

На правах рукописи

Абгарян Ваагн Саркисович

**КВАНТОВАЯ ЗАПУТАННОСТЬ В СПИН-1
МАЛОЧАСТИЧНЫХ КЛАСТЕРАХ И
ОДНОМЕРНЫХ ЦЕПОЧКАХ**

Специальность 01.04.02 — теоретическая физика

Автореферат

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Дубна — 2016

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор **Ананикян Нерсес
Сиреканович**

Официальные оппоненты: **Тихонова Ольга Владимировна**
доктор физико-математических наук,
профессор, Московский государственный
университет имени М.В. Ломоносова,
кафедра атомной физики, физики
плазмы и микроэлектроники;

Крючкян Гагик Юрьевич

доктор физико-математических наук,
профессор, Ереванский государственный
университет, кафедра теоретической
физики

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Институт общей
физики имени А. М. Прохорова РАН

Защита состоится _____ г. в _____ часов на диссертационном совете Д 720.001.01 при Объединённом институте ядерных исследований (Лаборатория теоретической физики) по адресу: 141980, г. Дубна, Московской области, ул. Жолио-Кюри, д. 6.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте Объединённого института ядерных исследований (http://wwwinfo.jinr.ru/announce_disser.htm).

Автореферат разослан _____ года.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 720.001.01,
д.ф.-м.н.

Арбузов Андрей Борисович

Общая характеристика работы

Актуальность темы. В 1935 году вышла в свет работа Эйнштейна, Подольского и Розена (ЭПР) [1], в которой, опираясь на здравомысленный с точки зрения классической физики принцип о невозможности воздействия измерения над одной подсистемой на определение состояния второй подсистемы, не взаимодействующей с первой, оспаривалась полнота квантовой механики. Возможным объяснением указанных в этой работе «парадоксальных» корреляций являлась бы теория скрытых переменных, которая подразумевала бы присутствие добавочных степеней свободы, через которые предопределяется и выполняется скоррелированность степеней свободы до фактического измерения над системой. Через несколько месяцев после выхода в свет работы ЭПР была опубликована статья Шредингера [2], в которой впервые вышеописанные неклассические корреляции получили название «запутанность» («entanglement» в английском оригинале).

Какой точки зрения придерживаться - Эйнштейновской о неполноте квантовой механики и необходимости введения скрытых переменных или о полноте квантовой механики, в которой квантовая запутанность выступает как некое отражение действующих в микромире законов - долгое время оставалось делом мировоззрения каждого отдельного физика из-за отсутствия экспериментально проверяемых расхождений в предсказаниях этих двух точек зрения. Однако в 1964-ом году Беллом было показано [3], что ни одна локальная теория скрытых переменных не может повторить (в пределе пренебрежения скрытых переменных) статистические предсказания квантовой механики. Таким образом, было показано, что невозможно преодолеть нелокальности квантовой механики путём построения теории скрытых переменных, для которой квантовая механика выступала бы предельным случаем с редуцированной классической информацией. С другой стороны, полученные в [3] ограничения на вероятности исходов измерений дали возможность экспериментальной проверки проявлений существования или скрытых переменных, или неклассических корреляций (квантовой запутанности). В частности, в 1982 году группой Аспекта было экспериментально показано [4] нарушение белловских ограничений, что с достаточно большой достоверностью опровергает существование скрытых переменных.

Наряду с фундаментальным интересом, новым прикладным стимулом для изучения квантовой запутанности явилось развитие таких направлений, как теория квантовой информации [5], квантовая телепортация [8, 9], плотное кодирование [6, 7], квантовая криптография [10, 11].

Также, будучи характеристикой чисто квантовых корреляций, не имеющих классических аналогов, предполагается, что квантовая запутанность играет ключевую роль в понимании поведения сильно коррелированных квантовых систем и коллективных квантовых явлений в отдельных многочастичных спиновых и фермионных решеточных моделях [12, 13, 14].

Изучение критических явлений является одной из основных задач статистической физики. Неотъемлемой частью данного направления современной физики является теория квантовых фазовых переходов (КФП) [15]. Недавние исследования указывают на связь между запутанностью в многочастичных системах и присутствием квантовых фазовых переходов и фазовых сепараций [15, 16, 17, 18, 19, 20].

Двухчастичная запутанность в системе нескольких спинов часто может демонстрировать общие свойства запутанности спинов в больших термодинамических системах. Более того, такая связь может быть использована для раскрытия основополагающих свойств основных состояний и термодинамики молекулярных магнитов, спариваний электронов и возможной сверхпроводимости в конечно-размерных кластерах и в больших макроскопических системах [21, 22, 12].

В то время, как запутанность в системах со спином $\frac{1}{2}$ является хорошо изученной, понимание общих свойств запутанности и её связи с квантовыми переходами в спин-1 системах до настоящего момента нельзя считать удовлетворительной. Последнее обусловлено как сложностью таких систем, так и отсутствием технически легко изучаемых количественных характеристик запутанности для систем с высокими спинами.

Решение одномерной модели Гейзенберга методом анзаца Бете [23], распространённое на высокие спины [24, 25, 26], применимое лишь для отдельного полиномиального вида гамильтониана, указывает на характеристическую спиновую щель и богатую термодинамическую фазовую диаграмму. Тем не менее, общее решение методом анзаца Бете для одномерной модели, применимое для специфичного набора параметров, входящих в интегрируемый гамильтониан, трудно анализируем без прибегания к различного рода приближениям, в особенности, при конечных тем-

пературах. В противопоставление этому, точные расчёты запутанности в конечных кластерах дают перспективную альтернативу для понимания общих особенностей двухчастичных и фрустрированных систем при конечных температурах [27]. Квантовые и термодинамические фазовые диаграммы, а также склонность к запутыванию для малочастичных кластеров могут давать достаточно хорошее описание фазовых переходов, происходящих в некоторых макроскопических системах. Так, димеры и четырёхчастичные кластеры являются элементарными сборочными блоками или прототипами двухчастичных решёток, в то время, как трёхчастичные кластеры выступают в качестве элементарных блоков для типичных фрустрированных (треугольных) решёток. Тем не менее, в связи с отсутствием хорошо поддающейся расчёту количественной характеристики запутанности для высоких спинов, изучение квантовой запутанности даже для конечных кластеров до сих пор в основном было ограничено изучением спин- $\frac{1}{2}$ гейзенберговской и фермионной хаббардовской моделями [28, 29]. В то же время эксперименты с холодными бозонными атомами в оптической решётке с одним атомом в каждой яме открывают новое направление изучения КФП и сильно коррелированных атомных газов на оптической решётке посредством спин-1 модели Гейзенберга и модели Бозе-Хаббарда на малочисленных кластерах [30, 31].

Цель диссертации

Основной задачей данной диссертации является проведение изучения квантовой запутанности в точно решаемых спин-1 моделях. Дальнейшее сравнение эволюции запутанности с изменениями намагниченности и/или квадрупольного момента при переходах, индуцированных внешними параметрами (магнитного поля, одно-ионной анизотропии и так далее) позволяет выявлять характер переходов в терминах запутанности. Мы также заинтересованы в тепловом поведении квантовой запутанности, поскольку оно даёт представление о распространении чисто квантовых корреляций на конечно температурную область.

Научная новизна

- Проводится изучение квантовой запутанности в системах частиц со спином 1, взаимодействие которых описывается гамильтонианом, включающим характерные для подобных систем биквадратное взаимодействие и одно-ионную анизотропию.

- Изучается квантовая запутанность между спин-1 степенями свободы для спин-1/2 – 1 и спин-1 моделей Изинга-Гейзенберга на реалистичной даймонд-цепочке.
- Проводится полный сравнительный анализ эволюции намагниченности и квадрупольного момента с квантовой запутанностью при возможных квантовых переходах, индуцированных изменениями внешних параметров.

Основные результаты

Сжато сформулируем основные результаты диссертационной работы.

- Точно рассчитана квантовая запутанность в терминах отрицательности для двух и трех частиц со спином 1, взаимодействующих гамильтонианом общего полиномиального вида, включающего биквадратное взаимодействие, одно-ионную анизотропию, а также магнитное поле. Изучены влияния на запутанность всех параметров, входящих в гамильтониан.
- Для анизотропной спин-1 модели Гейзенберга на малочисленных кластерах было установлено существование режимов анизотропии, позволяющих тепловым образом запутать систему, которая при тех же параметрах незапутанна в основном состоянии.
- Для спин-1/2 – 1 смешанной модели Изинга-Гейзенберга на даймонд-цепочке в кластерном подходе рассчитана квантовая запутанность.
- Для спин-1 модели Изинга-Гейзенберга в трансфер-матричном подходе точно построена двухчастичная редуцированная матрица плотности и точно рассчитана квантовая запутанность.
- Установлено, что одно-ионная анизотропия гейзенберговских спинов убирает возможность максимального запутывания гейзенберговских спинов в основном состоянии для модели на даймонд-цепочке со спином единица, в то же время повышая температуру исчезновения запутанности.
- Точное решение и построение намагниченности позволили установить, что для спин-1/2 – 1 смешанной и спин-1 Изинг-Гейзенберговской моделей проявляются все промежуточные магнитные плато, предсказываемые правилом Ошикавы-Яманаки-Афлека [32], с периодом единица.

- Показано, что спин-1 модель Изинга-Гейзенберга на даймонд-цепочке может качественно описывать фазовую диаграмму основного состояния отдельного гомометаллического соединения [33] при учёте одно-ионной анизотропии изинговских спинов.

Практическая значимость

Диссертационная работа является теоретическим исследованием. Практическая ценность диссертационной работы состоит в применении разработанных методов для изучения квантовой запутанности как при нулевой, так и при конечной температурах. Полученные результаты позволяют провести сравнение эволюции квантовой запутанности и измеряемых величин при низкотемпературных переходах. Найденные соответствия между запутанностью и параметрами порядка для изученных моделей позволяют надеяться на возможное качественное описание степени запутанности подобных систем посредством изучения измеряемых величин.

Достоверность результатов

Достоверность представленных в диссертационной работе результатов подтверждена повторением полученных ранее предсказаний для более частных, а также качественно отличающихся точно решаемых моделей с применением разработанных нами компьютерных программ.

Апробация работы

Основные результаты диссертации докладывались на семинарах Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова на конференциях “APS March meeting 2009”, “APS March meeting 2010”, “SIMPHEYS XIV, 2010”, “41st meeting, PAC for Condensed Matter Physics 2015”.

Публикации

По материалам диссертации опубликовано 4 работы из перечня рецензируемых изданий, рекомендованных ВАК [A1 – A4].

Личный вклад

В диссертации представлены результаты, полученные при определяющем участии соискателя.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из Введения, трех глав, заключения и списка цитируемой литературы, содержащего 118 наименований и имеет объем 91 страниц. В начале каждой главы формулируется рассматриваемая в ней проблематика, в конце приводятся основные результаты.

Содержание работы

Во введении обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, приводится краткий обзор научной литературы по изучаемой проблеме, формулируется цель, ставятся задачи работы.

В первой главе после краткой вводной части, дающей определение явления квантовой запутанности, а также наиболее важных (на взгляд автора) количественных характеристик квантовой запутанности, излагаются основные результаты главы. Так, в разделе 1.2.1 сформулирована спин-1 модель Гейзенберга, представляемая гамильтонианом вида

$$H = \sum_{i=1}^N [J(\vec{S}_i \vec{S}_{i+1}) + K(\vec{S}_i \vec{S}_{i+1})^2] + D \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2 + B \sum_{i=1}^N S_i^z. \quad (1)$$

Здесь J и K описывают интенсивности билинейного и биквадратного взаимодействий соответственно. Модель включает также одноосное кристаллическое поле D , которое описывает одноосную одно-ионную анизотропию (uniaxial single ion anisotropy). Последнее должно значительно влиять на запутанность.

Оператор спина на узле i \vec{S}_i имеет компоненты спин-1 операторов.

Предполагается, что на взаимодействия наложены циклические граничные условия $\vec{S}_{N+1} = \vec{S}_1$, где N - полное число узлов на цепочке.

В разделе 1.2.2 представляется спектр кластерной модели при $N = 2$ с соответствующими собственными состояниями, которые позволяют построить транспонированную по отношению к одному из частиц матрицу плотности ρ^{T_1} , необходимую для расчета количественной характеристики квантовой запутанности - отрицательности.

Далее приводятся обсуждения поведения квантовой запутанности и параметров порядка при нулевой температуре в различных плоскостях внешних параметров как в отсутствие, так и в присутствии внешнего магнитного поля. Далее в первой главе изучаются влияния всех внешних параметров (биквадратного взаимодействия, одно-ионной анизотропии). Были найдены области, где запутанность может быть резко увеличена посредством взаимосвязанного увеличения билинейного взаимодействия

и внутрикристаллического поля, несмотря на то, что максимально запутанное состояние при отсутствии биквадратного взаимодействия достигается в отсутствие кристаллического поля.

С другой стороны, как видно, к примеру, на рис. 1, отрицательность может определять границы между упорядоченными (сильно коррелированными в смысле запутанности) и, по существу, классическими (сепарабельными) состояниями. Наблюдаемые плато намагниченности (квадрупольного момента) и пики восприимчивостей могут быть использованы одновременно для выявления как классических (в выше указанном смысле), так и квантовых фазовых переходов. Плотностные (цветоградиентные) графики, используемые в диссертации, проявляют себя в этом отношении как удобный топографический инструмент для выявления квантовых фаз и переходов между ними. Состояния с угасающими классическими (тепловыми), но возрастающими квантовыми корреляциями открывают возможности для изучения фазовых переходов, обнаруживаемых лишь одновременным рассмотрением квантовой запутанности и термодинамических свойств. С другой стороны, функции отклика (иногда необходимо одновременное рассмотрение откликов по всем параметрам порядка), с учетом связи между ними и запутанностью, могут быть использованы как экспериментально проверяемые свидетельства запутанности. Особо интересным оказывается последующее изменение модели с добавлением анизотропии билинейного взаимодействия (модель Гейзенберга XXZ). Здесь, в частности, устанавливается, что возможны режимы анизотропии, при которых наблюдается возрастание квантовой запутанности с увеличением температуры в низкотемпературной области. Также представляются результаты для теплового угасания и исчезновения запутанности с последующим увеличением температуры.

Далее в первой главе приводятся точные результаты для спектра трехчастичного кластера с последующими результатами для квантовой запутанности.

Наши изучения квантовых критических точек кажутся распространяемыми и на большие термодинамические системы. Несмотря на то что точные изучения для достаточно общего полиномиального вида гамильтониана имеют практические ограничения (расчётные времена растут экспоненциально с ростом числа частиц в кластере), мы не нашли минимальной критической длины цепочки, для которой запутанность исчезает.

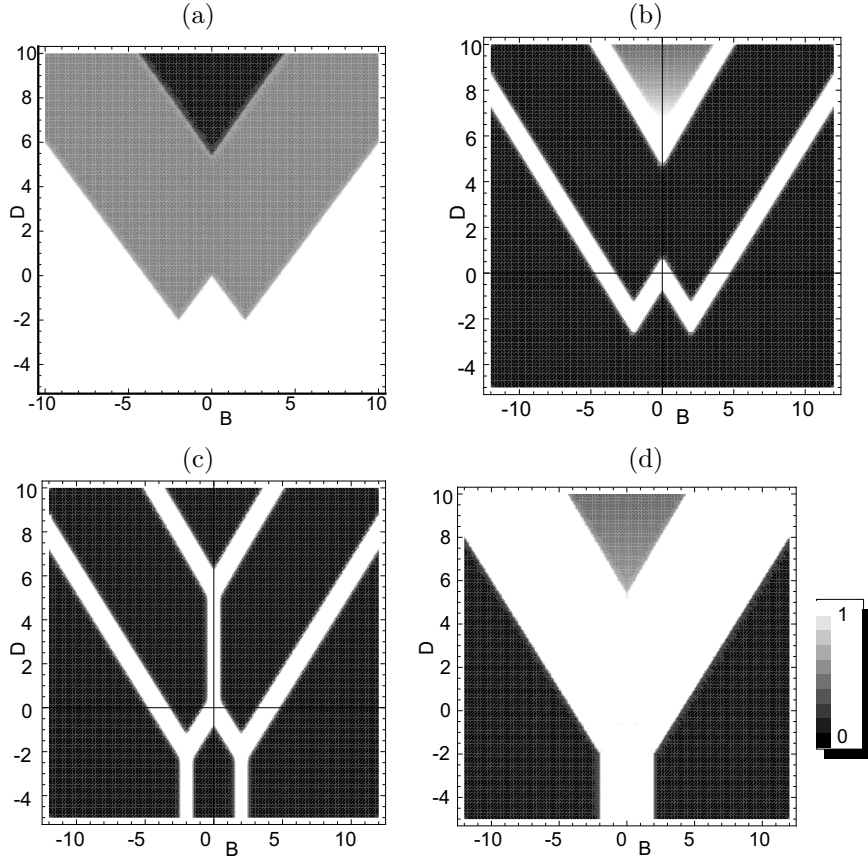


Рис. 1: Плотностные графики (а) числа частиц P (б) квадрупольной восприимчивости (с) магнитной восприимчивости и (д) отрицательности в плоскости B и D , когда $K = 2$ в антиферромагнитном случае $J = 1$.

В конце первой главы кратко выведены основные результаты главы и представлены заключения.

Во второй главе представляется смешанная спин- $1/2 - 1$ модель Изинга-Гейзенберга на даймонд-цепочке. Наша заинтересованность в изучении смешанной спин- $1/2 - 1$ модели Изинга-Гейзенберга обусловлена следующими факторами. Первое - возможность точного решения и построения точного основного состояния, второе - происходящая кластеризация основного состояния, что даёт возможность точно рассчитать запутанность в кластерном подходе в основном состоянии через меру отрицательности, третье - существование (при определённой параметризации биквадратного взаимодействия гейзенберговских спинов) двух измеряемых величин: намагниченности и квадрупольного момента и, наконец, четвертое - изобилие разнообразных квантовых фаз, что даёт возмож-

ность для подробного изучения эволюции запутанности при переходах между ними.

Даймонд-цепочка (рис. 2) является квазиодномерной системой, которая состоит из узловых и попеременно за ними следующих вертикальных димеров. Гамильтониан системы может быть записан в следующей форме:

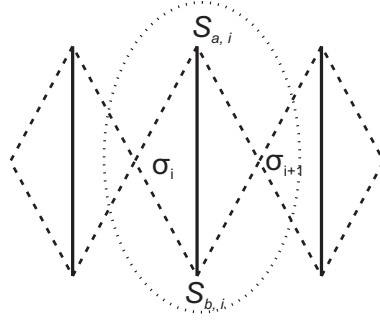


Рис. 2: Схематическое представление даймонд-решётки со смешанными спинами. Пунктирные (сплошные) линии соответствуют изинговским (гейзенберговским) взаимодействиям.

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{i=1}^N H_i, \\
H_i &= J_0 \left(\vec{S}_{a,i} \vec{S}_{b,i} \right) + J_1 (\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z) (S_{a,i}^z + S_{b,i}^z) + K \left(\vec{S}_{a,i} \vec{S}_{b,i} \right)^2 \\
&\quad + D \left((S_{a,i}^z)^2 + (S_{b,i}^z)^2 \right) - h \left(\frac{\sigma_i^z}{2} + S_{a,i}^z + \frac{\sigma_{i+1}^z}{2} + S_{b,i}^z \right). \quad (2)
\end{aligned}$$

В гамильтониане σ_i^z есть z -компонента оператора спин- $\frac{1}{2}$ (иными словами, одна-вторая z матрицы Паули), а $S_{a,i}^\alpha$ и $S_{b,i}^\alpha$ ($\alpha = x, y, z$) - компоненты спин-1 операторов соответственно на a -ом и b -ом узле i -ого димера. Циклические граничные условия применены таким образом, что последний изинговский спин совпадает с первым: $\sigma_{N+1} = \sigma_1$. J_0 и K , как и прежде, - коэффициенты билинейного и биквадратного взаимодействий в каждом отдельно взятом димере, в то время как J_1 есть интенсивность спаривания узловых изинговских спинов с гейзенберговскими вершинами. Здесь h есть однородное и одинаково действующее на изинговские и гейзенберговские подрешетки магнитное поле в направлении z . D , как и прежде, есть одно-ионная анизотропия (внутри-кристаллическое поле) в направлении z . Как уже указывалось выше, в специальной точке $J_0 = K$ в системе происходят качественные изменения, приводящие к коммута-

ции оператора $\sum_{i=1}^N ((S_{a,i}^z)^2 + (S_{b,i}^z)^2)$ с гамильтонианом, в таком случае для полного описания состояний системы становится необходимым рассмотрение ещё и квадрупольного момента.

Далее во второй главе следует представление точного решения модели при количестве даймонд-блоков, стремящемся к бесконечности. Важнейшим наблюдением на этом пути является соотношение коммутации $[\mathcal{H}_i, \mathcal{H}_j] = 0$ между отдельными слагаемыми гамильтониана. В итоге это приводит к возможности, на данном этапе, сведения задачи к рассмотрению одного блочного гамильтониана. Очевидно, что в рамках каждого отдельно взятого блока изинговская часть коммутирует с гейзенберговской частью. Последнее позволяет взять след по изинговским степеням свободы отдельного блока, что формально означает, что операторы σ_i^z могут быть заменены на числа $\sigma_i = \pm 1/2$. Следовательно, девять собственных значений $(\lambda_n(\sigma_i, \sigma_{i+1}), n = 1, \dots, 9)$ могут быть найдены аналитически. Последующее решение модели проводится аналитически посредством трансфер-матричного метода. После представления решения в разделе 2.2 приводятся изучения магнитных свойств модели. На рис. 3 представлены характерные случаи сценариев намагничивания в описанной модели.

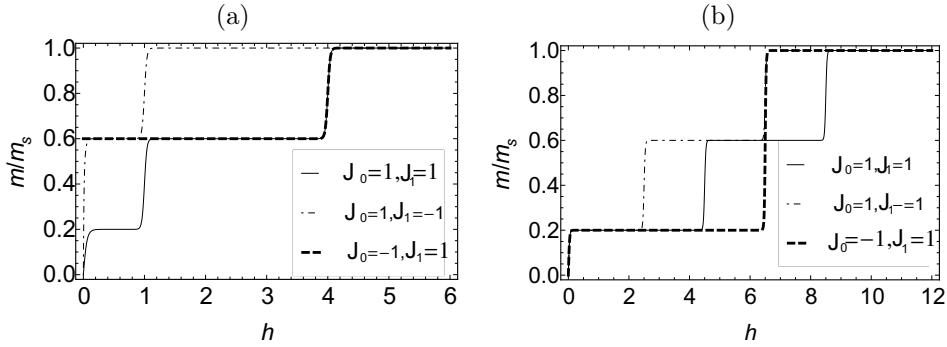


Рис. 3: Зависимость полной намагниченности (в единицах значения насыщения) от магнитного поля при низких температурах ($T = 0.02$) для разных значений параметров спаривания (а) $K = D = 0$, (б) $J_0 = K$ и $D = 5.5$.

Наиболее богатый сценарий намагничивания имеет место при антиферромагнитных знаках как изинговского, так и гейзенберговского билинейного спаривания (сплошная кривая). В этом случае до насыщения проявляются два промежуточных плато при $1/5$ -ой и $3/5$ -ых значения насыщения. Плато при $1/5$ -ой при ненулевом магнитном поле соответ-

ствуется состоянию с димерной намагниченностью $\langle S^z \rangle = 0$ (соответствующие собственные значения блочного гамильтониана λ_8 с сонаправленными с полем изинговскими спинами) либо состоянию с димерной намагниченностью $\langle S^z \rangle = 1$ в зависимости от направления изинговского спина. Таким образом, в присутствии магнитного поля $0 < h \leq 1$ при нулевых температурах вся цепочка находится в смеси состояний

$$\begin{cases} \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{2+\kappa_1^2}} |-\frac{1}{2}\rangle_i \otimes (|1, -1\rangle - \kappa_1 |0, 0\rangle + | -1, 1\rangle)_{a_i, b_i} \\ \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}} |\frac{1}{2}\rangle_i \otimes (|1, 0\rangle - |0, 1\rangle)_{a_i, b_i} \end{cases} \quad (3)$$

с

$$\kappa_1 = \frac{(J_0 - K)(J_0 + 3K - 2D - \nu)}{-2J_0^2 + 5J_0K + (\nu - 2D - 3K)K}. \quad (4)$$

Здесь посредством первого «кэт»-вектора в прямом произведении мы обозначили состояние изинговского спина в i -ой элементарной ячейке, а посредством второго - состояние димера в той же ячейке. Следует отметить, что в отсутствие магнитного поля, несмотря на то что эти состояния имеют вклад, тем не менее, в смесь добавляются еще и другие состояния, в частности, ко второму из указанных состояний добавляется похожее на неё состояние, но с перевернутым изинговским спином (происходит фрустрация).

Когда гейзенберговское взаимодействие имеет антиферромагнитный знак (пунктирная кривая), переход от плато к насыщению происходит между состояниями димера (из состояния с намагниченностью димера $\langle S^z \rangle = 1$ к состоянию с $\langle S^z \rangle = 2$). Очевидно, что переходы между состояниями с различными наборами классических степеней свободы не будут приводить к изменению квантовой запутанности.

В разделе 2.3 вводится формализм кластерного подхода к расчёту квантовой запутанности. Краеугольным камнем данного подхода является сепарабельность отдельных даймонд-блоков друг от друга при нулевой температуре, что позволяет свести редуцированную матрицу плотности двух любых гейзенберговских спинов к редуцированной по отношению к изинговским спинам матрице плотности даймонд-блока. Следует отметить, что, как было показано в работе [34], при таком подходе запутанность отличается от истинной запутанности при отличных от нуля температурах. Применяемый в разделе 2.3 метод сводит задачу расчёта запутанности к параметрическому изучению отрицательных решений

уравнения вида

$$\begin{aligned}
& (\mathbf{f}^2 + (\mathbf{b}_2 - \mu) (\mu - \mathbf{m}_2))^2 (\mathbf{c}^+ - \mu)^2 \times \\
& \times (\mu^3 - \mu^2 (\mathbf{a}^+ + \mathbf{a}^- + \mathbf{e}) + \mu (\mathbf{a}^+ \mathbf{a}^- + \mathbf{e} (\mathbf{a}^+ + \mathbf{a}^-) - \mathbf{b}_1^2 - \mathbf{m}_1^2 - (\mathbf{c}^-)^2) \\
& + \mathbf{a}^+ \mathbf{b}_1^2 + \mathbf{a}^- \mathbf{m}_1^2 + \mathbf{e} (\mathbf{c}^-)^2 - 2\mathbf{b}_1 \mathbf{c}^- \mathbf{m}_1) = 0,
\end{aligned} \tag{5}$$

где

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}^\pm &= 4 \cosh^2 \left(\frac{h \pm 4J_1}{4T} \right) e^{-\frac{(2D \pm 2h) + J_0 + K}{T}}, \\
\mathbf{b}_1 &= -4 \sinh \left(\frac{J_0}{T} \right) e^{-\frac{D-h+K}{T}} \cosh^2 \left(\frac{h - 2J_1}{4T} \right), \\
\mathbf{b}_2 &= 4 \cosh \left(\frac{J_0}{T} \right) e^{-\frac{D-h+K}{T}} \cosh^2 \left(\frac{h - 2J_1}{4T} \right), \\
\mathbf{c}^\pm &= \cosh^2 \left(\frac{h}{4T} \right) \left(\frac{4 (\kappa_1^2 + (\kappa_2^2 + 2) e^{\frac{\nu}{T}} + 2) e^{-\frac{2D-J_0+5K+\nu}{2T}}}{(\kappa_1^2 + 2) (\kappa_2^2 + 2)} \pm 2e^{-\frac{2D+J_0-K}{T}} \right) \\
\mathbf{f} &= -\frac{\left(e^{\frac{h}{2T}} + 1 \right)^2 \left((-\kappa_1^2 - 2) \kappa_2 + \kappa_1 (\kappa_2^2 + 2) e^{\frac{\nu}{T}} \right) e^{-\frac{2D+h-J_0+5K+\nu}{2T}}}{(\kappa_1^2 + 2) (\kappa_2^2 + 2)}, \\
\mathbf{e} &= \frac{\left(e^{\frac{h}{2T}} + 1 \right)^2 \left((\kappa_1^2 + 2) \kappa_2^2 + \kappa_1^2 (\kappa_2^2 + 2) e^{\frac{\nu}{T}} \right) e^{-\frac{2D+h-J_0+5K+\nu}{2T}}}{(\kappa_1^2 + 2) (\kappa_2^2 + 2)}, \\
\mathbf{m}_1 &= -4 \sinh \left(\frac{J_0}{T} \right) e^{-\frac{D+h+K}{T}} \cosh^2 \left(\frac{h + 2J_1}{4T} \right), \\
\mathbf{m}_2 &= 4 \cosh \left(\frac{J_0}{T} \right) e^{-\frac{D+h+K}{T}} \cosh^2 \left(\frac{h + 2J_1}{4T} \right) \\
\kappa_2 &= \frac{(J_0 - K) (-2D + J_0 + 3K + \nu)}{2J_0^2 - 5J_0K + K (\nu + 2D + 3K)}.
\end{aligned} \tag{6}$$

Подробное изучение показало, что запутанность сильно зависит от параметров обменного взаимодействия. В частности, было установлено существование нескольких режимов запутанности, которые завязаны на присутствии квадрупольного взаимодействия и одно-ионной анизотропии. Было также установлено, что в случае отсутствия квадрупольного взаимодействия и внутри-кристаллического и магнитного полей температура исчезновения запутанности есть линейная функция либо от значения билинейного взаимодействия, либо от разницы изинговских и гейзенберговских билинейных взаимодействий.

В третьей главе представляется спин-1 модель Изинга-Гейзенберга на даймонд-решётке в присутствии магнитного поля и одно-ионной анизотропии как изинговских, так и гейзенберговских спинов. Точное решение модели трансфер-матричным методом позволяет построить полную диаграмму основного состояния. Изучаются возможности формирования магнитных плато при намагничивании. Найдено, что модель может проявлять плато на нуле, одной- и двух-третях значения намагниченности. Представлено качественное описание процесса намагничивания в отдельно взятой Ni^{II} цепочке в гомометаллической ферримагнитной структуре $[Ni_3(fum)_2 - (\mu_3 - OH)_2(H_2O)_4]_n \cdot (2H_2O)_n$. В противопоставление второй главе, где запутанность изучалась в кластерном подходе, здесь изучение производится в рамках изложенного в этой главе трансфер-матричного метода. Представлены аналитические результаты для запутанности в терминах отрицательности для основного состояния. Показано, что одно-ионная анизотропия понижает запутанность основного состояния. С другой стороны, при тепловом смещении состояний повышение данной анизотропии повышает критическую температуру исчезновения запутанности. Излагается тепловое поведение запутанности.

Модельный гамильтониан здесь представим в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i, \\ \mathcal{H}_i &= J \vec{S}_{a,i} \vec{S}_{b,i} + J_1 (S_{a,i}^z + S_{b,i}^z) (\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z) \\ &\quad - h_H g \mu_B (S_{a,i}^z + S_{b,i}^z) - \frac{h_I g \mu_B}{2} (\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z) \\ &\quad + D_H ((S_{a,i}^z)^2 + (S_{b,i}^z)^2) + \frac{D_I}{2} ((\sigma_i^z)^2 + (\sigma_{i+1}^z)^2). \end{aligned} \quad (7)$$

Как и прежде, $S_{a/b,i}^\alpha$ ($\alpha = x, y, z$) - компоненты спин-1 операторов на узлах с координатами $(a/b, i)$, в то время, как σ_i^z - z -компонента спин-1 оператора, соответствующая изинговской частице на i -ом узле. J здесь соответствует XX взаимодействию в рамках гейзенберговского блока, J_1 - коэффициент взаимодействия узловых изинговских спинов с вершинами квантового димера. Продольные внутри-кристаллические поля по-разному действуют на изинговскую и гейзенберговскую подрешетки с соответствующими членами D_I и D_H . Магнитным полям, действующим

щим на изинговскую и гейзенберговскую подрешетки, соответствуют h_I и h_H . В далее представленных рисунках гиромангнитное отношение взято $g = 2.2$. Это значение является характерным для никель содержащих структур [33]. Наложённые граничные условия $\sigma_{N+1}^z = \sigma_1^z$ являются циклическими.

В разделе 3.2 представляется точное решение модели трансфер-матричным методом.

В разделе 3.3 применяется уже трансфер-матричный формализм к расчёту квантовой запутанности. Краткое содержание данного метода заключается в следующем.

Пусть, V есть трансфер матрица, соответствующая изучаемой модели. Если мы заинтересованы в квантовой запутанности гейзенберговских спинов r -ого блока в терминах отрицательности, необходимо построить редуцированную матрицу плотности $\rho_{i,j}$, зависящую лишь от гейзенберговских степеней свободы. Следовательно, по всем степеням свобод, кроме указанных, необходимо провести операцию взятия следа

$$\rho_{i,j} = \frac{1}{Z_N} \text{Tr}(V^{r-1} R_{i,j} V^{N-r}) = \frac{1}{Z_N} \text{Tr}(V^{N-1} R_{i,j}) \quad (8)$$

с

$$R_{i,j} = \begin{pmatrix} \varrho_{i,j}(-1, -1) & \varrho_{i,j}(-1, 0) & \varrho_{i,j}(-1, 1) \\ \varrho_{i,j}(0, -1) & \varrho_{i,j}(0, 0) & \varrho_{i,j}(0, 1) \\ \varrho_{i,j}(1, -1) & \varrho_{i,j}(1, 0) & \varrho_{i,j}(1, 1) \end{pmatrix}, \quad (9)$$

а индексы $i, j = 1 \dots 9$ соответствуют гейзенберговским спинам. Предположим теперь, что $\{w_1, w_2, w_3\}$ - полный набор векторов, диагонализующих трансфер-матрицу V в порядке убывания соответствующих собственных значений трансфер-матрицы. Где ϱ - больцмановские веса после взятия следа по изинговским степеням свободы. Обозначим через U унитарную матрицу, составленную из этих векторов (матрица, у которой i -ый столбец совпадает с w_i).

Можно теперь выразить редуцированную матрицу плотности через трансфер-матрицу и матрицу R в виде

$$\rho_{i,j} = \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \left[U^\dagger R_{i,j} U \begin{pmatrix} \lambda_1^{N-1} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^{N-1} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^{N-1} \end{pmatrix} \right]. \quad (10)$$

Выше мы предположили, что $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3$ ($\lambda_n, n = 1, 2, 3$ - собственные значения трансфер-матрицы). Знание редуцированной матрицы плотно-

сти даёт возможность провести её частичную транспонацию и расчёт запутанности. Необходимо подчеркнуть, что при низких температурах применённый метод даёт тот же результат, что и кластерный подход.

Далее в разделе 3.4 проводится подробное описание основного состояния изучаемой модели.

Установлено, что когда магнитное поле выключено, возможно проявление шести отличающихся фаз: две ферромагнитные ($FRI1$ и $FRI2$), три антиферромагнитные (две квантово-антиферромагнитные, симметричная по отношению к перестановке гейзенберговских спинов $SQAF$ и антисимметричная по отношению к той же перестановке $AQAF$, а также AFM), и фрустрированное FRU (рис.4).

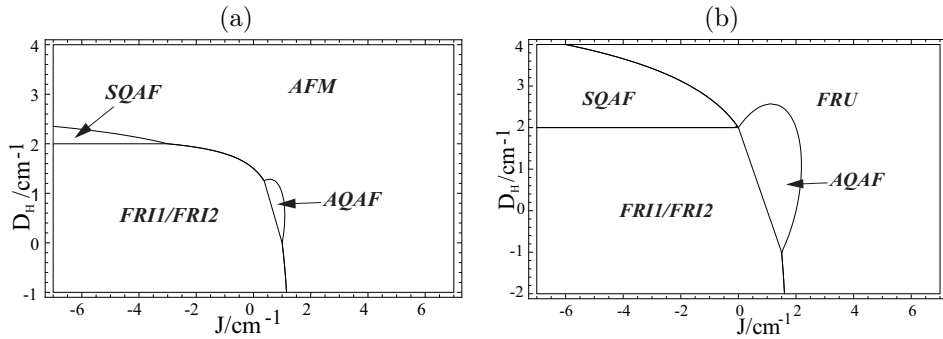


Рис. 4: Основное состояние в плоскости $J - D_H$ в отсутствие магнитного поля при (a) $J_1 = D_I = 1\text{cm}^{-1}$, (b) $J_1 = 1\text{cm}^{-1}$, $D_I = -1\text{cm}^{-1}$.

Когда магнитное поле включено, появляются новые фазы. А именно две симметричные по отношению к гейзенберговским спином ферромагнитные состояния (квантовое $SQFO$ и $SFO1$; последнее было расщеплено из смеси $SFO1/SFO2$ магнитным полем), антисимметричное квантовое ферромагнитное состояние, а также насыщенно-парамагнитное SPP .

В разделе 3.4 также представлены точные аналитические выражения для квантовой запутанности в основном состоянии. Эти выражения, в частности, указывают на то, что запутанность для антиферромагнитного и фрустрированного состояний зависит от внешних параметров и максимальна при $D_H = 0$ для $J > 0$, и $J = D_H$, когда $J < 0$. С другой стороны, в пределе, когда D_H велико, вклад всех членов, кроме $|0, 0\rangle$, становится пренебрежимо малым, следовательно, система становится сепарабельной и незапутанной. Естественно, что не при всех выше указанных значениях параметров это состояние будет основным. Следователь-

но, одно-ионная анизотропия гейзенберговских спинов, вообще говоря, уменьшает запутанность основного состояния.

В разделе 3.5 изучаются магнитные плато модели. На рис. 5 представлены наиболее интересные сценарии намагничивания с богатыми возможностями формирования промежуточных плато. Установлено, что включение одно-ионной анизотропии широко обогащает образование магнитных плато на нуле, одной- и двух-третях значения насыщения.

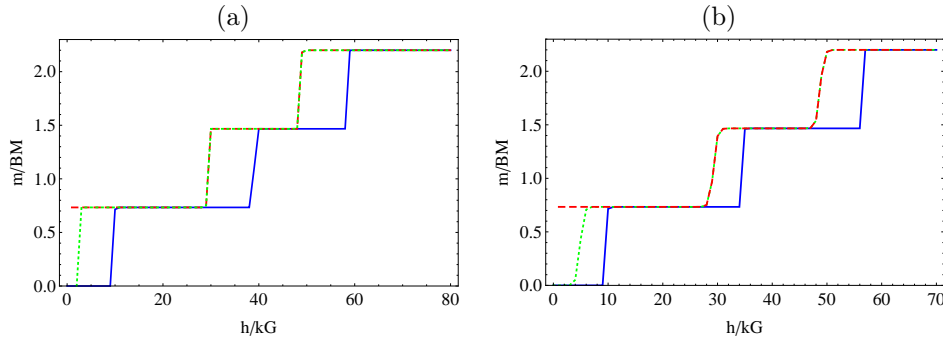


Рис. 5: Намагниченность в единицах боровского магнетона, когда $J = -6cm^{-1}$, $J_1 = D_I = 1cm^{-1}$ и (a) $D_H = 4cm^{-1}$ (сплошная линия), $D_H = -1cm^{-1}$ (пунктирная кривая), $D_H = 2.25cm^{-1}$ (пунктирно-точечная кривая), (b) $J = 0.9cm^{-1}$ и $D_H = 2cm^{-1}$ (сплошная кривая), $D_H = 0.7cm^{-1}$ (пунктирная кривая) $D_H = -1cm^{-1}$ (пунктирно-точечная кривая), все при $T = 0.01K$.

В разделе 3.6 рассматривается специальный случай, качественно описывающий намагничивание $[Ni_3(fum)_2 - (\mu_3 - OH)_2(H_2O)_4]_n \cdot (2H_2O)_n := \mathbf{A}$.

Исследования магнитной восприимчивости χ соединения \mathbf{A} [33] указывают на ферромагнитное поведение системы. Объяснение магнитного поведения системы кроется в следующем. В гидроксо-мостах углы в $Ni - O(H) - Ni$ лежат в пределах, для которых наблюдается ферромагнитное спаривание между Ni^{II} центрами. Следовательно, для данного сегмента ожидается основное состояние с $S = 2$. Между тем, взаимодействие между этим ферромагнитным сегментом и отдельно взятым центром $Ni(2)$ осуществляется одним гидроксо- и карбоксилато-мостами, приводя к антиферромагнитному взаимодействию сегментов с $S = 1$ и $S = 2$ и, следовательно, к ферримагнитному поведению всей цепочки. В диссертации предполагается, что ферромагнитное взаимодействие в рамках сегмента пары $Ni(1)$ выполняется гейзенберговским образом, в то время,

как антиферромагнитное взаимодействие между $Ni(1)$ и $Ni(2)$ - изинговским.

Измерения в [33] указывают на скачок намагниченности при $h = 0$ и существование магнитного плато на $2/3$ -ях значения насыщения при малых магнитных полях ($0.2 - 0.5kG$ при $T = 2K$). Установлено, что единственная возможность осуществления перехода из ферри-магнитного основного состояния к состоянию с плато на двух-третях при намагничивании предоставляется при переходах $FRI2-SFO1$ (при этом скачок при нуле происходит вследствие того, что при включении магнитного поля состояние $FRI2$ становится предпочтительнее смеси $FRI1/FRI2$). Существование такого перехода в рамках модели Изинга-Гейзенберга на даймонд-решетке является следствием включения внутри-кристаллического поля и одно-ионной анизотропии D_I , в то время, как существование и место перехода не зависят от D_H . Как можно увидеть, (на рис. 5(a) пунктирная линия) переход $FRI-SFO1$ происходит при намного более высоких полях, чем в описанном соединении, это объясняется тем, что в реальном соединении существуют ферромагнитные взаимодействия между соседними цепочками, которые можно усредненно считать эквивалентными добавочному самосогласованному полю. Последнее приведёт к необходимому для перехода критическому внешнему полю к более низким температурам, а длина плато станет короче (эффективное самосогласованное поле растёт с внешним полем нелинейным образом).

В разделе 3.7 представлены основные результаты для квантовой запутанности, изучаемой в третьей главе модели.

Сначала рассмотрена возможность модуляции максимальной запутанности при нулевой температуре. Единственными кандидатами на эту роль являются состояния AFM и FRU . С другой стороны, меняя значение в одно-ионной анизотропии гейзенберговских спинов, можно изменять саму запутанность. Рост одно-ионной анизотропии с нулевого значения приводит к уменьшению запутанности. При значении анизотропии $D_H = \frac{1}{4} \left(1 + 2J + \sqrt{1 + 32J^2} \right) Ne = 1/2$ (три плато отрицательности для состояний AFM, FRU_1 и $AQFO$ находятся на одном и том же уровне). Резюмируя, можно утверждать, что для рассматриваемой модели запутанность основного состояния, вообще говоря, понижается одно-ионной анизотропией D_H .

Несмотря на то что введение D_H в представленном выше случае понижает запутанность основного состояния, оно также делает некоторые возбуждённые запутанные состояния более достижимыми, вследствие чего критическая температура исчезновения запутанности повышается. Было также установлено, что до значения полей, при которых происходит переход к парамагнитному состоянию, магнитное поле слабо влияет на температуру исчезновения запутанности.

В заключении приводятся основные результаты диссертационной работы.

Список публикаций по теме диссертации

- A1.** V. S. Abgaryan, N. S. Ananikian, L. N. Ananikyan and A. N. Kocharian, *Phase transitions and entanglement properties in spin-1 Heisenberg clusters with single-ion anisotropy*, *Physica Scripta* **83** 055702, 7 страниц (2011).
- A2.** V. S. Abgaryan, *Quantum Entanglement and Quantum Phase Transitions in Anisotropic Two- and Three-Particle Spin-1 Heisenberg Clusters*, *Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences)*, **49**, 6, 249-257 (2014).
- A3.** V. S. Abgaryan, N. S. Ananikian, L. N. Ananikyan, V. Hovhannisyan, *Entanglement, magnetic and quadrupole moments properties of the mixed spin Ising–Heisenberg diamond chain*, *Solid State Comm.* **203**, 5-9 (2015).
- A4.** V. S. Abgaryan, N. S. Ananikian, L. N. Ananikyan, V. Hovhannisyan, *Quantum transitions, magnetization and thermal entanglement of the spin-1 Ising–Heisenberg diamond chain*, *Solid State Comm.* **224** 15-20 (2015).

Список литературы

- [1] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, *Phys. Rev.* **47**, 777 (1935).
- [2] E. Schrödinger, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **31**, 04, 555, (1935).
- [3] J.S. Bell *Physics* **1** (3), 195 (1964).
- [4] A. Aspect, P. Grangier, G. Roger, *Phys. Rev. Lett.* **49** (2), 91 (1982).

- [5] M. A. Nielsen, I. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* Cambridge University Press, Cambridge, England, (2000).
- [6] K. Mattle, H. Weinfurter, P. G. Kwiat, A. Zeilinger, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4656 (1996).
- [7] Y. Yeo and W. K. Chua, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 060502 (2006).
- [8] C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres, W. K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1895 (1993),
- [9] C. H. Bennett, G. Brassard, S. Popescu, B. Schumacher, J. Smolin, W. K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 722 (1996).
- [10] A. K. Ekert, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 661 (1991).
- [11] A. K. Ekert *Nature (London)*, **358**, 14 (1992).
- [12] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, V. Vedral, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 517 (2008).
- [13] R. B. Laughlin, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1395 (1983).
- [14] D. Larsson, H. Johannesson, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 196406 (2005).
- [15] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, Cambridge, England) (1999).
- [16] A. Osterloh, L. Amico, G. Falci, and R. Fazio, *Nature (London)* **416**, 608 (2002).
- [17] T. J. Osborne, M. A. Nielsen, *Phys. Rev. A* **66**, 032110 (2002).
- [18] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, A. Kitaev, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 227902 (2003).
- [19] J. I. Latorre, E. Rico, G. Vidal, *Quantum Inf. Comput.* **4**, 48 (2004).
- [20] L. E. Sadler, et al., *Nature (London)* **443**, 312 (2006).
- [21] A. N. Kocharian et al. *Phys. Rev.* **B78**, 075431 (2008).
- [22] A. N. Kocharian et al. *Phys. Lett.* **A373**, 1074 (2009).
- [23] H. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
- [24] L. Takhtajan, *Phys. Lett.* **A 87** 479 (1982).
- [25] H. Babujan, *Nucl. Phys.* **B 215** 317 (1983).

- [26] F D M Haldane, *Phys. Lett. A* **93** 464 (1983).
- [27] M. C. Arnesen, S. Bose, and V. Vedral, *Phys. Rev. Lett.* **87** 017901(2001).
- [28] C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. Smolin, W. K. Wootters, *Phys. Rev. A* **54**, 3824 (1996).
- [29] F. Mintert, M. Kus, and A. Buchleitner *Phys. Rev. Lett.* **92** 167902 (2004).
- [30] T.L. Ho, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 742 (1998).
- [31] S. Tsuchiya, S. Kurihara, T. Kimura, *Phys. Rev.* **A70**, 043628 (2004).
- [32] M. Oshikawa, M. Yamanaka, I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1984 (1997).
- [33] S. Konar, P.S. Mukherjee, E. Zangrando, F. Lloret, N.R. Chaudhuri, *Angew Chem Int Ed.*, **3;41(9)** 1561-3 (2002).
- [34] O. Rojas, M Rojas, N. S. Ananikian, S. M. de Souza, *Phys. Rev. A* **86**, 042330 (2012).