

两格点两电子 Hubbard-Holstein 模型极化子的量子纠缠特性*

任学藻^{1)†} 贺树¹⁾ 丛红璐²⁾ 王旭文¹⁾

1) (西南科技大学理学院, 绵阳 621010)

2) (北京交通大学海滨学院, 黄骅 061100)

(2011年5月11日收到; 2011年9月14日收到修改稿)

本文利用相干态正交化展开方法, 对两格点两电子 Hubbard-Holstein 极化子模型的能谱以及动力学特性进行了精确求解. 讨论了耦合强度 g 、平均声子数 \bar{n} 以及电子初态对纠缠演化特性及系统冯诺依曼熵的影响. 数值计算结果表明: 1) 纠缠度随着时间的演化呈现出良好的周期性, 当其他的参数固定时, 演化周期随耦合强度 g 增大逐渐减小, 与平均声子数 \bar{n} 无关; 2) 系统冯诺依曼熵同电子状态占有率表现出严格的同步演化特性; (3) 在弱耦合强度和低平均声子数下, 初始电子态 $c_{2\uparrow}^+ c_{2\downarrow}^+ |0\rangle$ 或 $c_{1\uparrow}^+ c_{1\downarrow}^+ |0\rangle$ 较 $c_{1\uparrow}^+ c_{2\downarrow}^+ - c_{1\downarrow}^+ c_{2\uparrow}^+$ 具有更大的最大冯诺依曼熵, 并随耦合强度增大、平均声子数的增加而逐渐接近.

关键词: 相干态正交化展开, Hubbard-Holstein 模型, 极化子, 场熵

PACS: 42.50.-p

1 引言

自从 1933 年朗道提出自陷极化子概念以来, 人们对极化子的研究就没有间断过, 然而很多问题现在仍然没有得到满意的回答. 最近, 强关联电子体系的 Hubbard-Holstein(H-H)^[1] 模型成为人们研究的热点, 与传统的 Holstein^[2] 模型相比, Hubbard-Holstein 模型考虑了电子与电子之间的库仑排斥力, 这对模型的求解无疑又增加了更大的难度. 近 20 年来, 人们对两个电子在两个格点之间的运动的 H-H 模型用各种不同的方法进行过求解, 例如变分方法^[3,4], 微扰方法^[5], 数值对角化方法^[6,7], 格林函数法^[8] 等, 对这个模型的求解不仅对这个模型的本身性质有了更好的理解, 而且对无限个格点的极化子也有着很重要的指导作用.

量子纠缠是量子力学最显著的特性之一, 量子纠缠不仅体现了量子态的非定域性, 而且对量子信

息和量子计算有十分重要的意义^[9,10], 也是实现量子隐形传态^[11], 量子密钥分配^[12], 量子编码及量子纠错^[13] 等量子信息过程的重要的基础. 与此同时, 在低温多体物理中, 很多量子现象都与量子纠缠有着很密切的关联, 例如超导现象^[14], 量子霍尔效应以及量子相变. 近年来, 利用熵来度量量子纠缠程度引起了人们的高度重视, 并为此做了大量的工作^[15-18]. 本文利用相干态对角化方法^[19,20] 精确求解了两格点两电子的 H-H 模型的能谱以及电子占有率及冯诺依曼熵的演化.

2 模型与求解

一维系统两格点两电子 H-H 模型的哈密顿量为^[1]

$$H = \sum_{i,\sigma} \varepsilon n_{i\sigma} - \sum_{\sigma} t (c_{1\sigma} + c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^+ c_{1\sigma})$$

* 国家自然科学基金委员会 - 中国工程物理研究院联合基金 (批准号: 10976025/A06) 资助的课题.

† E-mail: rxz63@sohu.com

$$\begin{aligned}
 &+ U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V n_1 n_2 \\
 &+ g \omega_0 \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} (b_i + b_i^+) + \omega_0 \sum_i b_i^+ b_i, \quad (1)
 \end{aligned}$$

其中 i ($= 1$ 或者 2) 表示格点位置, $c_{i,\sigma}$ ($c_{i,\sigma}^+$) 和 b_i (b_i^+) 分别是格点坐标 i 上的 (考虑自旋) 电子和声子的湮没 (产生) 算符; $n_{i,\sigma}$ ($= c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$) 是第 i 个格点上自旋为 σ 的数算符, $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$; t 是裸跃迁积分, g 为电声耦合常数; 为简单起见, 在本文中取 $\hbar = 1$, $\omega_0 = 1$.

下面我们将系统的哈密顿两分成两部分 ($H = H_d + H_a$)^[21], 引入新的声子算符 $a = (b_1 + b_2)/\sqrt{2}$ 和 $d = (b_1 - b_2)/\sqrt{2}$, 因此 (1) 式可变为如下的形式:

$$\begin{aligned}
 H_d = & d^+ d + \varepsilon (c_{1\uparrow}^+ c_{1\uparrow} + c_{1\downarrow}^+ c_{1\downarrow} + c_{2\uparrow}^+ c_{2\uparrow} + c_{2\downarrow}^+ c_{2\downarrow}) \\
 & - t (c_{1\uparrow}^+ c_{2\uparrow} + c_{1\downarrow}^+ c_{2\downarrow} + c_{2\uparrow}^+ c_{1\uparrow} + c_{2\downarrow}^+ c_{1\downarrow}) \\
 & + U (c_{1\uparrow}^+ c_{1\uparrow} c_{1\downarrow}^+ c_{1\downarrow} + c_{2\uparrow}^+ c_{2\uparrow} c_{2\downarrow}^+ c_{2\downarrow}) \\
 & + V [(c_{1\uparrow}^+ c_{1\uparrow} + c_{1\downarrow}^+ c_{1\downarrow}) (c_{2\uparrow}^+ c_{2\uparrow} + c_{2\downarrow}^+ c_{2\downarrow})] \\
 & + \frac{1}{\sqrt{2}} g (c_{1\uparrow}^+ c_{1\uparrow} + c_{1\downarrow}^+ c_{1\downarrow} - c_{2\uparrow}^+ c_{2\uparrow} - c_{2\downarrow}^+ c_{2\downarrow}) \\
 & \times (d^+ + d) - \frac{1}{2} g^2 (c_{1\uparrow}^+ c_{1\uparrow} + c_{1\downarrow}^+ c_{1\downarrow} \\
 & + c_{2\uparrow}^+ c_{2\uparrow} + c_{2\downarrow}^+ c_{2\downarrow})^2, \quad (2)
 \end{aligned}$$

$$H_a = a'^+ a'. \quad (3)$$

在上式中, 已令 $a'^+ = a^+ + ng/\sqrt{2}$, $a' = a + ng/\sqrt{2}$. H_a 是一个只与总的电子数有关的谐振子, 为守恒量. 于是在这个体系中有效哈密顿仅为 H_d 部分, 它代表的是声子和电子之间的线性耦合. 在后面的计算中, 我们只考虑 H_d 部分.

在两电子 H-H 模型中, 电子共有六个态, 其中 $|\psi_1\rangle = c_{1\uparrow}^+ c_{1\downarrow}^+ |0\rangle_e$, $|\psi_2\rangle = c_{2\uparrow}^+ c_{2\downarrow}^+ |0\rangle_e$ 和 $|\psi_3\rangle = (c_{1\uparrow}^+ c_{2\downarrow}^+ - c_{1\downarrow}^+ c_{2\uparrow}^+)/\sqrt{2} |0\rangle_e$ 为总 $S = 0$ 的自旋单态, $|\psi_4\rangle = c_{1\uparrow}^+ c_{2\uparrow}^+ |0\rangle_e$, $|\psi_5\rangle = c_{1\downarrow}^+ c_{2\downarrow}^+ |0\rangle_e$ 和 $|\psi_6\rangle = (c_{1\uparrow}^+ c_{2\downarrow}^+ + c_{1\downarrow}^+ c_{2\uparrow}^+)/\sqrt{2} |0\rangle_e$ 为 $S = 1$ 的自旋三重态, 自旋单态和自旋三种态之间相互独立的, 且系统的最低能量处于自旋单态^[21], 本文研究总自旋为 0 的单态, 这样系统波函数可以写成如下形式^[19]:

$$\begin{aligned}
 |\varphi\rangle = & |\varphi_1\rangle c_{1\uparrow}^+ c_{1\downarrow}^+ |0\rangle_e + |\varphi_2\rangle c_{2\uparrow}^+ c_{2\downarrow}^+ |0\rangle_e \\
 & + |\varphi_3\rangle (c_{1\uparrow}^+ c_{2\downarrow}^+ - c_{1\downarrow}^+ c_{2\uparrow}^+)/\sqrt{2} |0\rangle_e, \quad (4)
 \end{aligned}$$

其中 $|\varphi_1\rangle$, $|\varphi_2\rangle$ 和 $|\varphi_3\rangle$ 是相应的声子部分, 下面将 (2) 式和 (4) 式代入薛定谔方程 $H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$ 中

可以得到^[19]

$$\begin{aligned}
 & [d^+ d + 2\varepsilon + U + \sqrt{2}g(d^+ + d) - 2g^2] \\
 & \times |\varphi_1\rangle - \sqrt{2}t|\varphi_3\rangle = E|\varphi_1\rangle, \quad (5)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & [d^+ d + 2\varepsilon + U + \sqrt{2}g(d^+ + d) - 2g^2] \\
 & \times |\varphi_2\rangle - \sqrt{2}t|\varphi_3\rangle = E|\varphi_2\rangle, \quad (6)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & (d^+ d + 2\varepsilon + V - 2g^2)|\varphi_3\rangle \\
 & - \sqrt{2}t(|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle) = E|\varphi_3\rangle. \quad (7)
 \end{aligned}$$

下面引入新的平移变换 $A^+ = d^+ + \sqrt{2}g$, $B^+ = d^+ - \sqrt{2}g$ ^[22]. 将 $A^+(B^+)$ 代入 (5), (6), (7) 式, 得

$$\begin{aligned}
 & [A^+ A + 2\varepsilon + U - 4g^2]|\varphi_1\rangle - \sqrt{2}t|\varphi_3\rangle \\
 & = E|\varphi_1\rangle, \quad (8)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & [B^+ B + 2\varepsilon + U - 4g^2]|\varphi_2\rangle - \sqrt{2}t|\varphi_3\rangle \\
 & = E|\varphi_2\rangle, \quad (9)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & (d^+ d + 2\varepsilon + V - 2g^2)|\varphi_3\rangle - \sqrt{2}t(|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle) \\
 & = E|\varphi_3\rangle. \quad (10)
 \end{aligned}$$

利用相干态正交化展开方法声子部分的波函数可以展开成如下形式:

$$\begin{aligned}
 |\varphi_1\rangle = & \sum_{n=0}^N c_n |n\rangle_A = \sum_{n=0}^N c_n \frac{1}{\sqrt{n!}} \\
 & \times (d^+ + \sqrt{2}g)^n e^{-\sqrt{2}gd^+ - g^2} |0\rangle_{\text{ph}}, \quad (11)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 |\varphi_2\rangle = & \sum_{n=0}^N d_n |n\rangle_B = \sum_{n=0}^N d_n \frac{1}{\sqrt{n!}} \\
 & \times (d^+ - \sqrt{2}g)^n e^{\sqrt{2}gd^+ - g^2} |0\rangle_{\text{ph}}, \quad (12)
 \end{aligned}$$

$$|\varphi_3\rangle = \sum_{n=0}^N f_n |n\rangle, \quad (13)$$

式中 $|n\rangle_A$, $|n\rangle_B$ 我们称之为平移 Fock 态^[23]. 它们满足正交归一性, 因此 $|n\rangle_A$, $|n\rangle_B$ 和 $|n\rangle$ 分别构成一组新的完备归一基. 计算中将 n 展至一定阶数可使由 (11), (12), (13) 式所表示的波函数在计算能谱和动力学性质时足够精确. 将 (11), (12), (13) 式代入 (8), (9), (10) 式, 并且分别左乘 ${}_A\langle m|$, ${}_B\langle m|$ 和 $\langle m|$ 后得

$$\begin{aligned}
 & [m + 2\varepsilon + U - 4g^2]c_m \\
 & + \sqrt{2}t \sum_n {}_A\langle m|n\rangle f_n = E c_m, \quad (14)
 \end{aligned}$$

$$[m + 2\varepsilon + U - 4g^2]d_m$$

$$+ \sqrt{2t} \sum_n {}_B \langle m|n \rangle f_n = E d_m, \quad (15)$$

$$[m + 2\varepsilon + V - 2g^2] f_m - \sqrt{2t} \left(\sum_n c_n \langle m|n \rangle_A + \sum_n d_n \langle m|n \rangle_B \right) = E f_m, \quad (16)$$

其中

$$\begin{aligned} {}_A \langle m|n \rangle &= \langle m|n \rangle_B = (-1)^n D_{mn}, \\ {}_B \langle m|n \rangle &= \langle m|n \rangle_A = (-1)^m D_{mn}, \end{aligned} \quad (17)$$

$$D_{mn} = e^{-g^2} \sum_{i=0}^{\min[m,n]} (-1)^{-i} \times \frac{\sqrt{m!n!} (\sqrt{2}g)^{m+n-2i}}{(m-i)!(n-i)!i!}. \quad (18)$$

通过求解这 $3N + 3$ 个本征方程, 可以得到系统的本征波函数 $\{c_n^i\}$, $\{d_n^i\}$ 和 $\{f_n^i\}$ 以及能谱 $\{E^i\}$.

图 1 给出当 $\bar{n} = 9, t = 2, U = 6, V = 0.2, \varepsilon = 0.2$, 系统的定态能量 E/t 随 g^2/t 的变化图. 图中给出了系统基态和前五条激发态的能谱. 可以看出, 随着耦合强度 g 的增大, 各能级能量均逐渐降低.

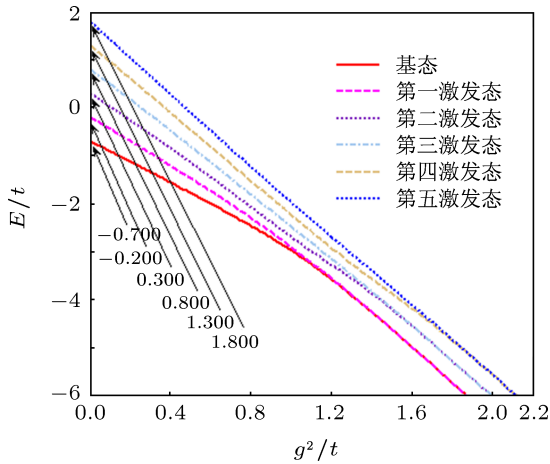


图 1 系统的定态能谱 ($\bar{n} = 9, t = 2, U = 6, V = 0.2, \varepsilon = 0.2$)

3 演化计算

3.1 系统占有率

设初始时刻电子处于 $(c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger - c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger) / \sqrt{2} |0\rangle_e$,

而声子场处于相干态, 则初态可以表示为

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= e^{\alpha_0 d^+ - (1/2)\alpha_0^2} |0\rangle \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger - c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger) |0\rangle_e \\ &= \sum_{i=1}^{3N+3} k_i \left[\sum_{n=0}^N c_n^i |n\rangle_A c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle_e + \sum_{n=0}^N d_n^i |n\rangle_B c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle_e + \sum_{n=0}^N f_n^i |n\rangle \frac{1}{\sqrt{2}} \right. \\ &\quad \left. \times (c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger - c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger) |0\rangle_e \right]. \end{aligned} \quad (19)$$

利用 $c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle_e$, $c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle_e$ 和 $(c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger - c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger) / \sqrt{2} |0\rangle_e$ 之间正交归一性, 比较 (19) 式的系数, 可以得到

$$\begin{aligned} e^{\alpha_0 d^+ - (1/2)\alpha_0^2} |0\rangle &= \sum_{i=1}^{3N+3} k_i \sum_{n=0}^N f_n^i |n\rangle, \\ \sum_{i=1}^{3N+3} k_i \sum_{n=0}^N c_n^i |n\rangle_A &= 0, \\ \sum_{i=1}^{3N+3} k_i \sum_{n=0}^N d_n^i |n\rangle_B &= 0. \end{aligned} \quad (20)$$

对 (20) 式三个方程分别左乘 $\langle m|$, ${}_A \langle m|$ 和 ${}_B \langle m|$, 则 (20) 变为

$$\frac{1}{\sqrt{m!}} \alpha_0^m e^{-(1/2)\alpha_0^2} = \sum_{i=1}^{3N+3} k_i f_m^i, \quad (21)$$

$$\sum_{i=1}^{3N+3} k_i c_m^i = 0, \quad (22)$$

$$\sum_{i=1}^{3N+3} k_i d_m^i = 0. \quad (23)$$

通过求解 (11) 式组成的三个方程组, 可以得到 $\{k_i\}$, ($i = 1, \dots, 3N + 3$). 因此任意时刻的波函数可表示为

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_{i=1}^{3N+3} k_i e^{-iE_i t} \left[\sum_{n=0}^N c_n^i |n\rangle_A c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle_e + \sum_{n=0}^N d_n^i |n\rangle_B c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle_e + \sum_{n=0}^N f_n^i |n\rangle \right. \\ &\quad \left. \times \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger - c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger) |0\rangle_e \right]. \end{aligned} \quad (24)$$

为了得到电子在 $(c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger - c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger) / \sqrt{2} |0\rangle_e$ 态上波函数随时间的演化情况, 我们将所得到的波函

数投影到 $(c_{1\uparrow}^+c_{2\downarrow}^+ - c_{1\downarrow}^+c_{2\uparrow}^+)/\sqrt{2}|0\rangle_e$ 矢态上, 即

$$e\langle 0|\frac{1}{\sqrt{2}}(c_{2\downarrow}c_{1\uparrow} - c_{2\uparrow}c_{1\downarrow})|\psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^{3N+3} k_i e^{-iE_i t} \sum_{n=0}^N f_n^i |n\rangle. \quad (25)$$

由此可以得到电子处在 $(c_{1\uparrow}^+c_{2\downarrow}^+ - c_{1\downarrow}^+c_{2\uparrow}^+)/\sqrt{2}|0\rangle_e$ 态的概率为

$$P = \sum_{i,j=1}^{3N+3} k_j^* k_i e^{-i(E_j - E_i)t} \sum_{n=0}^N f_n^{j*} f_n^i. \quad (26)$$

3.2 冯诺依曼熵的时间演化

在量子通信和量子计算中, 量子纠缠具有广泛的作用, 而如何找到一个好的办法来度量量子纠缠

是十分重要的. 自从 Phoenix 和 Knight 等人将熵理论用于量子光学领域以来, 熵在解释光场与原子的关联程度、光场与原子相互作用时所呈现的量子效应方面都显示出了很强的优越性, 尤其人们发现可以利用场熵来度量光场与原子之间的纠缠程度, 从而更好的制备纠缠态来实现量子通信和量子计算. 近年来, 人们对场熵在极化子中的意义也在不断的研究中 [24-26], 并且成为当今的一个热点问题.

量子系统的冯诺依曼熵 (场熵) 定义为

$$S = -\text{Tr}(\rho \ln \rho),$$

式中 ρ 为量子系统的密度算符,

$$\rho = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$$

那么电子的约化密度矩阵

$$\rho_e = \text{Tr}_h |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$$

$$= \sum_{ij=0}^{3N} k_j^* k_i e^{-i(E_i - E_j)t} \begin{bmatrix} \sum_{m=0}^N c_m^{(i)} c_m^{(j)*} & \sum_{nm=0}^N c_n^{(i)} d_m^{(j)*} \langle m|n\rangle_A & \sum_{nm=0}^N c_n^{(i)} f_m^{(j)*} \langle m|n\rangle_A \\ \sum_{nm=0}^N d_n^{(i)} c_m^{(j)*} \langle m|n\rangle_B & \sum_{m=0}^N d_m^{(i)} d_m^{(j)*} & \sum_{nm=0}^N d_n^{(i)} f_m^{(j)*} \langle m|n\rangle_B \\ \sum_{nm=0}^N f_n^{(i)} c_m^{(j)*} \langle m|n\rangle & \sum_{nm=0}^N f_n^{(i)} d_m^{(j)*} \langle m|n\rangle & \sum_{m=0}^N f_m^{(i)} f_m^{(j)*} \end{bmatrix}.$$

对于 (19) 式所示的初态, 声子和电子均处于纯态, 整个系统的场熵为零, 在 $t \geq 0$ 的任意时刻, 声子与电子的场熵相等. 因此可利用电子约化密度矩阵得到量子系统的场熵 [27]

$$S_h(t) = S_e(t) = -\text{Tr}\{\rho_e(t) \ln \rho_e(t)\} = -\sum_k \lambda_k \ln \lambda_k, \quad (27)$$

式中 λ_k ($k = 1, 2, 3$) 为电子约化密度矩阵的本征值.

4 数值计算结果及讨论

图 2 给出了 $\bar{n} = 9, t = 2, U = 2, V = 0.2, \varepsilon = 0.8$, 初始时刻电子处在 $(c_{1\uparrow}^+c_{2\downarrow}^+ - c_{1\downarrow}^+c_{2\uparrow}^+)/\sqrt{2}|0\rangle_e$ 态时, 不同 g 下占有率及场熵随时间的演化规律. 首先, 图 (a), (c) 显示电子在初态上的占有率随时间演化出现明显的塌缩回复现象. 且塌缩回复的周期随

耦合强度的增大逐渐减小, 进一步对不同的 $\bar{n}, t, U, V, \varepsilon$ 计算表明这种规律具有普遍性. 其次, 图 (a), (b) 与 (c), (d) 显示出占有率的塌缩回复同系统场熵之间严格的同步性: 当系统场熵达到最大值亦即电声纠缠度达到最大值时, 电子在初态上的占有率塌缩为 0.5, 以 $c_{1\uparrow}^+c_{1\downarrow}^+|0\rangle_e$ 和 $c_{2\uparrow}^+c_{2\downarrow}^+|0\rangle_e$ 为电子初态时也表现出这样的规律. 另外, 当耦合强度很小时, 场熵的最小值接近 0, 表明电子与声子之间出现明显的退相干现象, 随着耦合强度的增大这种效应逐渐消失.

图 3 给出了当 $t = 2, g = 0.02, U = 2, V = 0.2, \varepsilon = 0.8$ 时, 电子初始时刻处于 $c_{1\uparrow}^+c_{1\downarrow}^+|0\rangle_e$ 态时, 不同平均声子数 \bar{n} 下, 场熵的时间演化规律. $\bar{n} = 4$ 时, 场熵的最小值趋近 0, 表现出明显的退相干效应, 并且场熵呈现很好的周期性演化规律. 随着平均声子数的增加, 场熵的最小值随演化迅速增加, 退相干效应及周期性演化规律逐渐消失.

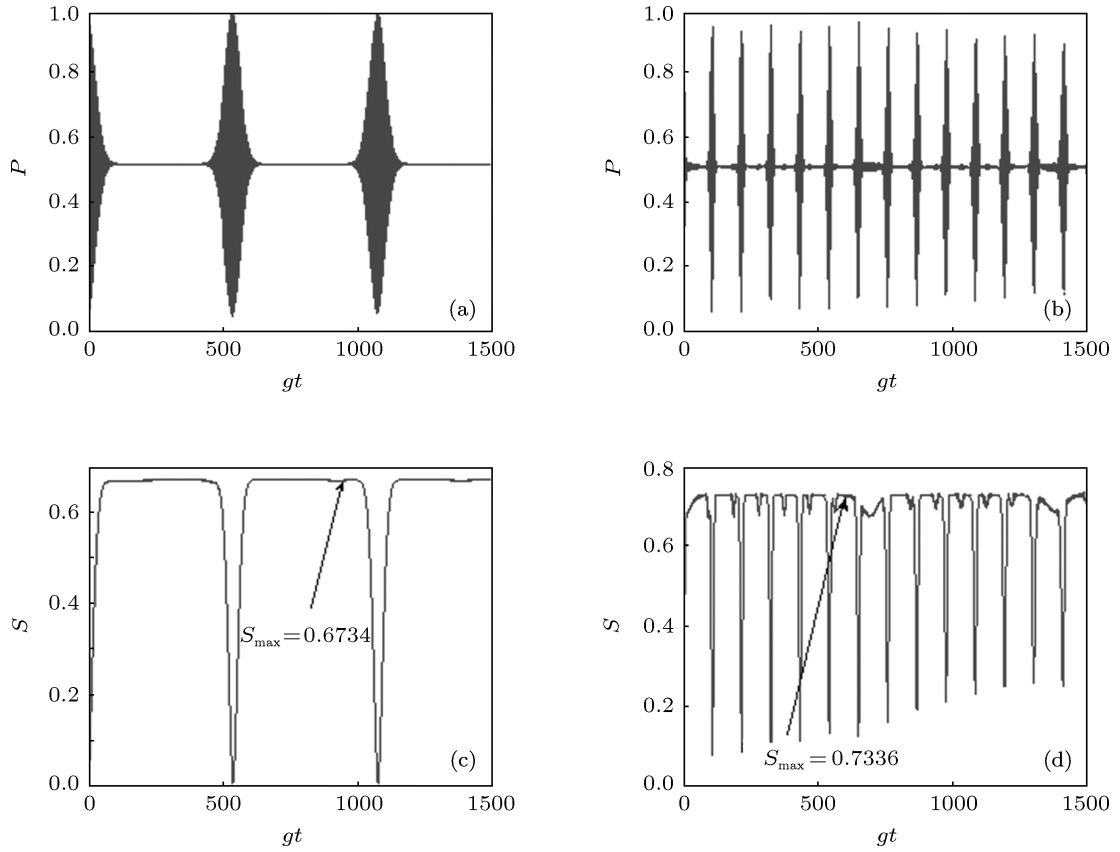


图2 不同耦合强度 g 下, 占有率和场熵随时间的演化 (a) $g = 0.01$ 时, 占有率随时间的演化; (b) $g = 0.01$ 时, 场熵随时间的演化; (c) $g = 0.05$ 时, 占有率随时间的演化; (d) $g = 0.05$ 时, 场熵随时间的演化

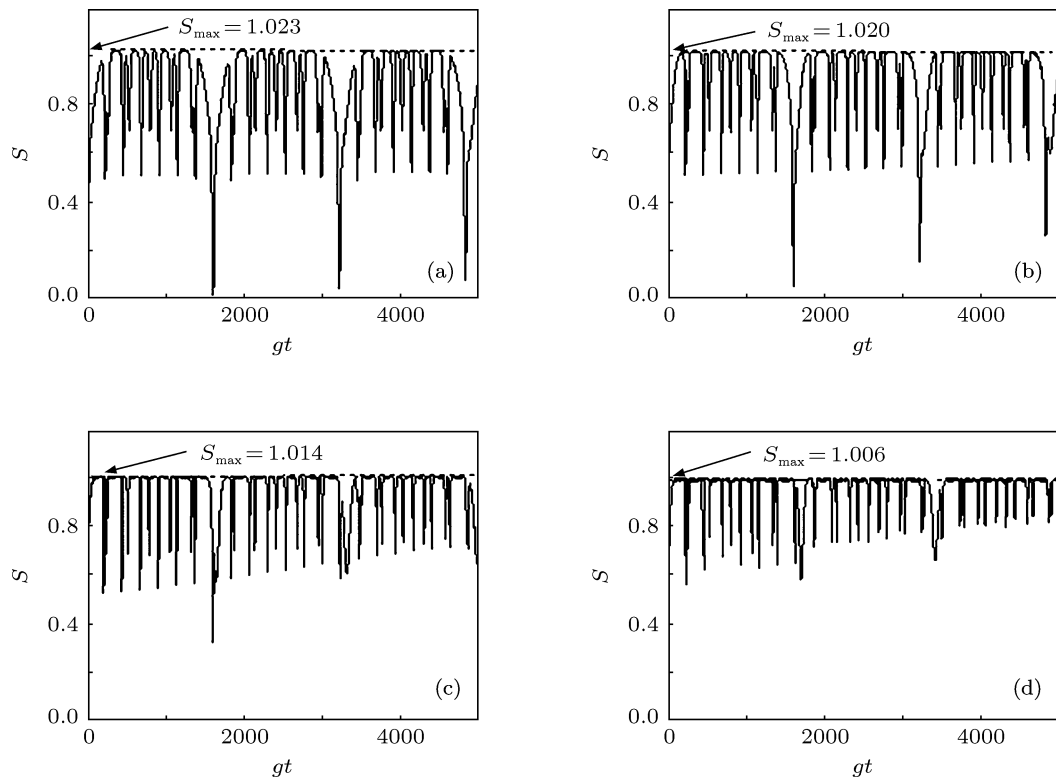


图3 不同平均声子数 \bar{n} 下, 场熵随时间的演化 (a) $\bar{n} = 4$ 时, 场熵随时间的演化; (b) $\bar{n} = 9$ 时, 场熵随时间的演化; (c) $\bar{n} = 25$ 时, 场熵随时间的演化; (d) $\bar{n} = 50$ 时, 场熵随时间的演化

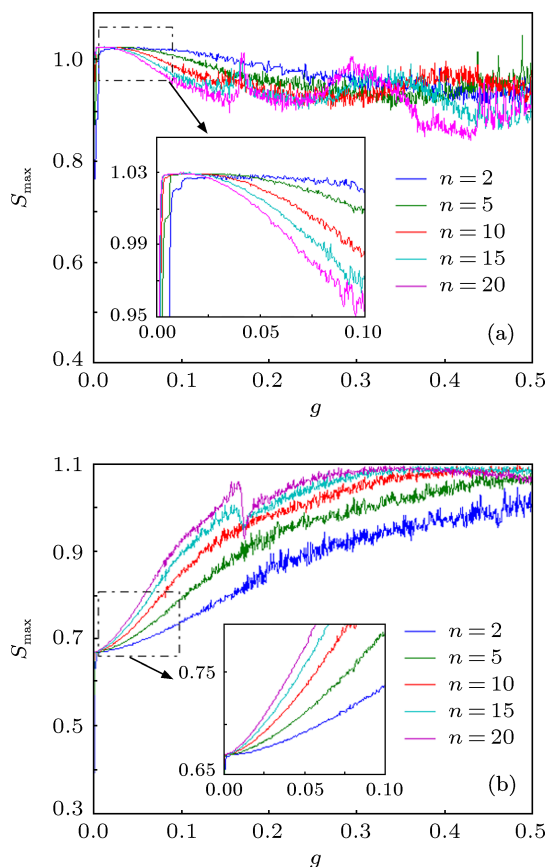


图4 电子初态、耦合常数以及平均光子数对演化过程中最大场熵的影响 (a) 电子初态下为 $c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle_e$ 时, 不同平均光子数下, 演化过程的最大场熵随耦合强度的变化规律; (b) 电子初态下为 $(c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger - c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger)/\sqrt{2}$ 时, 不同平均光子数下, 演化过程的最大场熵随耦合强度的变化规律

图4给出了 $t = 2, g = 0.02, U = 2, V = 0.2, \varepsilon = 0.8$, 不同电子初态下, 时间演化中场熵最大值随耦合常数的变化规律. 由前面的讨论知道, 在耦合强度比较小时, 场熵随时间演化呈现很好的

周期性. 图4进一步表明在弱耦合情况下, 电子初态的选择对演化过程的最大场熵有很大影响: 对于 $g < 0.1$ 的情况, 不同平均光子数下电子初态为 $c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle_e$ (电子初态为 $c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle_e$ 时完全相同) 时, 演化中达到的最大场熵均在 0.9 以上, 而电子初态为 $(c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger - c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger)/\sqrt{2}$ 时最大场熵却在 0.9 以下. 这种差别随着耦合强度和平均光子数的增大而逐渐消失. 由此可知, 实验中电子初态的选择对进行量子操控中要求达到最大纠缠度具有很大的影响.

5 结论

本文运用相干态对角化方法, 精确求解了两格点两电子的 Hubbard-Holstein 模型, 着重研究了系统的定态能谱、占有率随和冯诺依曼熵的时间演化规律以及不同电子初态、耦合强度、平均光子数对其产生的影响. 初始时刻处于纯态的声子和电子彼此并无关联, 但随着演化的进行, 声子与电子逐渐过渡至纠缠态. 在演化过程中, 系统冯诺依曼熵同电子初态占有率之间表现出很好的同步性和周期性, 并且随着耦合强度的增大, 这种同步性和周期性都逐渐减弱, 与平均光子数无关. 同时, 在弱耦合情况下, 对于不同平均光子数, 电子初态处于 $c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle_e$ (或 $c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle_e$) 时具有较处于 $(c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger - c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger)/\sqrt{2}$ 时更高的最大场熵, 显示出电子初态的选择对演化过程中系统的最大纠缠度有显著影响.

- [1] Fehske H, Wellein G, Loos J, Bishop A R 2008 *Phys. Rev. B* **77** 085117
- [2] Holstein T 1959 *Ann. Phys.* **8** 325
- [3] Das A N P, Choudhury S 1994 *Phys. Rev. B* **49** 18
- [4] Acquaroni M 1998 *Phys. Rev. B* **58** 7626
- [5] Chatterjee J, Das A N, arXiv:cond-mat/0210607
- [6] Ranninger J, Thibblin U 1992 *Phys. Rev. B* **45** 7730
- [7] deMello E V L, Ranninger J 1997 *Phys. Rev. B* **55** 14872
- [8] Berciu M 2007 *Phys. Rev. B* **75** 081101
- [9] Bennett C H, Wiesner S J 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2881
- [10] Bouwmeester D, Pan J W, Mattle K, Elbl M, Weinfurter H, Zeilinger A 1997 *Nature* **390** 575
- [11] Bennett C H, Brassard G, Jozsa R, Crépeau C, Jozsa R, Peres A, Wootters W K 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 1895
- [12] Deutsch D, Ekert A, Jozsa R, Macchiavello C, Popescu S, Sanpera A 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 2818
- [13] Shor P W 1995 *Phys. Rev. A* **52** 2493
- [14] Bardeen J, Cooper L N, Schrieffer J R 1957 *Phys. Rev.* **108** 1175
- [15] Phoenix S J D, Knight P L 1991 *Phys. Rev. A* **44** 6023
- [16] Obada A S F, Hessian H A, Abdel A M 2005 *International Journal of Quantum Information* **3** 591
- [17] Faisal A, El-Orany A, Wahiddin M R B, Obada A S F 2008 *Optics Communications* **281** 2854
- [18] Hu Y H, Fang M F, Liao X P 2006 *Acta Optica Sinica* **55** 4631
- [19] Zhang Y Y, Liu T, Chen Q H, Wang X G, Wang K L 2009 *J. Phys. Condens. Matter* **21** 415601
- [20] Zhang Y Y, Wang X G, Chen Q H 2009 *Solid State Communications* **149** 2106

- [21] Chatterjee J, Das A N 2000 *Phys. Rev. B* **61** 4592
 [22] Ren X Z, Jiang D L, Cong H L, Liao X 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5406 (in Chinese) [任学藻, 姜道来, 丛红璐, 廖旭 物理学报 2009 **58** 5406]
 [23] Irish E K, Gea-Banacloche J, Martin I, Schwab K C 2006 *Phys. Rev. B* **72** 195410
 [24] Zhao Y, Zanardi P, Chen G H 2004 *Phys. Rev. B* **70** 195113
 [25] Yao K L, Li Y C, un X Z, Liu Q M, Qin Y, Fu H H, Gao G Y 2005 *Phys. Lett. A* **346** 209
 [26] Vladimir M, Stojanovic, Mihajlo Vanevic 2008 *Phys. Rev. B* **78** 214301
 [27] Phoenix S J D, Knight P L 1988 *Annals of Physics* **182** 381

Two-site Hubbard-Holstein model polaron of quantum entanglement properties*

Ren Xue-Zao[†] He Shu Cong Hong-Lu Wang Xu-Wen

(School of Science, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China)

(Received 11 May 2011; revised manuscript received 14 September 2011)

Abstract

We obtain the exact solution of energy spectrum and dynamics for the two-site Hubbard-Holstein model by the coherent states orthogonal expansion method. The influences of coupling strength g , the average number of phonons \bar{n} and the initial electronic state on the evolution of system entanglement and von Neumann entropy are discussed. Numerical results are as follows. (a) Entanglement evolution with time shows a good periodicity. When the other parameters are fixed, the evolution period decreases as the coupling strength g goes up but it is independent of the average number of phonons \bar{n} . (b) The von Neumann entropy of the system demonstrates strict synchronia with the electronic state occupancy probability. (c) Under the weak coupling strength and low average number of phonons, the initial electronic state $c_{2\uparrow}^{\dagger}c_{2\downarrow}^{\dagger}|0\rangle_e$ or $c_{1\uparrow}^{\dagger}c_{1\downarrow}^{\dagger}|0\rangle_e$ shows larger maximum von Neumann entropy during its evolution than that of $c_{1\uparrow}^{\dagger}c_{2\downarrow}^{\dagger} - c_{1\downarrow}^{\dagger}c_{2\uparrow}^{\dagger}$ but they gradually approach to each other with the increase of coupling strength or average number of phonons.

Keywords: coherent-state orthogonalization expansion, Hubbard-Holstein model, polaron, field entropy

PACS: 42.50.-p

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China-NASF (Grant No. 1097602/A06).

[†] E-mail: rxz63@sohu.com