

ЗАПУТАННОСТЬ СПИНОВЫХ ПАР В АЛЬТЕРНИРОВАННОЙ ОТКРЫТОЙ ЦЕПОЧКЕ ЯДЕРНЫХ СПИНОВ $s = 1/2$ С ХУ-ГАМИЛЬТониАНОМ

С. И. Доронин, А. Н. Пырков, Э. Б. Фельдман*

*Институт проблем химической физики Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 15 мая 2007 г.

Изучена запутанность спиновых пар 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 количественная характеристика запутанности (согласованность) имеет осциллирующий характер в зависимости от положения спиновой пары в цепочке. Найдены зависимости запутанности произвольно выбранной пары соседних спинов от температуры, положения пары спинов в цепочке, длины цепочки, отношения констант ССВ и даны качественные объяснения этих зависимостей. Объяснена роль концевых спинов открытой цепочки в формировании запутанности.

PACS: 03.67.Mn, 75.10.Jm

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование запутанности в квантовомеханических 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 невоз-

можно организовать адресацию кубитов, необходимую для проведения вычислительных операций на выбранном квантовом регистре. Адресация кубитов становится возможной в неоднородных системах при использовании различных ларморовых частот у разных спинов цепочки (кольца).

Недавно был диагонализирован ХУ-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].

В данной работе мы исследуем запутанность произвольной пары ближайших соседей, когда по остальным спином цепочки, рассматриваемым как окружение, проводится усреднение матрицы плот-

*E-mail: pyrkov@icp.ac.ru

ности системы, находящейся в состоянии термодинамического равновесия. Такое исследование можно провести для любой двухкубитной системы, используя критерий Вуттерса [13]. Основы предложенного подхода опубликованы в нашей недавней статье [14].

В разд. 2 этой статьи мы предлагаем модель квантового регистра, основанного на использовании альтернированной открытой цепочки ядерных спинов $s = 1/2$ с XY-гамильтонианом, и приводим выражения для спектра и собственных состояний этого гамильтониана. В разд. 3 изучена структура редуцированной матрицы плотности произвольной пары спинов в цепочке. На основе точно известного спектра найдены элементы редуцированной матрицы плотности произвольной пары соседних спинов в открытой альтернированной цепочке. Определение согласованности, используемой в качестве меры запутанности, приведено в разд. 4. В разд. 5 численно исследуется зависимость запутанности от температуры, длины цепочки, удаленности пары спинов от концов цепочки и отношения констант ССВ.

2. МОДЕЛЬ

В данной работе мы рассматриваем конечную открытую альтернированную цепочку спинов ($s = 1/2$), описываемую XY-гамильтонианом, в сильном внешнем магнитном поле. Гамильтониан этой системы может быть представлен в следующем виде:

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

где $I_{n\alpha}$ — проекция оператора углового момента n -го спина 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. Для упрощения следующих ниже формул мы рассматриваем цепочку с нечетным числом спинов.

Преобразование Иордана–Вигнера [2, 3], позволяющее рассмотреть систему взаимодействующих спинов как систему невзаимодействующих фермионов, может быть записано как

$$I_{n,-} = I_{nx} - iI_{ny} = (-2)^{n-1} \left(\prod_{l=1}^{n-1} I_{lz} \right) c_n, \quad (2)$$

$$I_{n,+} = I_{nx} + iI_{ny} = (-2)^{n-1} \left(\prod_{l=1}^{n-1} I_{lz} \right) c_n^\dagger, \quad (3)$$

$$I_{nz} = c_n^\dagger c_n - 1/2, \quad (4)$$

где c_n^\dagger и c_n — операторы рождения и уничтожения фермионов.

Выполняя преобразования (2)–(4) гамильтониана (1) и переходя к фермионным операторам $\gamma_k^\dagger, \gamma_k$ с помощью преобразований

$$c_n^\dagger = \sum_{k=1}^N u_{nk}^* \gamma_k^\dagger, \quad c_n = \sum_{k=1}^N u_{nk} \gamma_k, \quad (5)$$

получим диагональное представление гамильтониана

$$H = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \lambda_k \gamma_k^\dagger \gamma_k - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \omega_n, \quad (6)$$

с однофермионными энергиями $\lambda_k/2$. Собственные значения λ_k и собственные векторы $|u_k\rangle = (u_{1k}, u_{2k}, \dots, u_{Nk})^T$ (индекс T обозначает транспонирование) этого гамильтониана (6) даются выражениями (при нечетном N) [9]:

$$\lambda_k = \begin{cases} \omega_1 + \omega_2 + \sqrt{(\omega_1 - \omega_2)^2 + D_1^2 \Delta_k}, & k = 1, 2, \dots, \frac{N-1}{2}, \\ 2\omega_1, & k = \frac{N+1}{2}, \\ \omega_1 + \omega_2 - \sqrt{(\omega_1 - \omega_2)^2 + D_1^2 \Delta_k}, & k = \frac{N+3}{2}, \frac{N+5}{2}, \dots, N, \end{cases} \quad (7)$$

где

$$\Delta_k = 1 + 2\delta \cos \frac{2\pi k}{N+1} + \delta^2, \quad \delta = \frac{D_2}{D_1}. \quad (8)$$

Элементы собственного вектора $|u_k\rangle$ ($k = 1, \dots, N, k \neq (N+1)/2$) равны

$$u_{j,k} = \begin{cases} A_k \frac{D_1}{\lambda_k - 2\omega_1} \left(\delta \sin \frac{\pi k(j-1)}{N+1} + \sin \frac{\pi k(j+1)}{N+1} \right), & j = 1, 3, 5, \dots, N, \\ A_k \sin \frac{\pi k j}{N+1}, & j = 2, 4, \dots, N-1 \end{cases} \quad (9)$$

с нормировочным множителем

$$A_k = \frac{2|\lambda_k - 2\omega_1|}{\sqrt{N+1}} \frac{1}{\sqrt{(\lambda_k - 2\omega_1)^2 + D_1^2 \Delta_k}}. \quad (10)$$

Элементы собственного вектора $|u_{(N+1)/2}\rangle$ даются выражением

$$u_{j,(N+1)/2} = \begin{cases} B(-\delta)^{(N-j)/2}, & j = 1, 3, 5, \dots, N, \\ 0, & j = 2, 4, \dots, N-1 \end{cases} \quad (11)$$

с нормировочным множителем

$$B = \left(\frac{\delta^2 - 1}{\delta^{N+1} - 1} \right)^{1/2}. \quad (12)$$

При $D_1 = D_2 = D$ и $\omega_1 = \omega_2 = \omega_0$ приходим к однородной цепочке и ее гамильтониан (6) может быть записан как [15]

$$H = \sum_{k=1}^N \lambda_k \gamma_k^\dagger \gamma_k - \frac{1}{2} N \omega_0. \quad (13)$$

При этом собственные значения определяются как

$$\lambda_k = D \cos \frac{\pi k}{N+1} + \omega_0$$

и собственные векторы $|u_k\rangle$ имеют элементы

$$u_{j,k} = \left(\frac{2}{N+1} \right)^{1/2} \sin \frac{\pi k j}{N+1}, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (14)$$

3. РЕДУЦИРОВАННАЯ МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ

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

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z}, \quad (15)$$

где $\beta = \hbar/kT$, T — температура системы, $Z = \text{Tr}\{e^{-\beta H}\}$ — статистическая сумма. Рассматриваемый квантовый регистр определяется описанной альтернированной цепочкой во внешнем магнитном поле в состоянии термодинамического равновесия. Матрица плотности (15) может быть записана в следующем виде:

$$\rho = \sum_{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N=0}^3 \alpha_{12\dots N}^{\xi_1 \xi_2 \dots \xi_N} x_1^{\xi_1} \otimes \dots \otimes x_N^{\xi_N}, \quad (16)$$

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 (16) по окружению и учитывая, что $\text{Tr}\{x_k^{\xi_k}\} = 0$ ($k = 1, 2, \dots, N$; $\xi_k = 1, 2, 3$), получаем для редуцированной матрицы плотности $\rho^{(ij)}$ спинов i, j следующее выражение:

$$\rho^{(ij)} = \sum_{\xi_i, \xi_j=0}^3 \alpha_{ij}^{\xi_i \xi_j} x_i^{\xi_i} \otimes x_j^{\xi_j}, \quad (17)$$

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

$$\alpha_{ij}^{\xi_i \xi_j} = \frac{2^{N-2} \text{Tr}\{\rho x_i^{\xi_i} x_j^{\xi_j}\}}{\text{Tr}\{(x_i^{\xi_i})^2 (x_j^{\xi_j})^2\}}. \quad (18)$$

В формулах (16), (17) матрицы плотности нормированы на единицу. Поскольку гамильтониан системы симметричен относительно поворотов вокруг оси z ($[H, I_z] = 0$), нетрудно показать, что

$$\alpha_{ij}^{01} = \alpha_{ij}^{10} = \alpha_{ij}^{02} = \alpha_{ij}^{20} = 0, \\ \alpha_{ij}^{13} = \alpha_{ij}^{23} = \alpha_{ij}^{31} = \alpha_{ij}^{32} = 0. \quad (19)$$

Из соображений симметрии вытекает, что

$$\alpha_{ij}^{12} = 4 \text{Tr}\{\rho I_{ix} I_{jy}\} = 0, \quad \alpha_{ij}^{21} = 4 \text{Tr}\{\rho I_{iy} I_{jx}\} = 0, \\ \alpha_{ij}^{11} = 4 \text{Tr}\{\rho I_{ix} I_{jx}\} = 4 \text{Tr}\{\rho I_{iy} I_{jy}\} = \alpha_{ij}^{22}.$$

В результате редуцированную матрицу плотности $\rho^{(ij)}$ можно записать в виде

$$\rho^{(ij)} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & x & 0 \\ 0 & x & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d \end{pmatrix}, \quad (20)$$

где

$$a = \frac{1}{4} + \frac{\alpha_{ij}^{03}}{2} + \frac{\alpha_{ij}^{30}}{2} + \frac{\alpha_{ij}^{33}}{4}, \\ b = \frac{1}{4} - \frac{\alpha_{ij}^{03}}{2} + \frac{\alpha_{ij}^{30}}{2} - \frac{\alpha_{ij}^{33}}{4}, \\ c = \frac{1}{4} + \frac{\alpha_{ij}^{03}}{2} - \frac{\alpha_{ij}^{30}}{2} - \frac{\alpha_{ij}^{33}}{4}, \quad d = \frac{1}{4} - \frac{\alpha_{ij}^{03}}{2} + \frac{\alpha_{ij}^{30}}{2} + \frac{\alpha_{ij}^{33}}{4}, \\ x = \frac{\alpha_{ij}^{11}}{2}.$$

Точные выражения для однофермионных энергий и собственных векторов [9, 15] позволяют получить матричные элементы $\rho^{(ij)}$ как функции температуры, длины цепочки, положения спинов и отношения констант ССВ.

3.1. Альтернированная цепочка

Знание редуцированной матрицы плотности двухспиновой системы, находящейся в окружении остальных спинов цепочки, позволяет полностью исследовать поведение этой пары спинов в зависимости от внутренних параметров цепочки и температуры. Для этого необходимо вычислить коэффициенты α_{ij}^{03} , α_{ij}^{30} , α_{ij}^{33} и α_{ij}^{11} . Мы используем диагональное представление фермионного гамильтониана (6) альтернированной цепочки для получения этих коэффициентов.

Используя формулу (18) и перейдя к фермионному представлению, получим

$$\alpha_{ij}^{00} = 1/4, \tag{21}$$

$$\alpha_{ij}^{30} = \text{Tr} \{ \rho I_{iz} \} = \sum_p u_{ip}^2 \frac{e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_p}}{1 + e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_p}} - \frac{1}{2}, \tag{22}$$

$$\alpha_{ij}^{03} = \text{Tr} \{ \rho I_{jz} \} = \sum_p u_{jp}^2 \frac{e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_p}}{1 + e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_p}} - \frac{1}{2}, \tag{23}$$

$$\begin{aligned} \alpha_{ij}^{33} &= 4 \text{Tr} \{ \rho I_{iz} I_{jz} \} = \\ &= 4 \text{Tr} \left\{ \rho \left(c_i^\dagger c_i c_j^\dagger c_j - \frac{1}{2} c_i^\dagger c_i - \frac{1}{2} c_j^\dagger c_j + \frac{1}{4} \right) \right\} = \\ &= 4 \left[\sum_m \sum_{n \neq m} u_{im}^2 u_{jn}^2 \frac{e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_m}}{1 + e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_m}} \frac{e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_n}}{1 + e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_n}} + \right. \\ &\quad \left. + \left(\sum_n u_{in} u_{jn} \right) \sum_m u_{im} u_{jm} \frac{e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_m}}{1 + e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_m}} - \right. \\ &\quad \left. - \sum_m \sum_{n \neq m} u_{im} u_{in} u_{jn} u_{jm} \frac{e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_m}}{1 + e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_m}} \frac{e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_n}}{1 + e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_n}} \right] - \\ &- 2 \left(\sum_k u_{ik}^2 \frac{e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_k}}{1 + e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_k}} + \sum_p u_{jp}^2 \frac{e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_p}}{1 + e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_p}} \right) + 1. \tag{24} \end{aligned}$$

Вычисление коэффициентов α_{ij}^{11} , α_{ij}^{22} весьма трудоемко. Однако для нашего исследования достаточно найти эти коэффициенты только для ближайших соседей, поскольку проведенные нами численные расчеты для цепочки, состоящей из девяти спинов, с учетом взаимодействия удаленных спинов показали, что даже в такой цепочке запутанность возникает только между ближайшими соседями. Более подроб-

но этот вопрос освещен в разд. 5. Для ближайших соседей получаем

$$\begin{aligned} \alpha_{i,i+1}^{11} &= \alpha_{i,i+1}^{22} = 4 \text{Tr} \{ \rho I_{ix} I_{i+1,x} \} = \\ &= \text{Tr} \{ \rho (c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger + c_i^\dagger c_{i+1} - c_i c_{i+1}^\dagger - c_i c_{i+1}) \} = \\ &= 2 \sum_n u_{in} u_{i+1,n} \frac{e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_n}}{1 + e^{-\frac{\beta}{2}\lambda_n}}. \tag{25} \end{aligned}$$

Для получения компактного выражения параметра $\alpha_{i,i+1}^{33}$, оценивающего продольные корреляции спинов, удобно ввести обозначения

$$C_1 = \frac{\omega_2 - \omega_1}{D_1}, \quad C_2 = \frac{\omega_2 + \omega_1}{D_1}, \tag{26}$$

$$L_k = \begin{cases} \frac{1}{C_1 + \sqrt{C_1^2 + \Delta_k}}, & k = 1, \dots, \frac{N-1}{2}, \\ \frac{1}{C_1 - \sqrt{C_1^2 + \Delta_k}}, & k = \frac{N+3}{2}, \dots, N, \end{cases} \tag{27}$$

$$\begin{aligned} f_k &= A_k^2 = \\ &= \begin{cases} \frac{4}{N+1} \left(1 - \frac{\Delta_k}{(C_1 + \sqrt{C_1^2 + \Delta_k})^2 + \Delta_k} \right), \\ k = 1, \dots, \frac{N-1}{2}, \\ \frac{4}{N+1} \left(1 - \frac{\Delta_k}{(C_1 - \sqrt{C_1^2 + \Delta_k})^2 + \Delta_k} \right), \\ k = \frac{N+3}{2}, \dots, N, \end{cases} \tag{28} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} R_k &= A_k^2 \left(\frac{D_1}{\lambda_k - 2w_1} \right)^2 = \\ &= \begin{cases} \frac{4}{N+1} \frac{1}{(C_1 + \sqrt{C_1^2 + \Delta_k})^2 + \Delta_k}, \\ k = 1, \dots, \frac{N-1}{2} \\ \frac{4}{N+1} \frac{1}{(C_1 - \sqrt{C_1^2 + \Delta_k})^2 + \Delta_k}, \\ k = \frac{N+3}{2}, \dots, N, \end{cases} \tag{29} \end{aligned}$$

$$\epsilon_k = \begin{cases} C_2 + \sqrt{C_1^2 + \Delta_k}, & k = 1, \dots, \frac{N-1}{2}, \\ C_2 - \sqrt{C_1^2 + \Delta_k}, & k = \frac{N+3}{2}, \dots, N, \end{cases} \tag{30}$$

$$g(\epsilon_k) = \frac{e^{-\tau\epsilon_k}}{1 + e^{-\tau\epsilon_k}}, \quad \tau = \frac{\beta D_1}{2}. \quad (31)$$

Поскольку в альтернированной цепочке константы ССВ D_1 и D_2 различны, выражения для коэффициента $\alpha_{i,i+1}^{33}$ будут отличаться для случаев, когда i четно и когда i нечетно. Для четного i коэффициент $\alpha_{i,i+1}^{33}$ определяется следующим выражением:

$$\begin{aligned} \alpha_{i,i+1}^{33} = & 4 \left[\sum_{m \neq \frac{N+1}{2}} \sum_{\substack{n \neq m \\ n \neq \frac{N+1}{2}}} f_m R_n \times \right. \\ & \times \sin^2 \frac{\pi m i}{N+1} S_\delta^2(n) g(\epsilon_m) g(\epsilon_n) + \\ & + \sum_{m \neq \frac{N+1}{2}} f_m B^2(-\delta)^{N-i-1} \times \\ & \times \sin^2 \frac{\pi m i}{N+1} g\left(\frac{2w_1}{D_1}\right) g(\epsilon_m) + \\ & + \left(\sum_n f_n L_n S_\delta(n) \sin \frac{\pi n i}{N+1} \right) \times \\ & \times \sum_m f_m L_m S_\delta(m) \sin \frac{\pi m i}{N+1} g(\epsilon_m) - \\ & - \sum_{\substack{m \neq \frac{N+1}{2} \\ n \neq \frac{N+1}{2}}} \sum_{\substack{n \neq m \\ n \neq \frac{N+1}{2}}} f_m f_n L_n L_m S_\delta(m) S_\delta(n) \times \\ & \left. \times \sin \frac{\pi m i}{N+1} \sin \frac{\pi n i}{N+1} g(\epsilon_m) g(\epsilon_n) \right] - \\ & - 2 \left\{ \sum_{k \neq \frac{N+1}{2}} f_k \sin^2 \frac{\pi k i}{N+1} g(\epsilon_k) + \right. \\ & + \sum_{p \neq \frac{N+1}{2}} R_p S_\delta^2(p) g(\epsilon_p) + \\ & \left. + B^2(-\delta)^{N-i-1} g\left(\frac{2w_1}{D_1}\right) \right\} + 1, \quad (32) \end{aligned}$$

где

$$S_\delta(m) = \delta \sin \frac{\pi m i}{N+1} + \sin \frac{\pi m(i+2)}{N+1}.$$

При нечетном i коэффициент $\alpha_{i,i+1}^{33}$ определяется выражением

$$\begin{aligned} \alpha_{i,i+1}^{33} = & 4 \left[\sum_{m \neq \frac{N+1}{2}} \sum_{\substack{n \neq m \\ n \neq \frac{N+1}{2}}} f_n R_m \sin^2 \frac{\pi n(i+1)}{N+1} \times \right. \\ & \times Q_\delta^2(m) g(\epsilon_m) g(\epsilon_n) + \\ & + \sum_{n \neq \frac{N+1}{2}} f_n B^2(-\delta)^{N-i} \sin^2 \frac{\pi n(i+1)}{N+1} g\left(\frac{2w_1}{D_1}\right) g(\epsilon_n) + \\ & + \left(\sum_n f_n L_n Q_\delta(n) \sin \frac{\pi n(i+1)}{N+1} \right) \times \\ & \times \sum_m f_m L_m Q_\delta(m) \sin \frac{\pi m(i+1)}{N+1} g(\epsilon_m) - \\ & - \sum_{\substack{m \neq \frac{N+1}{2} \\ n \neq \frac{N+1}{2}}} \sum_{\substack{n \neq m \\ n \neq \frac{N+1}{2}}} f_m f_n L_n L_m Q_\delta(m) Q_\delta(n) \times \\ & \left. \times \sin \frac{\pi m(i+1)}{N+1} \sin \frac{\pi n(i+1)}{N+1} g(\epsilon_m) g(\epsilon_n) \right] - \\ & - 2 \left\{ \sum_{k \neq \frac{N+1}{2}} R_k Q_\delta^2(k) g(\epsilon_k) + B^2(-\delta)^{N-i} g\left(\frac{2w_1}{D_1}\right) + \right. \\ & \left. + \sum_{p \neq \frac{N+1}{2}} f_p \sin^2 \frac{\pi p(i+1)}{N+1} g(\epsilon_p) \right\} + 1, \quad (33) \end{aligned}$$

где

$$Q_\delta(m) = \delta \sin \frac{\pi m(i-1)}{N+1} + \sin \frac{\pi m(i+1)}{N+1}.$$

Выражения для остальных коэффициентов $\alpha_{i,i+1}^{03}$, $\alpha_{i,i+1}^{30}$, $\alpha_{i,i+1}^{11}$ редуцированной матрицы плотности соседних спинов получаются аналогичным образом. Необходимо также отметить, что мы рассматриваем альтернированную цепочку, состоящую из нечетного числа спинов. В случае однородной цепочки такого ограничения нет (спектр однородной цепочки определяется одной и той же формулой для четного и нечетного чисел спинов в цепочке). Поэтому зависимость запутанности от числа спинов N (для четных N) мы проследим в однородной цепочке.

3.2. Однородная цепочка

Выражения для элементов редуцированной матрицы плотности однородной цепочки упрощаются по сравнению с выражениями для элементов матрицы альтернированной цепочки и в соответствии с обозначениями (31) могут быть записаны в следующем виде:

$$\alpha_{ij}^{03} = \frac{2}{N+1} \sum_k \sin^2 \frac{j\pi k}{N+1} g(\varepsilon_k) - \frac{1}{2}, \quad (34)$$

$$\alpha_{ij}^{30} = \frac{2}{N+1} \sum_k \sin^2 \frac{i\pi k}{N+1} g(\varepsilon_k) - \frac{1}{2}, \quad (35)$$

$$\begin{aligned} \alpha_{ij}^{33} = & \frac{16}{(N+1)^2} \left\{ \sum_k \sum_{p \neq k} \sin^2 \frac{i\pi k}{N+1} \times \right. \\ & \times \sin^2 \frac{j\pi p}{N+1} g(\varepsilon_k) g(\varepsilon_p) - \\ & - \sum_k \sum_{p \neq k} \sin \frac{i\pi k}{N+1} \sin \frac{i\pi p}{N+1} \times \\ & \times \left. \sin \frac{j\pi k}{N+1} \sin \frac{j\pi p}{N+1} g(\varepsilon_k) g(\varepsilon_p) \right\} - \\ & - \frac{4}{N+1} \left(\sum_k \sin^2 \frac{i\pi k}{N+1} g(\varepsilon_k) + \right. \\ & \left. + \sum_p \sin^2 \frac{j\pi p}{N+1} g(\varepsilon_p) \right) + 1, \quad (36) \end{aligned}$$

$$\alpha_{i,i+1}^{11} = \frac{4}{N+1} \sum_k \sin \frac{i\pi k}{N+1} \sin \frac{(i+1)\pi k}{N+1} g(\varepsilon_k), \quad (37)$$

где $D_1 = D_2 = D$ и безразмерный однофермионный спектр ε_k определяется как

$$\varepsilon_k = 2 \cos \frac{\pi k}{N+1} + \frac{2\omega_0}{D}, \quad k = 1, 2, \dots, N.$$

4. МЕРА ЗАПУТАННОСТИ

Для системы, описываемой волновой функцией ψ и состоящей из двух кубитов (подсистем) A и B , запутанность количественно определяется с помощью энтропии [16]:

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

где редуцированная матрица плотности ρ_A (ρ_B) подсистемы A (B) определяется следом проектора $|\psi\rangle\langle\psi|$, взятого 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 $\tilde{\psi} = (\sigma_y \otimes \sigma_y)\psi$ ортогональна ψ , т. е. $(\tilde{\psi}, \psi) = 0$. В то же время максимально запутанное состояние двух спинов при инверсии с точностью до знака переходит в себя, т. е. $|(\tilde{\psi}, \psi)| = 1$. Можно показать [16], что запутанность E определяется как шеновская энтропия функции согласованности $C(\psi) = |(\tilde{\psi}, \psi)|$:

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

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 работе [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:

$$\tilde{\rho}_{AB} = (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho_{AB}^* (\sigma_y \otimes \sigma_y), \quad (38)$$

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]

$$\begin{aligned} C_{AB} = & \max\{0, 2\lambda - \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\}, \\ & \lambda = \max\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4\}, \end{aligned} \quad (39)$$

где $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ — квадратные корни из собственных чисел произведения матриц $\rho_{AB} \tilde{\rho}_{AB}$. Хотя это произведение неэрмитово, оно имеет действительные и неотрицательные собственные значения [17].

Используя матрицу (20), можно найти, что

$$\lambda_1 = \lambda_4 = \sqrt{ad}, \quad \lambda_{2,3} = |x \pm \sqrt{bc}|. \quad (40)$$

Выражения (40) содержат всю информацию, необходимую для анализа запутанности пары спинов в открытых альтернированных цепочках.

5. ЗАПУТАННЫЕ СОСТОЯНИЯ СПИНОВЫХ ПАР

Формула (20) показывает, что при отсутствии в системе поперечных корреляций ($x = \alpha_{ij}^{11}/2 = 0$)

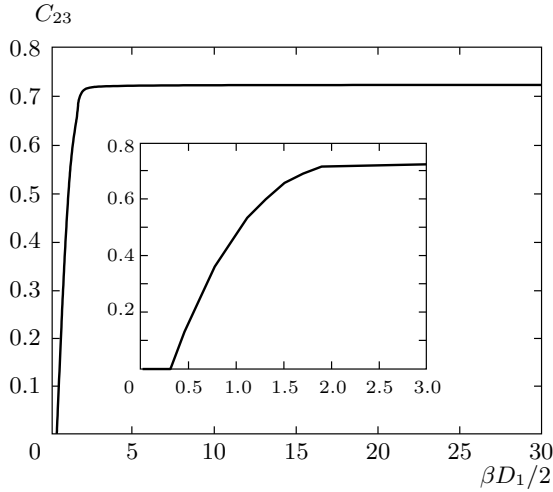


Рис. 1. Зависимость согласованности спинов 2 и 3 от температуры в цепочке, состоящей из $N = 101$ спинов, при $D_2/D_1 = 1.5$. На вставке показана зависимость согласованности от температуры в большем масштабе

редуцированная матрица плотности спиновой пары диагональна. При этом из выражений (39), (40) следует, что запутанности в системе нет. 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 ХУ-гамильтонианом при нулевых лармовских частотах.

На рис. 1 показана зависимость согласованности второго и третьего спинов от температуры. Запутанность возникает при $\beta D_1 \approx 1$, т. е. 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 CaF_2 наблюдались упорядоченные состояния ядерных спинов [18].

Численные расчеты (рис. 2) показывают, что согласованность, количественно характеризующая парную запутанность, осциллирует. Качественное объяснение этих осцилляций состоит в следующем. Кубиты 1 и N находятся на концах цепочки. По-

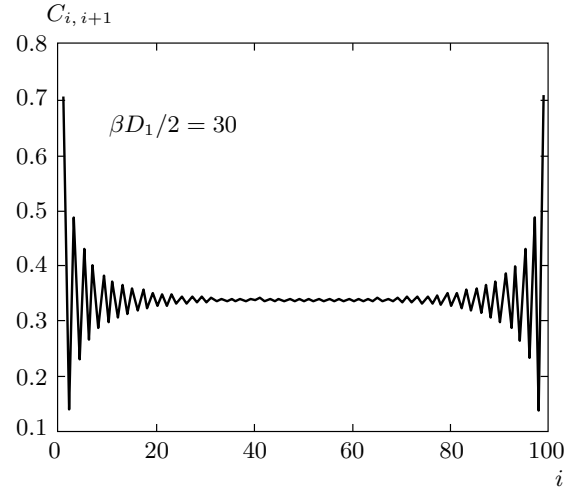


Рис. 2. Согласованность ближайших соседей в зависимости от положения внутри цепочки для однородной цепочки ($D_1 = D_2$), состоящей из 100 спинов ($N = 100$). Согласованность осциллирует, и эти осцилляции затухают при удалении пары спинов от концов цепочки

скольку 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.

Зависимости согласованности от положения пары спинов в цепочке при различных значениях отношения констант ССВ показаны на рис. 3. Осцилляции согласованности не затухают при удалении пары от концов альтернированной цепочки (рис. 3). Осцилляции согласованности, при которых она изменяется от нуля почти до единицы, происходят из-за различия констант ССВ в альтернированной цепочке. Зависимости согласованности от отношения констант ССВ представлены на рис. 4. 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 (рис. 3в), которая качественно может рассматриваться, как система невзаимодействующих спиновых пар при $D_2/D_1 \geq 2$.

Зависимости согласованности C_{12} спинов 1 и 2 от температуры для однородных цепочек разной дли-

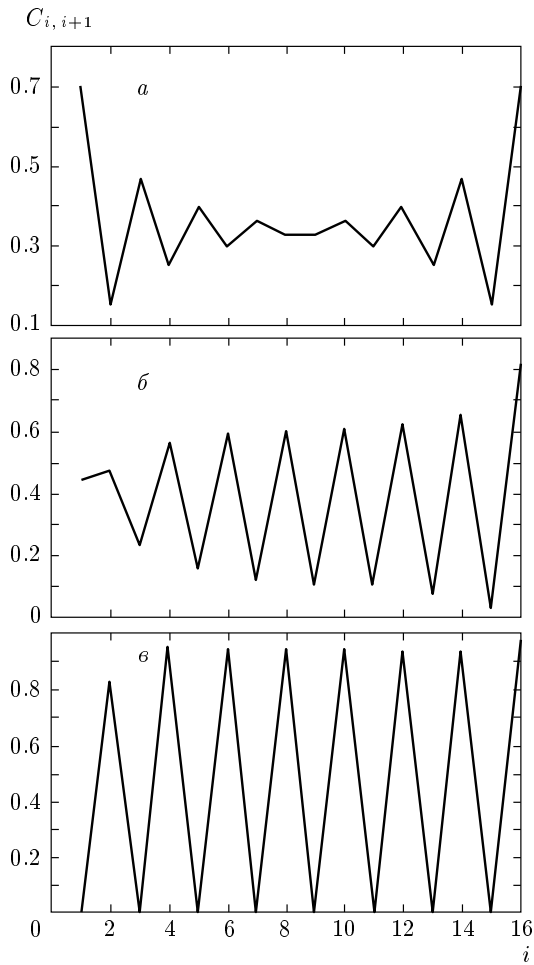


Рис. 3. Зависимости согласованности от положения пары спинов $i, i + 1$ внутри цепочки при $N = 17$, $\beta D_1/2 = 30$ для различных значений отношения констант ССВ. $D_2/D_1 = 1$ (а), 1.17 (б), 3 (в)

ны дана на рис. 5. 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 это различие обусловлено влиянием удаленного конца цепочки на согласованность C_{12} . Действительно, проведя рассуждения, аналогичные рассуждениям, которые объясняют осцилляции запутанности в зависимости от положения пары спинов в цепочке, начиная с удаленного конца цепочки, можно показать, что он уменьшает запутанность между первым и вторым спином для цепочек с нечетным числом спинов и увеличивает запутанность между первым и вторым спином в цепочках из четного числа спинов. При увеличении N влияние удаленного конца цепочки уменьшается, что ведет к увеличению за-

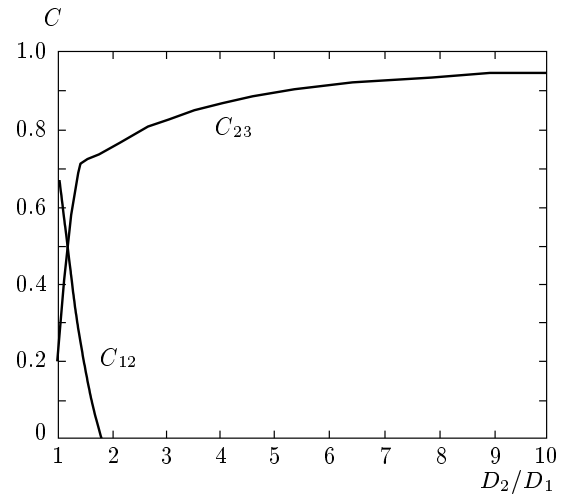


Рис. 4. Зависимости согласованности пар спинов 1, 2 и 2, 3 от отношения констант ССВ для цепочки из $N = 55$ спинов и $\beta D_1/2 = 30$

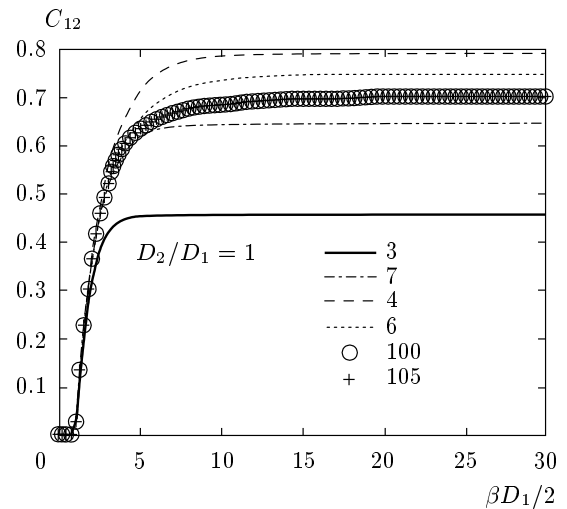


Рис. 5. Зависимости согласованности спинов 1 и 2 от температуры в однородной цепочке ($D_1 = D_2$) при $N = 3, 4, 6, 7, 100, 105$

путанности между первым и вторым спином при увеличении длины цепочки, состоящей из нечетного числа спинов. Для согласованности C_{23} спинов 2 и 3 наблюдается обратная ситуация (рис. 6), 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 по сравнению с влиянием удаленного конца цепочки, и поведение запутанности не зависит от четности (нечетности) числа спинов в цепочке.

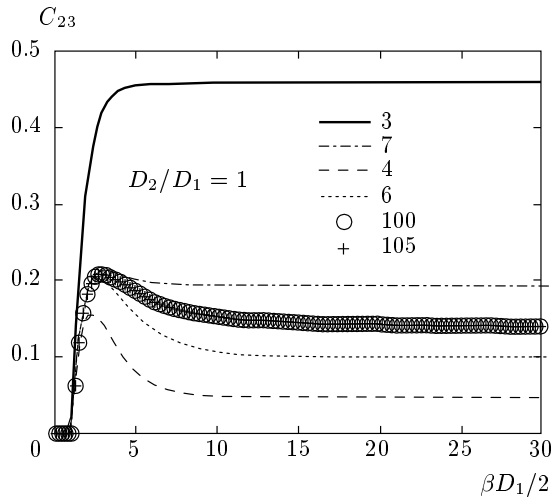


Рис. 6. Зависимости согласованности спинов 2 и 3 от температуры в однородной цепочке ($D_1 = D_2$) при $N = 3, 4, 6, 7, 100, 105$

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе мы сделали первый шаг в изучении квантовых регистров на основе многоспиновых систем, которые позволяют провести адресацию кубитов в регистре. Мы исследовали запутанность в открытых альтернированных цепочках. Развитые методы точной диагонализации открытых альтернированных спиновых цепочек позволили нам изучить запутанность спиновых пар при различных параметрах системы и разных температурах цепочки. Мы нашли температуру, при которой в спиновой паре возникает запутанность, показали, что при сильной разнице в константах ССВ происходит димеризация цепочки, и объяснили роль конечных спинов цепочки в формировании запутанных состояний.

Аналогичные методы могут быть применены для исследования парной запутанности и в более сложных моделях открытых цепочек с периодически меняющимися константами ССВ [11]. Методы точной диагонализации в таких цепочках [11] полезны для различных задач квантовой теории информации, решаемых с помощью модельных квантовых регистров, когда введена адресация кубитов. Для реализации адресации кубитов необходимо, чтобы разность ларморовских 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. Хитрину, Д.-С. Ли за стимулирующие дискуссии.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 07-07-00048).

ЛИТЕРАТУРА

1. M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2000).
2. E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, *Ann. Phys. (N. Y.)* **16**, 407 (1961).
3. H. B. 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, R. Fazio, and G. M. Palma, *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. К. Е. 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. С. И. Доронин, А. Н. Пырков, Э. Б. Фельдман, Письма в ЖЭТФ **85**, 627 (2007).
15. E. B. Fel'dman, R. Brüscheiler, and R. R. Ernst, *Chem. Phys. Lett.* **294**, 297 (1998).
16. C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin, and W. K. Wootters, *Phys. Rev. A* **54**, 3824 (1996).
17. Р. Хорн, Ч. Джонсон, *Матричный анализ*, Мир, Москва (1989).
18. А. Абрагам, М. Гольдман, *Ядерный магнетизм: порядок и беспорядок*, Мир, Москва (1984).