

# $XZY$ - $YZX$ 型三自旋相互作用对横场 $XX$ 自旋链中经典和量子关联的影响

类淑国<sup>1,2</sup>

(1.南京师范大学物理科学与技术学院,江苏 南京 210023)  
(2.南京工业大学理学院,江苏 南京 211816)

[摘要] 借助于严格对角化方法,数值研究了具有  $XZY$ - $YZX$  型三自旋相互作用的横场  $XX$  自旋链中经典和量子关联,讨论了三自旋相互作用对关联的影响,发现经典和量子关联在量子相变的临界点都具有奇异性.不同于横场中的量子 Ising 链,经典和量子关联对外场的导数没有尺寸效应.此外,在外场等于零的退化条件下,两个邻近自旋之间的总关联均分为经典和量子部分,并得到与文献一致的量子关联的行为.

[关键词] 自旋链,量子相变,量子关联

[中图分类号] O469 [文献标志码] A [文章编号] 1001-4616(2015)02-0017-06

## Effects of $XZY$ - $YZX$ Type Three-Spin Interactions on the Classical and Quantum Correlations of the Transverse Field $XX$ Spin Chain

Lei Shuguo<sup>1,2</sup>

(1.School of Physics and Technology, Nanjing Normal University, Nanjing 210023, China)  
(2.College of Sciences, Nanjing Tech University, Nanjing 211816, China)

**Abstract:** By means of the exact diagonalization method, the classical and quantum correlations between the nearest-neighbors in transverse field  $XX$  spin chain with  $XZY$ - $YZX$  type three-spin interactions are numerically studied. The effects of three-spin interactions on the correlations have been discussed. Both the singularity in the classical and quantum correlations at the critical points can be used to identify the quantum phase transitions of the model. However, different from that of the transverse field Ising chain, no finite-size effect is found in the derivatives in the correlations with respect to the transverse field. In addition, in case of zero external fields, the total correlations between two neighboring spins are divided equally into the classical and quantum parts, and the behaviors of quantum discord under this degenerative condition are in agreement with that in the literatures.

**Key words:** spin chains, quantum phase transition, quantum discord

量子复合系统不同于经典系统的一个重要特征在于其子系统之间存在无经典对应的关联.量子纠缠<sup>[1]</sup>就是一个典型的非经典关联,由于其在量子计算与量子信息领域<sup>[2,3]</sup>里具有重要的应用潜力,在近几十年里得到极大的关注<sup>[4]</sup>.最近,人们发现量子纠缠不能刻画全部的非经典关联,譬如在一些可分离态中仍然存在完全非经典的关联<sup>[5,6]</sup>,并把它称为量子失协,这种非纠缠的量子关联已经在理论上应用于非幺正的量子计算模型中,以实现能加速解决问题的一些计算方案<sup>[7]</sup>,这些方案已经在实验上得到实现<sup>[8]</sup>.量子失协不同于量子纠缠,量子纠缠的大小度量了非局域的量子关联;但量子失协可以度量给定态的全部量子性关联,本文中量子关联的含义等价于量子失协.

量子失协的概念一经提出立刻引起了广泛的关注.人们已经证明,几乎所有的量子态都含有量子失协<sup>[9]</sup>,并研究了多种物理体系中的量子失协<sup>[10]</sup>.在零温度时,量子的多体系统的性质可能会随系统的参

收稿日期:2014-04-30.

基金项目:国家自然科学基金(11205090).

通讯联系人:类淑国,讲师,研究方向:量子信息与量子相变. E-mail:sglei@njtech.edu.cn

数,如外磁场、相互作用强度等发生突变,这种源于量子涨落相变称为量子相变<sup>[11]</sup>,通常借助于传统的朗道对称破缺机制予以描述. 基于自旋链模型<sup>[12-21]</sup>,人们发现量子失协可以用于确认一个多体系统的量子相变. 文献[12,13]提出量子失协的不连续意味着一阶量子相变;量子失协的一阶导数的不连续意味着二阶量子相变,并以热力学极限下的横场 Ising 模型和 XXZ 模型为例做了数值计算. 此外,热的量子失协也可以用来揭示零温的量子相变<sup>[13-16]</sup>. 文献[17,18]表明,在具有 XZX+YZY 型三自旋相互作用的各向异性自旋链中,量子失协的一阶导数在临界点附近随系统尺寸对数发散. 然而,与一般各向异性的 XY 自旋链相同,XZX+YZY 型三自旋相互作用的引入并不能产生新的量子相,只能导致相变点的平移<sup>[22]</sup>. 相反地,XZY-YZX 型三自旋相互作用却可以产生新的螺旋相<sup>[23-25]</sup>,因而具有更丰富的相图. 文献[19,20]讨论了 XZY-YZX 型三自旋的 XX 模型的量子失协,发现量子失协比量子纠缠<sup>[26]</sup>更能正确地判断量子相变. 但是,这些工作仅限于考虑零外场这一特殊情形,此时的量子相变仅由三自旋相互作用所驱动.

本文研究了具有 XZY-YZX 型三自旋相互作用的横场 XX 自旋链的经典与量子关联,着重讨论三自旋相互作用对最近邻两格点关联的影响,并讨论了在这种情况下关联与量子相变的关系.

## 1 模型与方法

### 1.1 模型的对角化与相图

具有 XZY-YZX 型三自旋相互作用的横场 XX 自旋链的哈密顿量为<sup>[24,25]</sup>

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

式中  $S_l^\alpha (\alpha=x, y, z)$  表示格点  $l$  上的自旋的泡利算符,满足周期性边界条件  $S_{N+l}^\alpha = S_l^\alpha$ ,  $N$  为系统格点的数目,最近邻两自旋相互作用恒为 1,三自旋相互作用强度为  $\alpha$ ,  $h$  为横向外场. 通过连续实施 Jordan—Wigner 变换和傅里叶变换,可以将哈密顿量(1)变为对角化的形式

$$H = \sum_k \varepsilon_k (c_k^\dagger c_k - \frac{1}{2}), \quad (2)$$

其中  $\varepsilon_k = -[h + \cos k - \frac{\alpha}{2} \sin(2k)]$  为无相互作用的无自旋的费米子能谱,波矢  $k$  满足  $k = 2\pi m/N$ ,当  $N$  为偶数时  $m = -(N-1)/2, \dots, -1/2, 1/2, \dots, (N-1)/2$ ,当  $N$  为奇数时,  $m = -N/2, \dots, 0, \dots, N/2$ ,不失一般性,文中假设自旋链格点总数  $N$  为偶数. 于是系统的基态能量为  $E_0 = \sum_k \varepsilon_k \Theta(-\varepsilon_k)$ ,这里  $\Theta(x)$  为赫维赛德阶跃函数

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases} \quad (3)$$

文献[24]研究了该模型的量子相变. 模型的相图由图 1(a)给出<sup>[27]</sup>,虚线表示两个无能隙的自旋液体相 I、II 之间的量子相变,实线表示自旋液体相 II 和有能隙的量子相 III 之间的量子相变. 所有的相变都属于二级相变. 自旋液体相 I、II 的  $k$  空间能谱函数分别具有 2 个和 4 个零点,且两相中自旋格点之间具有不同的关联函数. 量子相 III 的能谱函数无零点,磁化强度达到饱和. 图 1(b)对应给出了图 1(a)中 3 个相

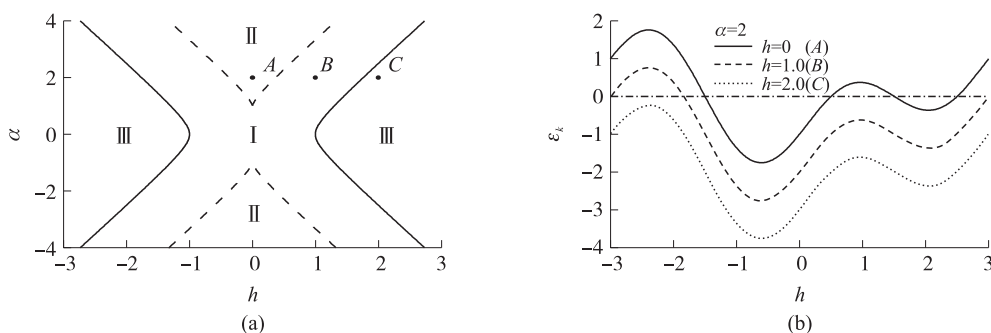


图 1 模型相图(a)与典型的  $k$  空间能谱(b)

Fig. 1 The phase diagram of the model(a) and three typical energy spectrum functions in  $k$ -space(b)

的典型位置  $A(0,2)$ 、 $B(1,2)$  和  $C(2,2)$   $k$  空间的能谱函数,可以看出给定三自旋相互作用强度  $\alpha=2$ , 对应的费米零点个数分别为 4、2 和 0. 沿图 1(a) 中  $\alpha=2$  从 0 逐渐增加横场, 数值结果显示系统分别在  $h_{c1}=0.369\ 01$  处和  $h_{c2}=1.760\ 17$  处连续发生两次相变.

## 1.2 经典关联与量子关联

量子失协(即文中量子关联)源于经典信息论里两种等价的互信息的表示在量子领域里的不等价性. 根据模型哈密顿量的对称性(Z2 对称性), 不考虑自发的对称破缺效应, 位于  $m, n$  两格点的自旋约化密度算符在自然基矢下可以表示为<sup>[28]</sup>,

$$\rho_{mn} = \begin{pmatrix} u_+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_1 & z & 0 \\ 0 & z^* & \omega_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_+ \end{pmatrix}, \quad (4)$$

式中的矩阵元用自旋关联函数表示为,

$$u_{\pm} = (0.5 \pm M^z)^2 - |g_{mn}|^2, \omega_1 = 0.25 - (M^z)^2 + |g_{mn}|^2 = \omega_2, z = g_{mn}^*. \quad (5)$$

磁化强度  $M^z = g_{mn} - 0.5$ , 两格点关联矩阵元

$$g_{mn} = \langle c_m^+ c_n \rangle = \frac{1}{N} \sum_k \frac{e^{ik(m-n)}}{1 + e^{\beta \varepsilon_k}}, \quad (6)$$

这里取玻尔兹曼常数  $k=1$ , 因而  $\beta=1/T$ .

对于一个量子双体系统  $\rho^{AB}$ , 量子互熵从信息论的角度给出了两个子系统  $A$  和  $B$  之间共有的总关联, 表示为,

$$I(\rho^{AB}) = S(\rho^A) + S(\rho^B) - S(\rho^{AB}), \quad (7)$$

式中:  $S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log_2 \rho)$  是 von Neumann 熵,  $\rho^A, \rho^B$  分别表示子系统  $A, B$  各自的约化密度算符, 通过对复合系统整体求偏迹得到.

量子失协度量了量子态中的全部非经典关联, 定义为总关联与经典关联的差<sup>[5,6]</sup>,

$$C(\rho^{AB}) = S(\rho^A) - \min_{\{B_k\}} S(\rho^A | B), \quad (8)$$

$$D(\rho^{AB}) = I(\rho^{AB}) - C(\rho^{AB}), \quad (9)$$

式中:  $C(\rho^{AB})$  表示该复合量子系统中关联的经典部分,  $S(\rho^A | B) = \sum_k p_k S(\rho_k^A)$  表示对其中的一个子系统

比如  $B$  单独实施完备的 von Neumann 测量  $\{B_k\}$  的量子条件熵,  $\rho_k^{AB} = \frac{(I_A \otimes B_k) \rho^{AB} (I_A \otimes B_k)}{p_k}$  表示测量后的

系统的状态以及相应的概率,  $p_k = \text{Tr}[(I_A \otimes B_k) \rho^{AB} (I_A \otimes B_k)]$ . 对于纯态, 量子关联和经典关联都等于纠缠熵; 对于一般的混合态, 纠缠只是非经典关联的一部分.

## 2 结果与讨论

### 2.1 无三自旋相互作用时的经典与量子关联

为了便于比较, 我们首先考虑当三自旋相互作用为零时的经典与量子关联.

图 2 给出了三自旋相互作用  $\alpha=0$  时的各种关联随外场的变化. 可以看出, 总关联(QMI)、经典关联(CC)和量子关联(QD)都随着外磁场的增大单调下降, 并都在临界点  $h_c=1$  附近迅速减弱为零. 其次, 在外场  $h=0$  时, 可以看到, 总关联被平均地分成经典关联和量子关联两部分. 这是因为, 当外场等于零时, 系统的磁化强度  $M^z=0$ , 由于局域幺正变换不改变子系统的关联(包括纠缠), 因而两格点密度矩阵可以写作

$$\rho_{mn} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1-b^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+b^2 & 2b & 0 \\ 0 & 2b & 1+b^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-b^2 \end{pmatrix}, \quad (10)$$

式中:  $b=2|g_{mn}|$ , 这实际上是一个简化的贝尔对角态, 容易看出其本征值分别为

$$\lambda_{1,2} = \frac{1-b^2}{4}, \lambda_{3,4} = \frac{(1\pm b)^2}{4}. \quad (11)$$

此时每一个子系统都是最大混合态  $S(\rho^A) = S(\rho^B) = 1$ , 因而总关联

$$I(\rho^{AB}) = 2 + \sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i = 2 + (1+b) \log_2 \frac{1+b}{2} + (1-b) \log_2 \frac{1-b}{2}. \quad (12)$$

根据文献[27], 贝尔对角态的量子关联具有解析的结果

$$D(\rho^{AB}) = 1 + H(t), \quad (13)$$

式中:  $t = \max(b, b^2)$ ,  $H(x) = \frac{1+x}{2} \log_2 \frac{1+x}{2} + \frac{1-x}{2} \log_2 \frac{1-x}{2}$ . 因此, 量子关联恰好是总关联的一半.

当磁场非零时, 每个格点的自旋部分极化, 磁化强度  $M^z$  有限, 因而方程(4)给出的两格点密度矩阵是一个一般的  $X$  态, 其经典与量子关联只能借助于数值方法计算. 图 2 表明, 关联的量子部分总是不大于其经典部分.

当  $h > h_c$  时, 系统的能谱完全小于零(另一个区中完全大于零), 因而两格点关联函数  $g_{mn} = 1.0$ , 所以磁化强度  $M^z = 0.5$ , 即每一个格点上的自旋都被完全极化, 处于状态  $|\uparrow \uparrow \uparrow \dots\rangle$ , 因此任意两个格点之间均处于无任何关联的、可分离的状态.

## 2.2 三自旋相互作用对经典和量子关联的影响

图 3 给出了三自旋相互作用  $\alpha$  取不同值时经典关联(a、b)和量子关联(c、d)随外场的变化.

当三自旋相互作用  $\alpha < 1$  时, 随外磁场的增加, 在进入有能隙的量子相 III 之前, 经典和量子关联都是单调减弱的; 在进入相 III 之后, 量子关联都减小为零. 总体来看, 三自旋相互作用的增加, 降低了外场对于经典和量子关联的影响. 其次, 经典关联和量子关联在零外场时的值都相同, 与三自旋相互作用的大小无关, 仅在这一点, 总关联被均分为经典和量子两部分. 原因在于, 在  $\alpha < 1$  时由于最近邻格点关联矩阵元  $b$  与三自旋相互作用无关.

若三自旋相互作用  $\alpha > 1$ , 经典关联和量子关联不再随外场单调变化: 随外场的增加先增加到某一最大值, 然后随外场增加减小, 最后在进入有能隙的量子相 III 之后, 减小为零. 随  $\alpha$  的增加, 关联的极大值点和

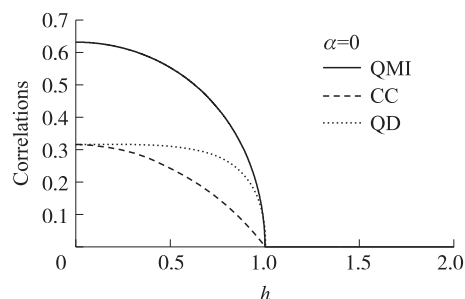


图 2 三自旋相互作用  $\alpha=0$  时的各种关联随外场的变化,  $N=65536$

Fig. 2 The dependence of correlations on the transverse field in case of three-spin interactions  $\alpha=0$ ,  $N=65536$

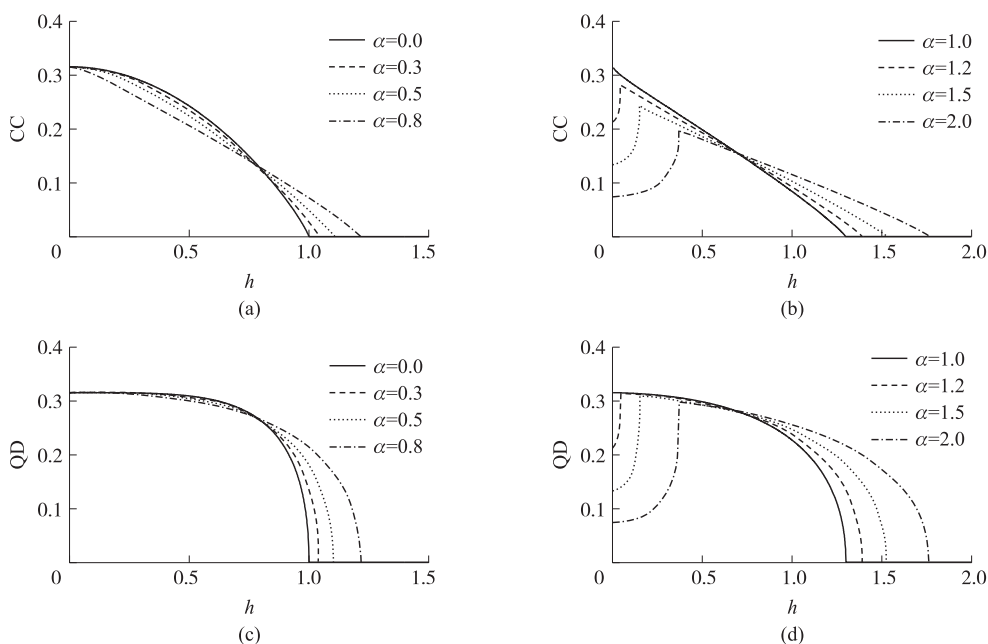


图 3 三自旋相互作用  $\alpha$  取不同值时经典关联(a、b)和量子关联(c、d)随外场的变化,  $N=65536$

Fig. 3 The dependence of classical correlations(a,b) and quantum correlations(c,d) on the transverse field for different three-spin interactions, in all cases,  $N=65536$

减弱为零的点对应的外场的值也越大. 这些点对应的正是量子相变的临界点. 与  $\alpha < 1$  的情形相似, 随  $\alpha$  的增加, 需要更大的外场来消除相邻个点之间的经典与量子关联. 其次, 不同于  $\alpha < 1$  的情形, 经典关联和量子关联在零外场时的值仍然相同, 总关联被均分为经典和量子两部分, 此时, 尽管磁化强度仍然为零, 两格点密度矩阵仍然满足贝尔对角态的形式, 但是最近邻格点关联矩阵元  $b$  随三自旋相互作用的增加而减小, 因而关联的值依赖于与三自旋相互作用的大小.

### 2.3 关联与量子相变

文献[19,20]讨论了单纯由三自旋相互作用驱动的量子相变和关联的关系, 发现量子失协对于三自旋相互作用的一阶导数的奇异性可以忠实地体现出相变的临界点即相变的阶数. 但是, 对于外磁场非零时, 作者并没有讨论. 这里给定三自旋相互作用强度(以  $\alpha = 2$  为例), 考察由外场驱动的量子相变与关联的关系. 此时, 随外场的变化, 系统在  $h_{c1} = 0.369\ 01$  处经历一个从无能隙的自旋液体 I 相到另一个无能隙的自旋液体 II 相的量子相变, 然后在  $h_{c2} = 1.760\ 17$  处经历从无能隙的自旋液体 II 相到有能隙的量子相 III 的相变, 所有的相变都属于二阶相变.

图 4 给出了经典关联(a)与量子关联(b)的一阶导数随外场的变化. 显然, 经典关联和量子关联的一阶导数随外场的变化, 有两个不连续的位置, 这两个位置分别与两个临界点对应一致. 然而, 不同于一般横场量子 Ising 模型的临界点的关联导数的对数发散, 作者数值计算了不同系统的尺寸, 从数千个到数万个格点, 经典关联和量子关联的导数的极值并不随系统的尺寸有明显的变化. 可见, 对于这种无能隙量子相参与的量子相变, 其关联的导数的临界行为不同于通常的有能隙的量子相变. 改变三自旋相互作用  $\alpha$  的大小, 结论不变, 文中不再给出相关图形.

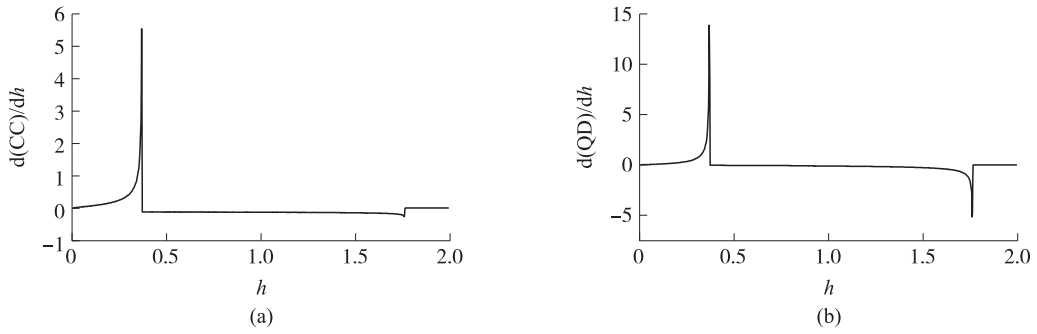


图 4 经典关联(a)与量子关联(b)的导数随外场的变化,  $\alpha = 2, N = 65\ 536$

Fig. 4 The derivatives of classical correlations(a) and quantum discord(b) with respect to transverse field as functions of field, in all cases,  $N = 65\ 536$

## 3 结语

借助于严格对角化方法, 数值研究了具有 XZY-YZX 型三自旋相互作用的横场 XX 自旋链中近邻格点间的经典和量子关联. 给定三自旋相互作用, 经典和量子关联随外场的变化相似. 当三自旋相互作用  $\alpha < 1$  时, 经典与量子关联都随外场的增加单调下降. 零外场时的总关联被均分为经典和量子两部分, 关联的值与三自旋相互作用无关. 当三自旋相互作用  $\alpha > 1$  时, 经典和量子关联随外场先逐渐增加至其最大值, 然后减小, 在进入有能隙的量子相后所有的关联消失. 相似地, 零外场时的总关联同样被均分为经典和量子两部分, 但是其数值随三自旋相互作用的增加而减小. 在退化条件下(当外场为零时), 本文得到与文献[19, 20]相同的结论.

经典与量子关联的一阶导数在临界点附近不连续, 忠实地体现了量子相变的阶数和临界点的位置. 但是关联的临界行为与通常横场 Ising 自旋链中导数在临界点附近的对数发散行为不同. 是否在所有无能隙的量子相参与的量子相变中, 其关联的导数没有尺寸效应, 有待进一步的验证.

### [参考文献]

- [1] Einstein A, Podolsky B, Rosen N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? [J]. Phys



- Rev, 1935, 47: 777–780.
- [2] Nielsen M A, Chuang I L. Quantum Computation and Quantum Information[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2011: 1–169.
- [3] Vedral V. Introduction to Quantum Information Science[M]. Oxford: Oxford University Press, 2006: 44–50.
- [4] Amico L, Fazio R, Osterloh A, et al. Entanglement in many-body systems[J]. Rev Mod Phys, 2008, 80: 517–576.
- [5] Ollivier H, Zurek W H. Quantum discord: a measure of the quantumness of correlations[J]. Phys Rev Lett, 2002, 88: 017901 (1–4).
- [6] Henderson L, Vedral V. Classical, quantum and total correlations[J]. J Phys A, 2001, 34: 6 899–6 905.
- [7] Datta A, Shaji A, Caves M. Quantum discord and the power of one qubit[J]. Phys Rev Lett, 2008, 100: 050502.
- [8] Lanyon B P, Barbieri M, Almeida M P, et al. Experimental quantum computing without entanglement[J]. Phys Rev Lett, 2008, 101: 200501 (1–4).
- [9] Ferraro A, Aolita L, Cavalcanti D, et al. Almost all quantum states have nonclassical correlations[J]. Phys Rev A, 2010, 81: 052318 (1–6).
- [10] Modi K, Brodutch A, Cable H, et al. The classical-quantum boundary for correlations: Discord and related measures[J]. Rev Mod Phys, 2012, 84: 1 655–1 707.
- [11] Sachdev S. Quantum Phase Transitions[M]. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2011: 3–17.
- [12] Dillenschneider R. Quantum discord and quantum phase transition in spin chains[J]. Phys Rev B, 2008, 78: 224 413 (1–7).
- [13] Sarandy M S. Classical correlation and quantum discord in critical systems[J]. Phys Rev A, 2009, 80: 022108 (1–9).
- [14] Maziero J, Guzman H C, Céleri L C, et al. Serra, quantum and classical thermal correlations in the XY spin-1/2 chain[J]. Phys Rev A, 2010, 82: 012106 (1–6).
- [15] Werlang T, Gustavo Rigolin. Thermal and magnetic quantum discord in Heisenberg models[J]. Phys Rev A, 2010, 81: 044101 (1–4).
- [16] Werlang T, Ribeiro G A P, Gustavo Rigolin. Quantum correlations in spin chains at finite temperatures and quantum phase transitions[J]. Phys Rev Lett, 2010, 105: 095702 (1–4).
- [17] Werlang T, Ribeiro G A P, Gustavo Rigolin. Spotlighting quantum critical points via quantum correlations at finite temperatures[J]. Phys Rev A, 2011, 83: 62334 (1–10).
- [18] Li Yanchao, Lin Haiqing. Thermal quantum and classical correlations and entanglement in the XY spin model with three-spin interaction[J]. Phys Rev A, 2011, 83: 052323 (1–7).
- [19] Altintas F, Eryigit R. Correlation and nonlocality measures as indicators of quantum phase transitions in several critical systems[J]. Annals of Physics, 2012, 327: 3 084–3 107.
- [20] Cheng W W, Shan C J, Sheng Y B, et al. Quantum correlation approach to criticality in the XX spin chain with multiple interaction[J]. Physica B, 2012, 407: 3 671–3 675.
- [21] Liu Benqiong, Shao Bin, Zou Jian. Quantum and classical correlations in isotropic XY chain with three-site interaction[J]. Comm Theor Phys, 2011, 56: 46–50.
- [22] 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: 012308 (1–5).
- [23] Liu Xiaoxian, Zhong Ming, Xu Hui, et al. Chiral phase and quantum phase transitions of anisotropic XY chains with three-site interactions[J]. J Stat Mech, 2012, 1: P01003 (1–15).
- [24] Ping Lou, Wen-Chin Wu, Ming-Che Chang. Quantum phase transition in spin-1/2 XX Heisenberg chain with three-spin interaction[J]. Phys Rev B, 2004, 70: 064405 (1–7).
- [25] Gottlieb D, Rössler J. Exact solution of a spin chain with binary and ternary interactions of Dzialoshinsky-Moriya type[J]. Phys Rev B, 1999, 60: 9 232–9 235.
- [26] Min-Fong Yang. Reexamination of entanglement and the quantum phase transition[J]. Phys Rev A, 2005, 71: 030302 (1–4).
- [27] Topilko M, Krokhmalkii T, Derzhko O, et al. Magnetocaloric effect in spin-1/2 XX chains with three-spin interactions[J]. The European Physical Journal: B, 2012, 85: 278 (1–9).
- [28] Osborne T J, Nielsen M A. Entanglement in a simple quantum phase transition[J]. Phys Rev A, 2002, 66: 032110 (1–14).