

锂原子系统的量子相变与量子纠缠

司黎明^{①*}, 侯吉旋^②

① 北京理工大学信息科技学院电子工程系, 北京 100081;

② 法国里昂高师化学系, 法国里昂 F-69364

* E-mail: siliming100@yahoo.com.cn

收稿日期: 2007-11-18; 接受日期: 2008-02-22

摘要 运用矩阵对角化的方法研究了锂 6 原子系统中的量子相变和量子纠缠. 通过计算该量子系统的冯诺依曼熵发现纠缠度与量子相变存在关联. 计算结果表明, 量子纠缠只存在于量子相变之前, 当磁场超过相变临界点, 纠缠现象随即消失.

关键词

量子相变

纠缠

冯诺依曼熵

量子相变一般是指量子系统在外加磁场或压力的影响下产生的相变^[1]. 这种发生在绝对零度下的多体量子系统里的现象, 无论在基本理论还是实际运用上都引起人们的广泛关注. 量子纠缠作为量子力学理论中的一个非常有趣的特性, 在量子通信中作为信息源起着无法替代的作用^[2~8]. 因此, 判断一个系统是否纠缠是任何量子通信理论必须首先面对的问题, 其中冯诺依曼熵就是一种非常有用的量子纠缠度量方案^[9,10]. 近年来, 人们研究了一些特殊模型量子系统中量子相变和量子纠缠之间的关系^[11~20], 认为量子相变出现在纠缠度的一些特殊点上, 例如极值点、奇异点、非连续点等等. 但是这些特殊量子系统模型的量子相变都是通过计算子系统密度矩阵得到的非解析解^[21~26].

由于精确计算复杂量子多体系统是非常困难的, 目前对小量子系统(一对量子比特、二自旋系统、三自旋系统等)的研究被认为是理解多体系统量子相变的一个有效途径^[27~30]. 本文精确计算出了锂 6 原子系统的量子相变和运用冯诺依曼熵度量的量子纠缠, 并讨论了量子相变和量子纠缠之间的关系.

1 量子相变

对于锂 6 原子系统, 可以看作是一个外层电子自旋为 1/2 和原子核自旋为 1 的二自旋系统. 在磁场中, 锂 6 原子系统的对应的哈密顿量表示如下:

$$H = J(\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2) - B(s_{1x} + s_{2x}) = J(s_x^1 s_x^2 + s_y^1 s_y^2 + s_z^1 s_z^2) - B(s_x^1 + s_x^2), \quad (1)$$

其中 $\mathbf{s}_1$ 为自旋为 1/2 的泡利矩阵, $\mathbf{s}_2$ 代表自旋为 1 的算子, 即,

$$s_x^1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad s_y^1 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad s_z^1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$

$$s_x^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad s_y^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, \quad s_z^2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

B 为磁场强度. 下面, 我们将用 $|\uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle$ 代表 $1/2$ 自旋的基矢; $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow 0\rangle$ 和 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 表示 1 自旋的基矢. 整个系统则存在以下六个基矢: $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow 0\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$, $|\downarrow 0\rangle$ 以及 $|\downarrow\downarrow\rangle$.

系统哈密顿量的矩阵形式可以表示为

$$H = \begin{bmatrix} J & -\frac{B}{\sqrt{2}} & 0 & -B & 0 & 0 \\ -\frac{B}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{B}{\sqrt{2}} & \sqrt{2}J & -B & 0 \\ 0 & -\frac{B}{\sqrt{2}} & -J & 0 & \sqrt{2}J & -B \\ -B & \sqrt{2}J & 0 & -J & -\frac{B}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & -B & \sqrt{2}J & -\frac{B}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{B}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & -B & 0 & -\frac{B}{\sqrt{2}} & J \end{bmatrix}. \quad (2)$$

对于这个系统, 可精确计算出它的本征态和本征值, 图 1 给出该系统本征值随磁场的变化情况. 从图 1 可以看出, 在 $B=2J$ 时, 两基态本征值相交, 锂 6 原子系统由一个本征态跃变为另一个本征态, 即在该点出现量子相变. 下面我们具体分析不同情况下本征值所对应的本征态.

当 $B > 2J$, 该系统的最小本征值为 $-2B+J$, 对应的本征态为

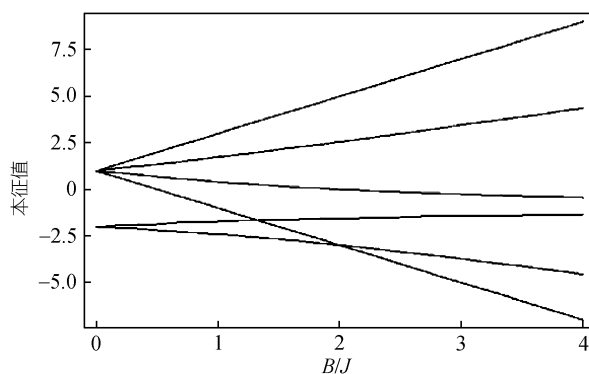


图 1 锂 6 原子系统本征值随 (B/J) 的变化, B 为磁场强度

$$|\Psi_{B>2J}\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}} \left[|\uparrow\uparrow\rangle + \sqrt{2}|\uparrow 0\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + \sqrt{2}|\downarrow 0\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle \right], \quad (3)$$

亦即

$$|\Psi_{B>2J}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle \right] \cdot \frac{1}{2} \left[|\uparrow\rangle + \sqrt{2}|0\rangle + |\downarrow\rangle \right], \quad (4)$$

从这个形式我们可以很明显的看出在 $B > 2J$ 时该系统可由一个分离态表示, 即系统的纠缠度为零.

当 $B < 2J$, 该系统的最小本征值为 $-\frac{1}{2}B - \frac{1}{2}J - \frac{1}{2}\sqrt{B^2 - 2JB + 9J^2}$, 所对应的本征态为

$$\begin{aligned} |\Psi_{B<2J}\rangle &= \frac{J^2}{9J^2 + B^2 - (J-B)\sqrt{B^2 - 2JB + 9J^2} - 2JB} \left[-|\uparrow\uparrow\rangle \right. \\ &\quad + \frac{\sqrt{2}(3J - B - \sqrt{B^2 - 2JB + 9J^2})}{2B} |\uparrow 0\rangle + \frac{3J + \sqrt{B^2 - 2JB + 9J^2}}{B} |\uparrow\downarrow\rangle \\ &\quad \left. - \frac{3J + \sqrt{B^2 - 2JB + 9J^2}}{B} |\downarrow\uparrow\rangle - \frac{\sqrt{2}(3J - B - \sqrt{B^2 - 2JB + 9J^2})}{2B} |\downarrow 0\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle \right] \\ &\equiv a_1 |\uparrow\uparrow\rangle + a_2 |\uparrow 0\rangle + a_3 |\uparrow\downarrow\rangle + a_4 |\downarrow\uparrow\rangle + a_5 |\downarrow 0\rangle + a_6 |\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

2 冯诺依曼熵度量的量子纠缠

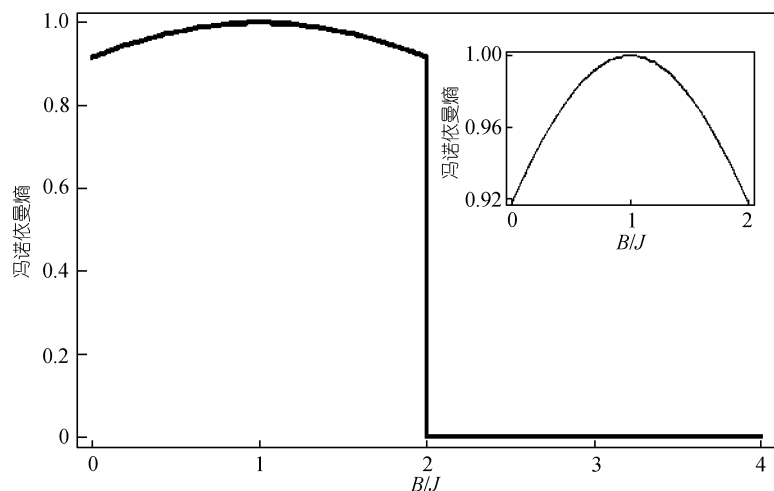
从上面的分析可以得到, 当磁场 $B < 2J$ 时系统存在纠缠, 当 $B > 2J$ 时系统的纠缠消失, 即纠缠随量子相变的出现而消失. 本文运用冯诺依曼熵来度量该系统的量子纠缠. 我们知道, 在求解冯诺依曼熵时, 需要首先考虑一个子系统的约化密度矩阵, 即 $\rho_A = \text{tr}_B \rho = \text{tr}_B |\Psi\rangle\langle\Psi|$, 则冯诺依曼熵 $E_v(A)$ 为

$$E_v(A) = -\text{tr}[\rho_A \log_2(\rho_A)]. \quad (6)$$

当 $B < 2J$ 时, 约化密度矩阵为

$$\begin{aligned} \rho_A &= \text{tr}_B \rho = \langle\uparrow|\rho|\uparrow\rangle + \langle 0|\rho|0\rangle + \langle\downarrow|\rho|\downarrow\rangle \\ &= (a_1^2 + a_2^2 + a_3^2) |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + (a_4^2 + a_5^2 + a_6^2) |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \\ &\quad + (a_1 a_4 + a_2 a_5 + a_3 a_6) |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + (a_1 a_4 + a_2 a_5 + a_3 a_6) |\downarrow\rangle\langle\uparrow| \\ &= \begin{bmatrix} a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 & a_1 a_4 + a_2 a_5 + a_3 a_6 \\ a_1 a_4 + a_2 a_5 + a_3 a_6 & a_4^2 + a_5^2 + a_6^2 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (7)$$

由方程(6)和(7), 可以得出系统的冯诺依曼熵随参量 B/J 的变化情况如图 2 所示. 从图中可以看出, 在 $B < 2J$ 时, 冯诺依曼熵并不是随磁场强度 B 的增加而单调变化, 而是在 $B = J$ 时具有最大值. 当磁场强度 B 增加到 $B > 2J$, 即通过系统量子相变点后, 冯诺依曼熵的值为零, 说明纠缠消失. 至此我们证实了锂 6 原子系统中量子相变和量子纠缠的关系.

图 2 锂 6 原子系统量子纠缠(冯诺依曼熵)随 (B/J) 的变化

3 结论

本文通过对一个可以精确求解的锂 6 原子系统的研究, 揭示该系统中量子相变和量子纠缠之间的关系. 运用冯诺依曼熵计算的纠缠度可以清楚展示磁场中锂 6 原子系统的量子相变情况. 锂 6 原子系统中量子相变一旦出现, 则量子纠缠现象随即消失. 对于一个曾经存在纠缠的 6 锂原子系统, 如果纠缠现象消失则该系统一定发生了相变. 本文结果说明了研究量子系统的纠缠度是判断量子相变是否发生的一个有效手段.

参考文献

- 1 Sachdev S. Quantum Phase Transitions. Cambridge: Cambridge University Press, 1999
- 2 Einstein A, Podolsky B, Rosen N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? Phys Rev, 1935, 47: 777—780^[DOI]
- 3 Bennett C H, Divincenzo D P. Quantum information and computation. Nature, 2000, 404: 247—255^[DOI]
- 4 叶明勇, 张永生, 郭光灿. 量子纠缠和量子操作. 中国科学 G 辑: 物理学 力学 天文学, 2007, 37(06): 716—722
- 5 Ding S C, Jin Z. Review on the study of entanglement in quantum computation speedup. Chin Sci Bull, 2007, 53: 2161—2166^[DOI]
- 6 狄尧民, 刘莉. 二量子比特么正算符对 2 秩混合态的纠缠能力. 中国科学 G 辑: 物理学 力学 天文学, 2007, 37(4): 691—697
- 7 Liu D, Zhang Y, Long G L. Influence of magnetic current on the ground state entanglement in an isotropic transverse XY chain. Progress in Natural Science, 2007, 17: 1147—1151
- 8 胡明亮, 田东平. 三量子位 Heisenberg XXX 链中杂质对. 中国科学 G 辑: 物理学 力学 天文学, 2007, 37(1): 17—23
- 9 Vedral V, Plenio M B, Rippin M A, et al. Quantifying entanglement. Phys Rev Lett, 1997, 78: 2275—2279^[DOI]
- 10 曹万苍, 刘丹, 潘峰, 等. 多体纠缠的熵积度量. 中国科学 G 辑: 物理学 天文学, 2006, 36(4): 375—383

- 11 Chen Y, Zanardi P, Wang Z D, et al. Sublattice entanglement and quantum phase transitions in antiferromagnetic spin chains. *New J Phys*, 2006, 8: 97 [\[DOI\]](#)
- 12 Gu S J, Tian G S, Lin H Q. Local entanglement and quantum phase transition in spin models. *New J Phys*, 2006, 8: 61 [\[DOI\]](#)
- 13 Wu L A, Sarandy M S, Lidar D A. Quantum phase transitions and bipartite entanglement. *Phys Rev Lett*, 2004, 93: 250404 [\[DOI\]](#)
- 14 Latorre J I, Rico E, Vidal G. Ground state entanglement in quantum spin chains. *Quant Inf Comp*, 2004, 4: 48
- 15 Yang M F. Reexamination of entanglement and the quantum phase transition. *Phys Rev A*, 2005, 71: 030302 [\[DOI\]](#)
- 16 Zhang Y, Cao W C, Long G L. Creation of multipartite entanglement and entanglement transfer via heisenberg interaction. *Chin Phys Lett*, 2005, 22: 2143—2146 [\[DOI\]](#)
- 17 Liu D, Zhang Y, Liu Y, et al. Entanglement in the Ground State of an Isotropic Three-Qubit Transverse XY Chain with Energy Current. *Chin Phys Lett*, 2007, 24: 8—10 [\[DOI\]](#)
- 18 Zhang Y, Liu D, Long G L. Ground-state entanglement in a three-spin transverse Ising model with energy current. *Chin Phys*, 2007, 16: 324—328 [\[DOI\]](#)
- 19 Zhang Y, Long G L. Ground-state and thermal entanglement in three-spin Heisenberg-X X Z chain with three-spin interaction. *Commun Theor Phys*, 2007, 48: 249—254 [\[DOI\]](#)
- 20 Zhang Y, Long G L, Wu Y C, et al. Partial teleportation of entanglement through natural thermal entanglement in two-qubit Heisenberg XXX chain. *Commun Theor Phys*, 2007, 47: 787—190
- 21 Wu L A, Sarandy M S, Lidar D A, et al. Linking entanglement and quantum phase transitions via density functional theory. *Phys Rev A*, 2006, 74: 052335 [\[DOI\]](#)
- 22 Roscilde T, Verrucchi P, Fubini A, et al. Studing quantum spin systems through entanglement estimators. *Phys Rev Lett*, 2004, 93: 167203 [\[DOI\]](#)
- 23 Amico L, Baroni F, Fubini A, et al. Divergence of the entanglement range in low-dimensional quantum systems. *Phys Rev A*, 2006, 74: 022322 [\[DOI\]](#)
- 24 Venuti C L, Boschi D E C, Roncaglia M, et al. Local measures of entanglement and critical exponents at quantum phase transitions. *Phys Rev A*, 2006, 73: 010303 [\[DOI\]](#)
- 25 Zanardi P. Quantum entanglement in fermionic lattices. *Phys Rev A*, 2002, 65: 042101 [\[DOI\]](#)
- 26 Anfossi A, Giorda P, Montorsi A. Entanglement in extended hubbard models and quantum phase transitions. *Phys Rev B*, 2007, 75: 165106 [\[DOI\]](#)
- 27 Facchi P, Marzolino U, Parisi G, et al. Phase transitions of bipartite entanglement. *arXiv: 0712.0015v1 [quant-ph]* 30 Nov 2007
- 28 Pižorn I, Prosen T, Mossmann S, et al. The two-body random spin ensemble and a new type of quantum phase transition. *arXiv: 0711.1218v1 [quant-ph]* 8 Nov 2007
- 29 Alvarez G A, Danieli E P, Levstein P R, et al. Environmentally induced quantum dynamical phase transition in the spin swapping operation. *J Chem Phys*, 2006, 124: 194507 [\[DOI\]](#)
- 30 Alvarez G A, Levstein P R, Pastawski H M. Signatures of a quantum dynamical phase transition in a three-spin system in presence of a spin environment. *Phys B*, 2007, 398: 438—441 [\[DOI\]](#)