

具有三自旋相互作用的横场中各向异性 XY 模型的协作参量

刘小贤¹, 钟 鸣¹, 陈 波²

(1. 南京师范大学物理科学与技术学院, 江苏 南京 210023)

(2. 南京邮电大学通达学院, 江苏 南京 210003)

[摘要] 讨论了具有三自旋相互作用的横场中各向异性 XY 模型的量子相变和量子纠缠. 数值研究了协作参量在相变点附近的行为. 发现协作参量可以很好地体现系统的量子相变.

[关键词] 横场中各向异性 XY 模型, 三自旋相互作用, 量子相变, 量子纠缠, 协作参量

[中图分类号] O469 [文献标志码] A [文章编号] 1001-4616(2012)04-0025-05

Concurrence of Anisotropic XY Chains With Three-Site Interactions

Liu Xiaoxian¹, Zhong Ming¹, Chen Bo²

(1. School of Physics and Technology, Nanjing Normal University, Nanjing 210023, China)

(2. College of Tongda, Nanjing University of Posts and Telecommunication, Nanjing 210003, China)

Abstract: Quantum phase transitions and quantum entanglement of anisotropic XY chains with the $XZY - YZX$ type of three-site interaction are discussed. The behaviors of concurrence near the critical points is studied numerically. It is found that the behaviors of concurrence can furnish a dramatic signature of the quantum critical point.

Key words: anisotropic XY chains, three-site interactions, quantum phase transition, quantum entanglement, concurrence

多自旋相互作用的研究始于 1965 年 Thouless 对固体 ^3He 的研究^[1]. 近年来, 人们逐渐认识到多自旋相互作用对许多物理系统的理论描述非常重要, 因此多自旋相互作用引起广泛关注. 比如: 多自旋相互作用被用来表述 ^3He 的磁性^[2]; 三自旋相互作用对超导的范围有本质的影响^[3]; Hao 研究了三自旋相互作用的各向异性海森堡 XXZ 模型的量子通讯^[4]. 另一方面, 冷磁极分子和光学晶格中有效三自旋相互作用的发现更增加了人们研究多自旋相互作用的兴趣^[5-6]; 此外, 结合两体相互作用和核磁共振(NMR) π 脉冲能够模拟出三自旋相互作用^[7]. 这些实验工作也激发了理论研究工作者们对多自旋相互作用量子自旋系统的研究兴趣.

多年来, 对量子链的量子相变的研究一直是个非常活跃的课题. 有趣的是, 多自旋相互作用可能影响一些一维自旋链的量子相变, 或产生新的有序相. 最近, 多自旋模型的量子相变得到广泛研究, 比如, 三自旋 XXZ 海森堡模型^[8], 多自旋双轴模型^[9], 含 $XXZ + YZY$ 型三自旋相互作用或 $XZY - YZX$ 型三自旋相互作用的自旋 $s = 1/2$ XX 模型^[10-12]. 理论上, 通过自旋旋转, $XXZ + YZY$ 型三自旋相互作用自旋 $s = 1/2$ XX 模型与 $XZY - YZX$ 型三自旋相互作用的自旋 $s = 1/2$ XX 模型可相互转换. 然而, 由于各向异性的出现, 两类三自旋相互作用自旋 $s = 1/2$ XY 链情况则不同. 早在 1971 年, Suzuki 提出广义的一维自旋 XY 模型^[13]. 最近, Cheng 通过“fidelity susceptibility”方法研究了含 $XXZ + YZY$ 型三自旋相互作用自旋 $s = 1/2$ XY 链模型的量子相变, 发现此类三自旋相互作用不能引起新的相变线而只能平移原来没有三自旋的模型中的相变线^[14]. Cheng 研究了 $XZY - YZX$ 型三自旋相互作用的 XY 链环境诱导的退相干动力学^[15]. 然而, 研究 $XZY - YZX$ 型三自旋相互作用怎样影响 XY 链的基态性质和量子相变的工作却很少^[16].

收稿日期: 2012-03-09.

基金项目: 江苏省普通高校自然科学研究资助项目(12KJB140008).

通讯联系人: 刘小贤, 讲师, 研究方向: 凝聚态物理. E-mail: 06170@njnu.edu.cn

另一方面,量子纠缠作为一个重要的概念已经被广泛地应用于量子信息处理和量子通信中,著名的量子态远程传输、量子纠错、量子计算等等本质上都是利用了量子纠缠.正是由于量子纠缠如此地重要,才使得人们对量子纠缠的定性和定量描述有很大的兴趣.协作参量是应用最为广泛的衡量自旋系统的纠缠特性的物理量之一^[17].协作参量描述的是两个自旋间的纠缠.在本文中,我们将通过计算协作参量来研究模型的量子相变行为.

1 模型和公式

具有三自旋相互作用的横场中各向异性 XY 模型的哈密顿量是

$$H = \sum_{l=1}^N -\{J[(1+\gamma)S_l^x S_{l+1}^x + (1-\gamma)S_l^y S_{l+1}^y] + \Omega S_l^z + J^*(S_{l-1}^x S_l^z S_{l+1}^y - S_{l-1}^y S_l^z S_{l+1}^x)\}, \quad (1)$$

其中 J 是最近邻相互作用, J^* 是 XZY-YZX 型三自旋相互作用, γ 是各向异性参数, Ω 是均匀外场.这里我们选择周期性边界条件 $S_{N+1}^\beta = S_1^\beta (\beta = x, y, z)$.

通过 Jordan-Wigner 变换,哈密顿量可写为:

$$H = - \sum_{l=1}^N \left[\frac{J}{2} [(c_l^\dagger c_{l+1} + h. c.) + \gamma(c_l^\dagger c_{l+1}^\dagger + h. c.)] - \frac{iJ^*}{4} (c_l^\dagger c_{l+2} - h. c.) + \Omega \left(c_l^\dagger c_l - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (2)$$

应用傅立叶变换 $c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{-ikj}$, 哈密顿量在 k 空间中表示为:

$$H = \sum_k \left(-\cos k + \frac{\alpha}{2} \sin 2k - h \right) c_k^\dagger c_k - \frac{i\gamma}{2} \sin k (c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + c_k c_{-k}) + \frac{h}{2}, \quad (3)$$

这里不失一般性 $\alpha = J^*/J$, $h = \Omega/J$, $J = 1$.

定义 $H = \sum_{k=-\pi}^{\pi} H' = \frac{1}{2} \left(\sum_{k=-\pi}^{\pi} H_k + \sum_{k=-\pi}^{\pi} H_{-k} \right) = \sum_{k=-\pi}^{\pi} H'$, 且 $C = \begin{pmatrix} c_k \\ c_{-k}^\dagger \end{pmatrix} = U\eta$, $\eta = \begin{pmatrix} \eta_k \\ \eta_{-k}^\dagger \end{pmatrix}$. 然后, $H' = \frac{1}{2}$

$C^\dagger T C = \frac{1}{2} \eta^\dagger U^\dagger T U \eta$, 当 U 为 T 的本征矢时,可以被对角化. 其中

$$T = \begin{pmatrix} -\cos k + \frac{\alpha}{2} \sin 2k - h & i\gamma \sin k \\ -i\gamma \sin k & \cos k + \frac{\alpha}{2} \sin 2k + h \end{pmatrix},$$

那么,哈密顿量对角化为:

$$H = \sum_{k=-\pi}^{\pi} \varepsilon_k (\eta_k^\dagger \eta_k - \frac{1}{2}), \quad (4)$$

其中

$$\varepsilon_k = \frac{\alpha}{2} \sin 2k + \sqrt{(\cos k + h)^2 + \gamma^2 \sin^2 k}. \quad (5)$$

需要特别注意的是,没有三自旋相互作用的各向异性 XY 链的能谱(上式取 $\alpha = 0$)总是大于零的,而此模型的能谱 ε_k 在某些参数区域内却是小于零的值.由于在热力学极限下,系统的基态 $|\text{GS}\rangle$ 对应 $\varepsilon_k < 0$ 的地方占满粒子,而 $\varepsilon_k \geq 0$ 的地方没有占据粒子,所以基态满足:

$$\begin{aligned} \eta_k |\text{GS}\rangle &= 0, & \text{如果 } \varepsilon_k \geq 0, \\ \eta_k^\dagger |\text{GS}\rangle &= 0, & \text{如果 } \varepsilon_k < 0. \end{aligned}$$

2 结果与讨论

2.1 相图

考虑到模型哈密顿量的对称性,我们只需要研究 $\gamma, h, \alpha \geq 0$ 的情况.这 3 个参数的相互竞争使得该模型的相图比没有三自旋相互作用的各向异性 XY 模型的相图更加复杂(见图 1).当第一激发态和基态之间的能隙 $\Delta = 0$ 时,相变便会产生,所以在传统的研究方法中,我们可以通过计算激发谱的最小值 $\varepsilon_{\min} = 0$ 的那一点来找到对应的临界点.但是本文中,我们将采取更为简便的方法——李-杨零点理论的方法^[16]来

找到量子相变点. 根据这一方法, 我们只需要求解方程 $\varepsilon_k(h) = 0$ 在 h 复平面的解, 正实轴上的解便是对应着系统的量子相变点.

通过计算 $\varepsilon_k(h) = 0$ 在 h 复平面的解为:

$$h = -\cos k \pm \sqrt{(\alpha^2 \cos^2 k - \gamma^2)} |\sin k|. \quad (6)$$

分 3 种情况来讨论:

(1) $\alpha = 0$. 当 $\gamma > 0$ 时, 上式可以化简为 $h = -\cos k + i\gamma \sin k$. h 在复平面的解恰好构成一个椭圆, 并且与正实轴交于 $h = 1$, 也就是说临界点为 $h = 1$. 当 $\gamma = 0$ 时 h 的解都落在正实轴上, 并且最大值为 $h = 1$, 所以 $0 \leq h \leq 1$ 区域都为临界点. 这种情况下的相图见图 1(a), 即为横场中没有三自旋相互作用的各向异性 XY 链的相图. $h = 1$ 的竖直线对应从铁磁相到顺磁相转变的 Ising 相变. $\gamma = 0$ 的水平线对应从 X 方向的铁磁相到 Y 方向的铁磁相转变的各向异性相变.

(2) $0 < \alpha < 1$. 当 $\gamma \geq \alpha$ 时, 式(6)可以变化 $h = -\cos k \pm i \sqrt{(\alpha^2 \cos^2 k - \gamma^2)} \sin k$. h 在复平面的解仍然可以构成一个椭圆, 并且与正实轴交于 $h = 1$ 点, 可见, 此时 $h = 1$ 仍然为相变点. 当 $\gamma < \alpha$ 时, 情况更为复杂, 零点分布在区间 $[h_{\min}, h_{\max}]$ [16]. 综合分析, 我们得到了在 $0 < \alpha < 1$ 情况下的相图, 见图 1(b). 相图由 3 个区域构成. 区域 I 和区域 II 是非临界区域, 在这两个区域内, 激发态能量和基态能量间是有能隙的. 而区域 III 是临界区域, 在这个区域, 能隙为零.

(3) $\alpha \geq 1$. 图 1(c) 给出了这种情况的相图. 相图中 $h = 1$ 消失. 区域 3 范围扩大.

由于图 1(b) 的相图包含了最多的相, 因此, 只要弄清楚此相图中各个相的性质, 图 1(a) 和图 1(c) 的信息也便清楚了. 因此本文主要研究 $0 < \alpha < 1$ 情况下的量子相变. 不失一般性, 下面的研究我们取 $\alpha = 0.5$.

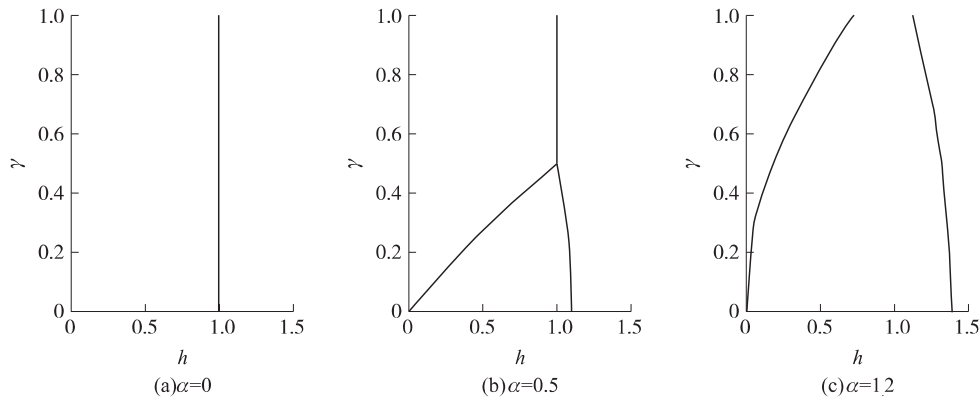


图 1 三自旋相互作用的各向异性 XY 模型的相图

Fig. 1 The ground-state phase diagram of the model

2.2 平均磁矩

平均磁矩 M_z 为:

$$M_z = \frac{1}{2N} \sum_{k=-\pi}^{\pi} \frac{\cos k + h}{\sqrt{(\cos k + h)^2 + \gamma^2 \sin^2 k}} \text{sgn}(\varepsilon_k), \quad (7)$$

这里, 对于 $\varepsilon_k \geq 0$ 阶梯函数 $\text{sgn}(\varepsilon_k) = 1$, 反之, 为 -1 . 图 2 给出了在不同 γ 参数下 ($\alpha = 0.5$) 平均磁矩 M_z 随 h 变化的函数. 图 2(a), 当 $\gamma = 0.7$, 对应了 M_z 从区域 I 到区域 II 的行为, 只有在 $h = 0$ 时, 平均磁矩

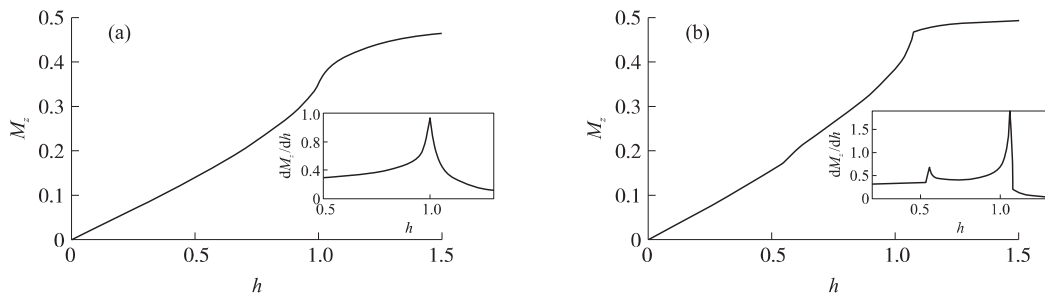


图 2 对应 (a) $\gamma = 0.7$, (b) $\gamma = 0.3$ 两种情况的平均磁矩

Fig. 2 M_z Changing with h . Here (a) $\gamma = 0.7$ and (b) $\gamma = 0.3$

$M_z = 0$ 并且随着 h 的增加 M_z 的值逐渐增大,直到 $h \rightarrow \infty$ 时 M_z 达到了最大值 $M_z = 0.5$. 我们可以发现,平均磁矩与没有三自旋相互作用的各向异性 XY 链发生 Ising 相变时对应的平均磁矩随 h 的变化行为相似:都是当外场通过临界点 $h_c = 1$ 时,平均磁矩有个拐点,且其一阶导数发散(见插图),说明 $h_c = 1$ 发生的是二级量子相变. 另一方面,当 $\gamma = 0.3$, 平均磁矩 M_z 从区域 I 到区域 III,再到区域 II. 平均磁矩在 h_{\min} , h_{\max} 处分别出现拐点,且其一阶导数发散(见插图),都是二级相变.

2.3 协作参量

协作参量通常描述在自旋链中任意一对自旋 m 和 n 之间的纠缠,其定义为

$$C_{mn} = \max\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\}, \quad (8)$$

$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \lambda_4$ 是算符

$$R_{ij} = \rho_{ij}(\sigma^y \otimes \sigma^y) \rho_{ij}^*(\sigma^y \otimes \sigma^y). \quad (9)$$

本征值的平方根. ρ_{mn} 是自旋 m 和 n 的约化密度矩阵,

$$\rho_{ij} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \beta=0}^3 p_{\alpha\beta} \sigma_i^\alpha \otimes \sigma_j^\beta, \quad (10)$$

其中,关联函数 $p_{\alpha\beta} = \langle \sigma_i^\alpha \sigma_j^\beta \rangle$. 这里 ρ_{mn} 的具体形式可以写为

$$\rho_{ij} = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 & a_{14} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & 0 \\ 0 & a_{23}^* & a_{33} & 0 \\ a_{14}^* & 0 & 0 & a_{44} \end{pmatrix},$$

矩阵元是:

$$\begin{aligned} a_{11} &= \frac{1}{4}(1 + 2\langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle + \langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle), \quad a_{22} = a_{33} = \frac{1}{4}(1 - \langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle), \quad a_{44} = \frac{1}{4}(1 - 2\langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle + \langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle), \\ a_{14} &= \frac{1}{4}(\langle \sigma_i^x \sigma_j^x \rangle - \langle \sigma_i^y \sigma_j^y \rangle - i(\langle \sigma_i^x \sigma_j^y \rangle + \langle \sigma_i^y \sigma_j^x \rangle)), \quad a_{23} = \frac{1}{4}(\langle \sigma_i^x \sigma_j^x \rangle + \langle \sigma_i^y \sigma_j^y \rangle + i(\langle \sigma_i^x \sigma_j^y \rangle - \langle \sigma_i^y \sigma_j^x \rangle)), \end{aligned}$$

经过很久的计算,我们知道 $\langle \sigma_i^x \sigma_j^x \rangle + \langle \sigma_i^y \sigma_j^y \rangle = 0$, 但是 $\langle \sigma_i^x \sigma_j^x \rangle - \langle \sigma_i^y \sigma_j^y \rangle \neq 0$. 值得一提的是,对于没有三自旋相互作用的 XY 模型 a_{23} 的虚部为 0, 而我们的模型中该项为复数.

本文研究的是格点 1 和格点 2 的最近邻协作参量 C_{12} . 图 3(a) 给出了从区域 II 到区域 II, C_{12} 及其导数随 h 的变化行为. 图 3(b) 给出了从区域 I 到区域 III, 然后到区域 II, C_{12} 及其导数随 h 的变化行为. 我们发现,协作参量都是连续的,而其一阶导数不连续,因此可以说明相变都为二级相变,与前面的结论一致. 需要注意的是,每个协作参量的曲线都有几个非解析点,其中只有 cp 点对应的是临界点(图 3 中用 cp

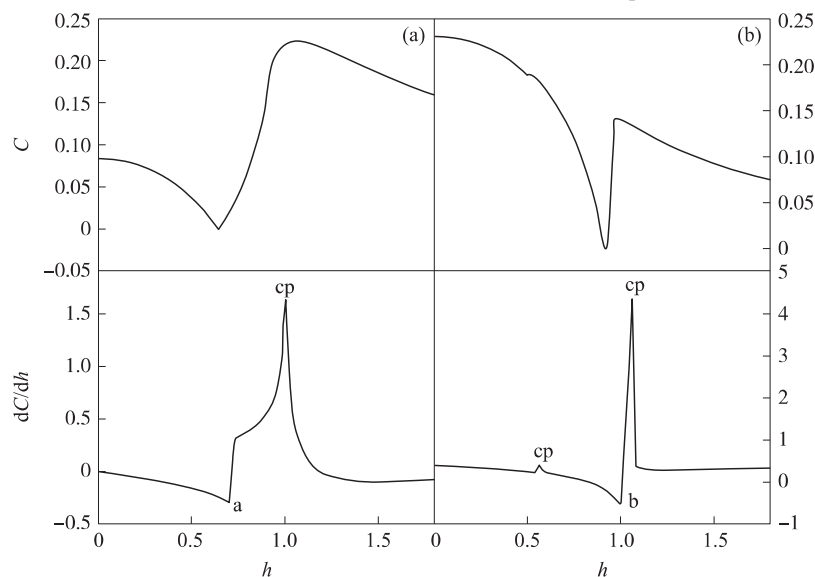


图 3 对应 (a) $\gamma = 0.7$ (b) $\gamma = 0.3$ 两种情况的协作参量以及其一阶导数

Fig. 3 The concurrence and its first-order derivatives as functions of h when (a) $\gamma = 0.7$ and (b) $\gamma = 0.3$

标出)这几个点与 LeeYang 方法给出的临界点都符合得很好.而另一个点(图 3 中的 a, b 点)并不是临界点,而是由于关联函数在这些点上振荡趋于一个有限值产生的,协作参量的这一特点之前已经由 Barouch 和 McCoy 发现并研究得到.

3 结语

本文讨论了具有三自旋相互作用的横场中各向异性 XY 模型的量子相变和量子纠缠.我们通过 Lee-Yang 零点方法给出了模型的相图,计算物理量平均磁矩研究了模型的相变行为;并且研究了协作参量在相变点附近的行为,发现协作参量可以很好地表征系统的量子相变.

致谢:感谢童培庆教授对本文的悉心指导.

[参考文献]

- [1] Thouless D J. Exchange in solid ^3He and the Heisenberg Hamiltonian[J]. Proc Phys Soc London, 1965, 86(5): 893-904.
- [2] Roger M, Hetherington J H, Delrieu J M. Magnetism in solid ^3He [J]. Rev Mod Phys, 1983, 55(1): 1-64.
- [3] Jedrak J, Spalek J. Renormalized mean-field t-J model of high-Tc superconductivity: comparison to experiment[J]. Phys Rev B, 2011, 83(10): 104512-1—104512-7.
- [4] Hao X, Zhu S Q. Quantum communication in spin chain with multiple spin exchange interaction[J]. Commun Theor Phys, 2010, 53(6): 1 083-1 086.
- [5] Schmidt K P, Dorier J, Lauchli A M. Solids and supersolids of three-body interacting polar molecules on an optical lattice[J]. Phys Rev Lett, 2008, 101(15): 150405-1—150405-4.
- [6] Pachos J K, Plenio M B. Three-spin interactions in optical lattices and criticality in cluster hamiltonians[J]. Phys Rev Lett, 2004, 93(5): 056402-1—056402-4.
- [7] Peng X H, Zhang J F, Du J F, et al. Quantum simulation of a system with competing two- and three-body interactions[J]. Phys Rev Lett, 2009, 103(14): 140501-1—140501-4.
- [8] Tsvelik A M. Incommensurate phase of quantum one-dimensional magnetism[J]. Phys Rev B, 1990, 42(1): 779-785.
- [9] Zvyagin A A. Quantum phase transitions in an exactly solvable quantum-spin biaxial model with multiple spin interactions[J]. Phys Rev B, 2009, 80(1): 014414-1—014414-7.
- [10] Krokhamalskii T, Derzhko O, Stolze J, et al. Dynamic properties of the spin - 1/2 XY chain with three-site interactions[J]. Phys Rev B, 2008, 77(17): 174404-1—174404-13.
- [11] Derzhko V, Derzhko O, Richter J. Exact solution of a the spin - 1/2 XX chain with three-site interactions in a random transverse field: influence of randomness on the quantum phase transition[J]. Phys Rev B, 2011, 83(17): 174428-1—174428-10.
- [12] Yang M F. Reexamination of entanglement and the quantum phase transition[J]. Phys Rev A, 2005, 71(3): 030302-1(R)—030302-4(R).
- [13] Suzuki M. The dimer problem and the generalized XY-model[J]. Phys Lett A, 1971, 34(5): 338-339.
- [14] Cheng W W, Liu J M. Fidelity susceptibility approach to quantum phase transitions in the XY spin chain with multisite interactions[J]. Phys Rev A, 2010, 82(1): 012308-1—012308-5.
- [15] Cheng W W, Liu J M. Disentanglement from spin environment: role of multisite interaction[J]. Phys Rev A, 2010, 81(4): 044304-1—044304-4.
- [16] Liu X X, Zhong M, Xu H, et al. Chiral phase and quantum phase transitions of anisotropic XY chains with three-site interactions[J]. J Stat Mech, 2012, P01003: 1-16.
- [17] Wootters W K. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits[J]. Phys Rev Lett, 1998, 80(10): 2 245-2 248.

[责任编辑: 顾晓天]