev. A* **63**, 052302 (2001).
5. L. Amico, A. Osterloh, F. Plastina et al., *Phys. Rev. A* **69**, 022304 (2004).
6. T. J. Osborne and M. A. Nielsen, *Phys. Rev. A* **66**, 032110 (2002).
7. F. Meier, J. Levy, and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 047901 (2003).
8. X. Wang, *Phys. Rev. E* **69**, 066118 (2004).
9. Э. Б. Фельдман, М. Г. Рудавец, *Письма в ЖЭТФ* **81**, 54 (2005).
10. Е. И. Кузнецова, Э. Б. Фельдман, *ЖЭТФ* **129**, 1006 (2006).
11. K. E. Feldman, *J. Phys. A: Math. Gen* **39**, 1039 (2006).
12. M. Christandl, N. Datta, A. Ekert, and A. J. Landahl, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 187902 (2004).
13. W. K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2245 (1998).
14. E. B. Fel'dman, R. Brüscheiler, and R. R. Ernst, *Chem. Phys. Lett.* **294**, 297 (1998).
15. C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin, and W. K. Wootters, *Phys. Rev. A* **54**, 3824 (1996).
16. Р. Хорн, Ч. Джонсон, *Матричный анализ*, М.: Мир, 1989.
17. А. Абрагам, М. Гольдман, *Ядерный магнетизм: порядок и беспорядок*, М.: Мир, 1984.