

用李代数方法解析研究线性三原子分子 振动的动力学纠缠*

冯海冉^{1)†} 李 鹏¹⁾ 郑雨军²⁾ 丁世良²⁾

1) (济宁学院物理与信息工程系, 济宁 273155)

2) (山东大学物理学院, 济南 250100)

(2009 年 10 月 26 日收到; 2009 年 11 月 10 日收到修改稿)

采用李代数方法研究了线性三原子分子非线性伸缩振动的动力学纠缠, 给出了描述纠缠行为的线性熵和冯诺伊曼熵的解析表达式, 并分别讨论了初态为 Fock 态和相干态下的 HCN 和 DCN 分子伸缩振动纠缠的动力学性质.

关键词: 李代数, 动力学纠缠, 振动

PACC: 0365F, 3190, 0367

1. 引 言

量子纠缠是量子力学中奇妙特性之一, 量子纠缠态被用于量子密钥分配、量子浓缩编码、量子隐形传态、量子纠错码、量子计算等领域^[1-6], 对量子纠缠的深入研究无论是对量子信息的基本理论还是对未来潜在的实际应用都将产生深远的影响. 虽然纠缠的定义本身并没有动力学特征, 但是纠缠态的制备与传输却都是动力学过程, 因此关于不同体系下量子纠缠动力学问题的探讨逐渐成为此领域研究热点^[7-10]. 用多原子分子的振动态作为一般量子计算^[11]的想法被提出后, 对基于分子本征振动态的量子计算和量子分子计算机等引起了理论工作者的极大兴趣. 利用纠缠是实现量子分子计算机的重要环节之一, 目前有关量子纠缠特性的研究大部分集中在对理想模型的探讨, 而对实际分子体系涉及较少. 由于分子的高振转态是具有较强相互作用的多体体系, 这成为研究分子振动纠缠特性的一个困难, 而代数方法可方便地构造分子体系振转自由度的代数哈密顿算符, 并可解析地推导出体系的约化密度矩阵表达式, 为进一步研究振动的动力学纠缠问题奠定了基础. 本文采用二次型非谐振子李代数模型给出线性三原子分子体系的代数哈密顿, 此

前我们已经利用此哈密顿成功地研究了小分子在强激光场中振动激发的解析控制问题^[12,13], 这里采用此哈密顿研究实际分子体系非线性伸缩振动的动力学纠缠性质, 分别讨论了 HCN 和 DCN 分子在两种不同类型初态下振动纠缠的动力学行为.

2. 理 论

量子系统中的动力学纠缠可用线性熵和冯诺伊曼熵来描述^[14,15]

$$S_L(t) = 1 - \text{Tr}_1[\rho_1(t)^2], \quad (1)$$

$$S_V(t) = -\text{Tr}_1[\rho_1(t) \ln \rho_1(t)], \quad (2)$$

其中 $\rho_1(t) = \text{Tr}_2 \rho(t)$ 为约化密度矩阵. $\rho(t)$ 为体系密度算符, 定义如下:

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|, \quad (3)$$

由此可见, 若要得到度量量子纠缠的物理量线性熵和冯诺伊曼熵随时间的演化规律, 必须先求得体系的约化密度矩阵 $\rho_1(t)$.

已知线性三原子分子哈密顿的代数形式为^[12,13]

$$\hat{H} = \hbar\omega_{01} \left(\hat{A}_{1+} \hat{A}_{1-} + \frac{\hat{I}_{01}}{2} \right) + \hbar\omega_{02} \left(\hat{A}_{2+} \hat{A}_{2-} + \frac{\hat{I}_{02}}{2} \right)$$

* 国家自然科学基金 (批准号: 10874102), 山东省博士基金 (批准号: 2008BS01017) 资助的课题.

† E-mail: hairanfeng@mail.sdu.edu.cn

$$-\lambda(\hat{A}_{1+}\hat{A}_{2-} + \hat{A}_{2+}\hat{A}_{1-}), \quad (4)$$

ω_{01}, ω_{02} 代表键的振动频率, λ 为两个振子的耦合系数.

对不含时哈密顿的量子系统, 体系状态的演化可以表述为

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \hat{U}(t) |\Psi(0)\rangle \\ &= \exp(-i\hat{H}t/\hbar) |\Psi(0)\rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

其中 $|\Psi(0)\rangle$ 为量子系统的初始态.

下面分别给出两种不同形式的初始态 fock 态和相干态的理论推导公式.

2.1. fock 态

体系初始态为 fock 态的形式如下:

$$\begin{aligned} |\Psi(0)\rangle &= |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \\ &\equiv |n_0, n - n_0\rangle, \end{aligned} \quad (6)$$

其中 $n = n_1 + n_2, n_0$ 为 0 到 n 的任意整数.

由方程(4), (5)和(6)可得到体系状态随时间演化的解析表达式

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \exp(-i\hat{H}t) |n_0, n - n_0\rangle \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-it)^k}{k!} \hat{H}^k |n_0, n - n_0\rangle \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\substack{\min\{k, n-n_0\} \\ \max\{-k, -n_0\}}} Y_k^j(t) |n_0 + j, n - n_0 - j\rangle \\ &= \sum_{j=-n_0}^{n-n_0} Y^j(t) |n_0 + j, N - n_0 - j\rangle, \end{aligned} \quad (7)$$

其中 $Y^j(t) = \sum_{k=\lceil j \rceil}^{\infty} Y_k^j(t)$, $\hbar = 1$ (为了方便计算取原子单位). $|Y^j(t)|^2$ 代表了态矢 $|n_0 + j, N - n_0 - j\rangle$ 在 t 时刻的概率, 其大小由 $Y_k^j(t)$ 决定. $Y_k^j(t)$ 为递推式, 即

$$\begin{aligned} Y_k^j(t) &= -\frac{it}{k} \{ \eta_0(n_0 + j, n - n_0 - j) Y_{k-1}^j(t) \\ &\quad + \eta_+(n_0 + j, n - n_0 - j) Y_{k-1}^{j+1}(t) \\ &\quad + \eta_-(n_0 + j, n - n_0 - j) Y_{k-1}^{j-1}(t) \}, \end{aligned} \quad (8)$$

其中函数 η_0, η_+, η_- 的表达式如下:

$$\begin{aligned} \eta_0(n_1, n_2) &= \hbar\omega_{01}(n_1^2 - x_{01}n_1^2) \\ &\quad + \hbar\omega_{02}(n_2^2 - x_{02}n_2^2), \\ \eta_+(n_1, n_2) &= -\lambda \sqrt{(1 - x_{01}n_1)(n_1 + 1)} \\ &\quad \times \sqrt{[1 - x_{02}(n_2 - 1)]n_2}, \\ \eta_-(n_1, n_2) &= -\lambda \sqrt{[1 - x_{01}(n_1 - 1)]n_1} \\ &\quad \times \sqrt{(1 - x_{02}n_2)(n_2 + 1)}, \end{aligned} \quad (9)$$

式中 $n_1 = n_0 + j, n_2 = n - n_0 - j; x_{01}, x_{02}$ 为线性三原子分子的两个键振动的非谐性参数^[12,13,16]. (8) 式中当 $k=0$ 时, $Y_0^j(t) = \delta_{0,j}$.

将方程(7)代入(3)式即可得到约化密度矩阵的解析表达式

$$\begin{aligned} \rho_1(t) &= \text{Tr}_2 \rho(t) = \sum_{n_2} \langle n_2 | \rho(t) | n_2 \rangle \\ &= \sum_{j=-n_0}^{n-n_0} \sum_{j'=-n_0}^{n-n_0} Y^j(t) Y^{j'}(t)^* |n_0 + j\rangle \langle n_0 + j'| \delta_{jj'} \\ &= \sum_{j=-n_0}^{n-n_0} |Y^j(t)|^2 |n_0 + j\rangle \langle n_0 + j|. \end{aligned} \quad (10)$$

最后, 把方程(10)代入(1)和(2)式, 就可得到线性熵和冯诺伊曼熵的具体表达式为

$$\begin{aligned} S_L(t) &= 1 - \text{Tr}_1[\rho_1(t)^2] \\ &= 1 - \sum_{j=-n_0}^{n-n_0} |Y^j(t)|^4, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} S_V(t) &= -\text{Tr}_1[\rho_1(t) \ln \rho_1(t)] \\ &= -\sum_{j=-n_0}^{n-n_0} |Y^j(t)|^2 \ln |Y^j(t)|^2. \end{aligned} \quad (12)$$

2.2. 相干态

体系初始态为相干态的形式如下^[17]:

$$|\Psi(0)\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2 + |\beta|^2}{2}} \sum_{n_1, n_2} \frac{\alpha^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{\beta^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} |n_1, n_2\rangle, \quad (13)$$

其中 α, β 为相干幅度, 为简化计算这里取 $\alpha = \beta$ 为一实数, 则上式可改写为

$$\begin{aligned} |\Psi(0)\rangle &= e^{-\alpha^2} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n_1, n_2=0}^n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n_1! n_2!}} |n_1, n_2\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n_0=0}^n \varepsilon_{n_0, n-n_0} |n_0, n - n_0\rangle, \end{aligned} \quad (14)$$

其中 $\varepsilon_{n_0, n-n_0} = e^{-\alpha^2} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n_0! (n-n_0)!}}$.

参考 Fock 态下的推导过程, 可得到体系状态随时间演化的公式为

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \exp(-i\hat{H}t) \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n_0=0}^n \varepsilon_{n_0, n-n_0} |n_0, n - n_0\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n_j=0}^n Y_{n_j, n-n_j}(t) |n_j, n - n_j\rangle, \end{aligned} \quad (15)$$

其中 $Y_{n_j, n-n_j}(t) = \sum_{k=0}^{\infty} Y_k^{(n_j, n-n_j)}(t)$. $Y_k^{(n_j, n-n_j)}(t)$ 仍为递推式,

$$\begin{aligned}
 Y_k^{(n_j, n-n_j)}(t) = & -\frac{it}{k} \{ \eta_0(n_j, n-n_j) Y_{k-1}^{(n_j, n-n_j)}(t) \\
 & + \eta_+(n_j, n-n_j) Y_{k-1}^{(n_j+1, n-n_j-1)}(t) \\
 & + \eta_-(n_j, n-n_j) Y_{k-1}^{(n_j-1, n-n_j+1)}(t) \}, (16)
 \end{aligned}$$

函数 η_0, η_+, η_- 的表达式同(9)式, 只是 $n_1 = n_j, n_2 = n - n_j$.

约化密度矩阵的表达式为

$$\begin{aligned}
 \rho_1(t) = \text{Tr}_2 \rho(t) = & \sum_{n_2} \langle n_2 | \rho(t) | n_2 \rangle \\
 = & \sum_{n, n_j} \sum_{n', n'_j} Y_{n_j, n-n_j}(t) Y_{n'_j, n'-n'_j}(t)^* \\
 & \times |n_j\rangle \langle n'_j| \delta_{n-n_j, n'-n'_j}. (17)
 \end{aligned}$$

可以看出此时的约化密度矩阵是非对角的. 因此线性熵与冯诺伊曼熵的求解不同于 Fock 态,

$$\begin{aligned}
 S_L(t) = & 1 - \text{Tr}_1 [\rho_1(t)^2] \\
 = & 1 - \sum_k^{n_{\max}} \gamma_k(t)^2, (18)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 S_V(t) = & -\text{Tr}_1 [\rho_1(t) \ln \rho_1(t)] \\
 = & -\sum_k^{n_{\max}} \gamma_k(t) \ln \gamma_k(t), (19)
 \end{aligned}$$

其中 $\gamma_k(t)$ 为约化密度算符的本征值. 需要说明的是(15)式中对 n 的求和原则上是趋向无穷的, 但计算中发现 $\sum_{n=0}^{n_{\max}} \sum_{n_0=0}^n |\varepsilon|^2$ 的结果是趋于收敛的, 因此计算中只取到收敛时的 $n = n_{\max} = 22$.

3. 计算结果和讨论

以线性三原子分子 HCN 和 DCN 为例, 研究其伸缩振动纠缠的动力学性质. 已经根据分子代数哈密顿(4) 计算出了这两个分子的伸缩振动能级, 结果与实验值符合较好^[12], 相关分子参数也参见此文献. 计算中发现线性熵与冯诺伊曼熵随时间变化的规律具有相似性, 因此这里只给出冯诺伊曼熵的相关结果.

3.1. Fock 态下的振动纠缠

对分子振动初态为 Fock 态的情况, 选取总的振动量子数分别为 $n = 5$ 和 $n = 10$ 的五个振动初态, 计算了其相应的冯诺伊曼熵随时间的变化规律. 图 1 中的曲线从右到左对应的振动初态分别为: $|0, 5\rangle, |1, 4\rangle, |2, 3\rangle, |4, 1\rangle$ 和 $|5, 0\rangle$, 从图中可以看出对局域模式的振动初态 $|0, 5\rangle$ 和 $|5, 0\rangle$, 冯诺伊曼熵随时间变化曲线呈现准周期特点, 且 DCN 分子熵的

振动周期长于 HCN 分子熵的振动周期(这个特点在图 2 的振动初态 $|1, 10\rangle$ 中也可观察到); 而对于简正模式的振动初态 $|1, 4\rangle, |2, 3\rangle$ 和 $|4, 1\rangle$, 两分子对应的冯诺伊曼熵随时间的变化行为都是不规律的, 而且其振动幅度值也要比局域模式的振动初态下的熵的振动幅度值大. 随着总的振动量子数的增加, 如图 2 所示, 冯诺伊曼熵的振动幅度值也明显增大. 图 2 中曲线从右到左对应的振动初态分别为: $|0, 10\rangle, |1, 9\rangle, |2, 8\rangle, |3, 7\rangle$ 和 $|4, 6\rangle$, 可以看到随着振动量子数 n_0 的增加, 冯诺伊曼熵随时间的振动曲线趋向无规律特点, 这可以反映出分子能级的振动模式从局域模式过渡到简正模式 (local-to-normal transition). 从上面的分析可以看出, 分子振动的量子纠缠的动力学行为与分子振动初态有密切关系, 且熵振动的变化对应着分子能级振动模式的转换, 这一结论与其他研究结果^[8]是一致的.

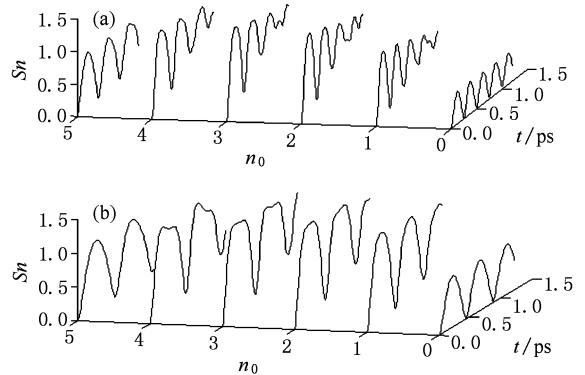


图 1 (a) HCN 分子在不同初态 $|n_0, n-n_0\rangle (n=5, n_0=0-5)$ 下的冯诺伊曼熵 (S_n) 随时间的变化曲线; (b) DCN 分子在不同初态 $|n_0, n-n_0\rangle (n=5, n_0=0-5)$ 下的冯诺伊曼熵 (S_n) 随时间的变化曲线

3.2. 相干态下的振动纠缠

对分子振动初态为相干态 (coherent states) 下的情况, 选取了六个不同且依次增大的相干幅度值, 分别计算了 HCN 和 DCN 分子的冯诺伊曼熵. 图 3 中给出的熵值对应较小的相干幅度, 可以看出相干幅度越小, 熵随时间的变化曲线越规律, 具有近似周期行为; 随着相干幅度的增加, 虽然熵的振动幅度值随之增大, 但其周期性特点消失, 如图 4 所示. 由此可知在相干态下, 若要得到具有周期性行为的熵, 就要选择小的相干幅度, 且这种相干态下获得的纠缠周期要明显长于 fock 态下的纠缠周期, 这在

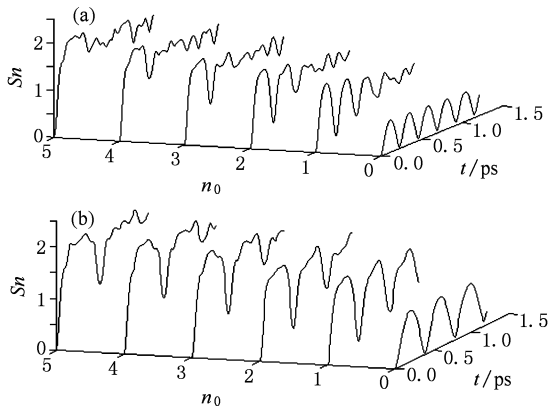


图2 (a) HCN 分子在不同初态 $|n_0, n - n_0\rangle$ ($n = 10, n_0 = 0-5$) 下的冯诺伊曼熵 (S_n) 随时间的变化曲线; (b) DCN 分子在不同初态 $|n_0, n - n_0\rangle$ ($n = 10, n_0 = 0-5$) 下的冯诺伊曼熵 (S_n) 随时间的变化曲线

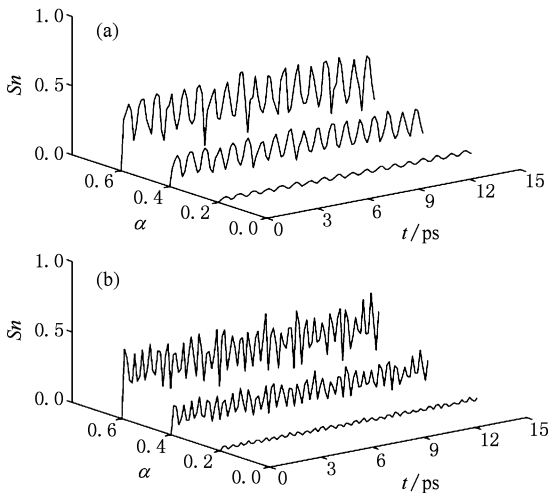


图3 (a) HCN 分子在具有不同相干系数 ($\alpha = 0.2, 0.4, 0.6$) 的相干态下冯诺伊曼熵随时间的变化曲线; (b) DCN 分子在具有不同相干系数 ($\alpha = 0.2, 0.4, 0.6$) 的相干态下冯诺伊曼熵随时间的变化曲线

其他研究中也有关于相关报道^[18]. 值得指出的是长时间

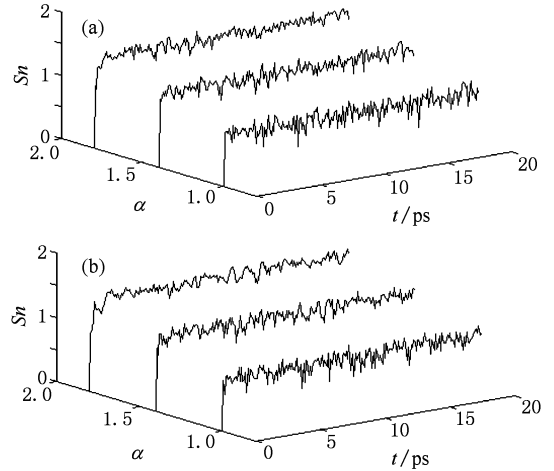


图4 (a) HCN 分子在具有不同相干系数 ($\alpha = 1.0, 1.4, 1.8$) 的相干态下冯诺伊曼熵随时间的变化曲线; (b) DCN 分子在具有不同相干系数 ($\alpha = 1.0, 1.4, 1.8$) 的相干态下冯诺伊曼熵随时间的变化曲线

保持纠缠状态在量子计算与量子信息中更具有应用价值。

4. 结 论

本文利用李代数方法成功地研究了线性三原子分子 HCN 和 DCN 非线性伸缩振动的动力学纠缠性质, 发现其振动纠缠行为与初态的选择有密切关系. 局域模式的振动初态下对应的纠缠比简正模式的振动初态下的纠缠更具有周期性特点, 但其幅度值偏小; 且幅度值的变化对应着能级振动模式的跃迁. 另外, 在小的相干幅度的相干态下可获得周期更长的纠缠. 此方法还可进一步推广到其他分子, 另外, 有关纠缠与混沌的关系的理论研究正在进行中. 对分子振动的量子动力学纠缠特性的研究将有助基于分子振动本征态的量子计算与量子信息方面的发展.

[1] Nielsen M A, Chuang I L 2000 *Quantum Computation and Quantum Information* (United Kingdom: Cambridge University Press)

[2] Vedral V 2002 *Rev. Mod. Phys.* **74** 197

[3] Vidal G, Latorre J I, Rico E, Kitaev A 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 227902

[4] Tamaryan L, Park D, Tamaryan S 2008 *Phys. Rev. A* **77** 022325

[5] Cabello A, Rossi A, Vallone G, Martini F D, Mataloni P 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 040401

[6] Cai J W, Fang M F, Liao X P, Zheng X J 2006 *Chin. Phys.* **15** 492

[7] Donoso A, Zheng Y J, Martens C C 2003 *J. Chem. Phys.* **119** 5010

[8] Hou X W, Wan M F, Ma Z Q 2006 *Chem. Phys. Lett.* **426** 429

[9] Milman P, Keller A 2009 *Phys. Rev. A* **79** 052303

- [10] Cheng C M, Hou X W 2009 *Chin. Phys. B* **18** 2979
- [11] Tesch C M, Kurtz L, Vivie-Riedle R 2001 *Chem. Phys. Lett.* **343** 633
- [12] Feng H R, Ding S L 2007 *J. Phys. B* **40** 69
- [13] Feng H R, Liu Y, Zheng Y J, Ding S L, Ren W Y 2007 *Phys. Rev. A* **75** 063417
- [14] Bennett C H, Bernstein H J, Popescu S, Schumacher B 1996 *Phys. Rev. A* **54** 3824
- [15] Isar A 1999 *Fortschr. Phys.* **47** 855
- [16] Levine R D 1983 *Chem. Phys. Lett.* **95** 87
- [17] Sanz L, Angelo R M, Furuya K 2003 *J. Phys. A* **36** 9737
- [18] Hou X W, Chen J H, Ma Z Q 2006 *Phys. Rev. A* **74** 062513

Dynamical entanglement of vibrations in the linear triatomic molecule by the algebraic approach *

Feng Hai-Ran^{1)†} Li Peng¹⁾ Zheng Yu-Jun²⁾ Ding Shi-Liang²⁾

1) (Department of Physics and Information Engineering, Jining University, Jining 273155, China)

2) (Department of Physics, Shandong University, Jinan 250100, China)

(Received 26 October 2009; revised manuscript received 10 November 2009)

Abstract

In this paper the dynamical entanglements of anharmonic vibrations in the linear triatomic molecules are researched by the Lie algebraic approach. The linear entropy and the Von Neumann entropy are analytically obtained for both initial Fock states and coherent states. The dynamical properties of entanglement in molecules HCN and DCN are discussed.

Keywords: algebra, dynamical entanglement, vibration

PACC: 0365F, 3190, 0367

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10874102), the Doctoral Foundation of Shandong Province of China (Grant No. 2008BS01017).

† E-mail: hairanfeng@mail.sdu.edu.cn