

{Cu₃}单分子磁体在磁场中的热纠缠*

李纪强 成志 周斌†

(湖北大学物理学与电子技术学院, 武汉 430062)

(2013年5月10日收到; 2013年8月7日收到修改稿)

本文研究单分子磁体 $\text{Na}_9[\text{Cu}_3\text{Na}_3(\text{H}_2\text{O})_9(\alpha\text{-AsW}_9\text{O}_{33})_2]\cdot 26\text{H}_2\text{O}$ 中三角自旋环在磁场作用下的热纠缠性质, 利用数值计算求出任意两个 Cu^{2+} 离子量子比特之间的配对纠缠度, 分别记为 C_{12} , C_{23} 和 C_{13} . 研究表明, 磁场的方向和大小以及温度对配对纠缠度具有重要影响, 而且参数的变化对 C_{12} , C_{23} 和 C_{13} 的影响也是各不相同. 给出外加三个不同方向的磁场时, 配对纠缠度 C_{12} , C_{23} 和 C_{13} 各自对应的临界温度 T_c 随磁场强度的变化图, 由此可以得到单分子磁体三角自旋环中存在纠缠态的参数范围. 通过选择适当的磁场方向和大小以及温度等实验参数, 可以有效地调节和提高单分子磁体中的配对纠缠度.

关键词: 配对纠缠, 单分子磁体, 三角自旋环

PACS: 03.65.Ud

DOI: 10.7498/aps.62.190302

1 引言

量子纠缠是量子系统最基本的性质之一, 也是量子系统与经典系统的一个重要区别. 它作为一种重要的资源而被广泛应用于量子计算与量子信息处理中. 人们注意到热涨落会压制体系的量子效应, 因此在纠缠态的制备中温度是一个非常重要的调控参数. 自从 Arnesen 等^[1] 研究了海森堡模型中的热纠缠性质后, 人们对不同体系中的热纠缠性质已经进行了大量的理论研究^[2-25]. 在量子纠缠的实际应用中, 找到一种能够较好实现纠缠态的操纵和调控的材料是十分重要的.

纳米尺度的分子磁体由于在低温下存在新奇的量子效应^[26,27] 而被广泛地研究. 在单分子磁体的大家族中, $\text{Na}_9[\text{Cu}_3\text{Na}_3(\text{H}_2\text{O})_9(\alpha\text{-AsW}_9\text{O}_{33})_2]\cdot 26\text{H}_2\text{O}$ (简记为 {Cu₃}) 作为一个典型的代表也是人们近年来实验及理论的研究热点材料之一^[28,29]. Stowe 等^[29] 研究了它的高频率电子顺磁共振谱, 结果表明杂质原子和孤对电子能够使 {Cu₃} 单分子磁体的磁参数发生微小变化. Choi 等^[30] 在脉冲磁场中观测到了它的半步磁化现象.

单分子磁体在实现量子信息的编码和调控方面具有潜在的应用前景^[31-36]. 由于 {Cu₃} 单分子磁体表现出显著的二能级行为, 可以作为量子逻辑门用于量子信息处理过程, 是实现三量子比特系统的备选材料^[37]. 目前人们对三量子比特系统的纠缠作了大量的研究^[16-25], 但这些工作主要集中在对理想模型的讨论方面. 例如, Łuczak 等^[21] 研究了电场和磁通对三自旋量子比特系统中纠缠态的调控, 结果表明, 在弱电场和强电场中该系统呈现出不同的自旋纠缠行为, 而这两种情况中均出现了 Stark 效应; Hou 等^[23] 研究了无外磁场作用下的具有 Dzyaloshinskii-Moriya (DM) 相互作用的 XXZ 型三角自旋环的热纠缠性质, 结果表明, 在较大的 DM 相互作用和低温条件下, 系统的纠缠度达到最大值. 我们注意到, 对 {Cu₃} 单分子磁体这种具体材料中的热纠缠性质研究较少. 因此, 本文将重点研究 {Cu₃} 单分子磁体在外加均匀磁场作用下, 磁场方向和大小以及温度的变化对三角自旋环中任意两个量子比特间配对热纠缠性质的影响.

* 国家自然科学基金 (批准号: 11274102) 和教育部新世纪优秀人才支持计划 (批准号: NCET-11-0960) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: binzhou@hubu.edu.cn

2 理论模型和配对纠缠度

2.1 理论模型

{Cu₃}单分子磁体是一个具有 D_{3h} 对称性的三明治状结构^[38], 在每个单胞中有两个由 Cu²⁺ 离子组成的三角环. 由于每一个铜离子之间的超交换路径是相同的, 因此 {Cu₃}单分子磁体可看作是一个 $S = 1/2$ 的三角自旋环, 每个 Cu²⁺ 离子等效为一个量子比特^[30]. 静态磁化率实验测量结果表明相邻 Cu²⁺ 离子之间是反铁磁耦合^[28]. 在原子坐标系中, {Cu₃}型三角自旋环的结构示意图如图 1 所示, 其三角形结构实际为一个等腰三角形, 相邻 Cu²⁺ 离子之间分别为 $d_{12} = 4.689 \text{ \AA}$ 和 $d_{23} = d_{13} = 4.696 \text{ \AA}$.

{Cu₃}型三角自旋环在磁场作用下的等效自旋哈密顿量可以写为^[30]

$$\mathcal{H} = \sum_{l=1}^3 \sum_{\alpha=x,y,z} J_{ll+1}^{\alpha} \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_{l+1} + \sum_{l=1}^3 \mathbf{D}_{ll+1} \cdot [\mathbf{S}_l \times \mathbf{S}_{l+1}] + \mu_B \sum_{l=1}^3 \mathbf{S}_l \cdot \tilde{g}_{ll} \cdot \mathbf{H}_l, \quad (1)$$

其中, J 为交换作用参数, \mathbf{H} 为磁场矢量, \mathbf{S} 为自旋算符, μ_B 为玻尔磁子, \tilde{g} 为朗德 g 因子张量, \mathbf{D} 为 DM 相互作用张量, 在自旋环平面内遵循近似的 C_3 对称性^[30]: $(D_{23}^x, D_{23}^y) = \Re(2\pi/3)(D_{12}^x, D_{12}^y)$ 和 $(D_{31}^x, D_{31}^y) = \Re(4\pi/3)(D_{12}^x, D_{12}^y)$, 这里 $\Re(\theta)$ 表示绕垂直自旋环平面轴 (记为 Z 轴) 旋转 θ 角. Choi 等^[30] 根据 {Cu₃}单分子磁体的磁化强度和自旋

电子共振实验结果, 并结合对称性分析, 拟合出了 {Cu₃}型三角自旋环等效自旋哈密顿量 (1) 式中的参数值 (见表 1).

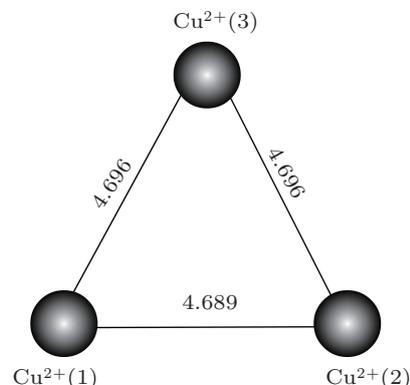


图 1 {Cu₃}型三角自旋环的结构示意图 (数字 1, 2 和 3 标记 Cu²⁺ 离子的位置, 相邻 Cu²⁺ 离子之间的距离长度单位为Å)

在以 $\{|000\rangle, |001\rangle, |010\rangle, |011\rangle, |100\rangle, |101\rangle, |110\rangle, |111\rangle\}$ 为标准基矢的自旋空间中, {Cu₃}型三角自旋环等效自旋哈密顿量 (1) 式可以写成一个 8×8 的矩阵形式. 利用精确对角化的方法和表 1 中的实验拟合参数, 我们给出 {Cu₃}单分子磁体三角自旋环在外加磁场作用下的能级结构, 如图 2 所示. 图 2(a) 和 (b) 分别给出了磁场沿 Z 轴方向 (即垂直于自旋环平面) 和沿 X 轴方向 (即平行于自旋环平面) 时, {Cu₃}型三角自旋环哈密顿量 (1) 式的 8 个本征能级随磁场强度的变化. 我们的数值计算结果与文献^[30] 的一致.

表 1 {Cu₃}型三角自旋环等效自旋哈密顿量 (1) 式中的实验拟合参数^[30]

J_{12}^{xy}	J_{12}	$J_{23}^{xy} = J_{31}^{xy}$	$J_{23} = J_{31}$	D_{ll+1}^z	D_{12}^{xy}	g_{11}^{xy}	g_{22}^{xy}	g_{33}^{xy}	g_{ll}^z
4.50 K	4.56 K	4.03 K	4.06 K	0.53 K	0.53 K	2.25	2.10	2.40	2.06

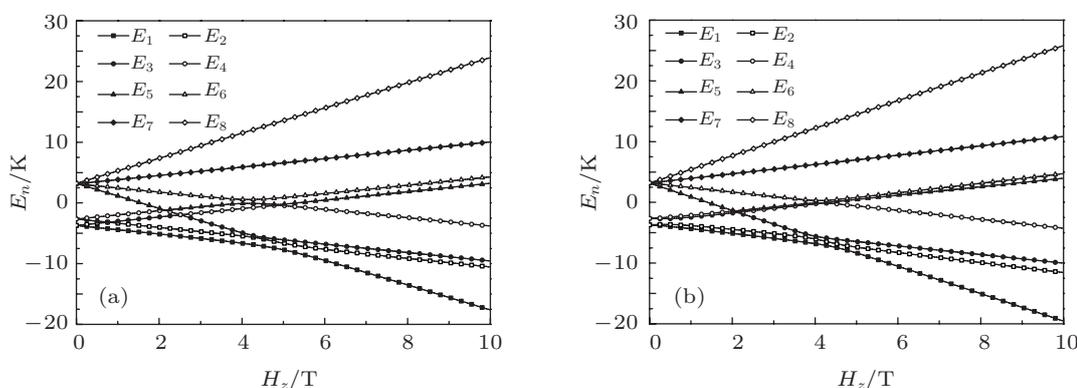


图 2 {Cu₃}型三角自旋环的能级随磁场强度的变化 (E_n ($n = 1, 2, \dots, 8$) 为哈密顿量 (1) 式的 8 个本征值) (a) 磁场沿 Z 轴方向 (即垂直于自旋环平面); (b) 磁场沿 X 轴方向 (即平行于自旋环平面)

2.2 配对纠缠度

哈密顿量 (1) 式的 8 个本征值 E_n 相应的本征矢记为 $|\Psi_n\rangle$, 其中 $n = 1, 2, \dots, 8$. 根据本征值 E_n 和本征矢 $|\Psi_n\rangle$, 在温度为 T 时, 系统的密度矩阵为

$$\rho(T) = \frac{1}{Z} \sum_{n=1}^8 \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right) |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|, \quad (2)$$

其中 k_B 为玻尔兹曼常数, Z 为系统的配分函数,

$$Z = \sum_{n=1}^8 \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right). \quad (3)$$

为了研究 $\{\text{Cu}_3\}$ 型三角自旋环在磁场作用下的热纠缠性质, 我们将计算第 i 和第 j 个 Cu^{2+} 离子量子比特之间的配对纠缠度 C_{ij} . 配对纠缠度 C_{ij} 定义为^[39-41]

$$C_{ij} = \max\{\lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4, 0\}, \quad (4)$$

其中 $\lambda_n (n = 1, 2, 3, 4)$ 是算子

$$R_{ij} = \rho_{ij}(\sigma_i^x \otimes \sigma_j^x) \rho_{ij}^*(\sigma_i^y \otimes \sigma_j^y) \quad (5)$$

本征值的平方根, 满足 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \lambda_4$, 这里 $\sigma_i^\alpha (\alpha = x, y, z)$ 为第 i 个量子比特的泡利算符, $\rho_{ij} (= \text{tr}_k[\rho(T)])$ 为第 i 和 j 量子比特的约化密度矩阵, ρ_{ij}^* 为 ρ_{ij} 的复共轭矩阵. 配对纠缠度 C_{ij} 的取值从 0 到 1, $C_{ij} = 0$ 表示非纠缠态, $C_{ij} = 1$ 对应于最大纠缠态, $0 < C_{ij} < 1$ 为部分纠缠.

3 结果及讨论

本节中, 我们基于表 1 给出的实验拟合参数, 并利用数值计算方法求解出 $\{\text{Cu}_3\}$ 型三角自旋环配对纠缠度 C_{ij} . 我们注意到 $\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体中反铁磁耦合的 Cu^{2+} 离子 ($S = 1/2$) 实际上形成了一个相对于等边三角形有微小变形的等腰三角自旋环^[30]. 数值计算结果显示, 任意两个 Cu^{2+} 离子量子比特之间的配对纠缠度 (这里记为 C_{12} , C_{23} 和 C_{13} , 三个 Cu^{2+} 离子的位置标记如图 1 所示) 是有所差别的, 这不同于先前文献中关于三量子比特自旋环理想模型中的计算结果^[16-25]. 而且我们的计算结果还表明, 外加不同方向的磁场对 $\{\text{Cu}_3\}$ 型三角自旋环配对纠缠度 C_{ij} 的影响也是有差异的. 在下文中, 我们将分三种情况讨论在磁场作用下两个 Cu^{2+} 离子量子比特之间的配对纠缠度, 即 C_{12} , C_{23} 和 C_{13} .

3.1 磁场和温度对 C_{12} 的影响

图 3 描述了在不同方向的磁场作用下 C_{12} 随磁场强度和温度的变化情况. 首先我们讨论 X 轴方向磁场强度的影响 (如图 3(a) 和 (b) 所示). 结果显示, 配对纠缠度 C_{12} 随磁场强度大小的增加表现出非单调变化行为. 以图 3(b) 中给出的温度 $T = 0.1$ K 为例: 当磁场强度为零时, $C_{12} = 0.633$; 随着磁场强度的增加, 配对纠缠度 C_{12} 开始增大, 当磁场强度 H_x 为 2.108 T 时 C_{12} 到达极大值 0.957; 而当磁场强度 H_x 继续增大时 C_{12} 迅速下降并逐渐趋于零. 对于图 3(b) 中给出的 $T = 1.0$ K 和 2.0 K 的情况, 配对纠缠度 C_{12} 的变化趋势与 $T = 0.1$ K 时的情形类似, 只是纠缠度极大值以及它所对应磁场强度大小不同, 且温度越高, 纠缠极大值对应的磁场越强. 因此, 在存在纠缠态的温度参数区域内, 外加磁场强度在一定的范围内有利于纠缠态的产生. 对于图 3(b) 中给出的 $T = 3.0$ K 的情况, 磁场较小时无纠缠, 当磁场强度增大到临界值 2.239 T 时, C_{12} 会随磁场强度的增加从零开始增大, 在磁场强度大小为 5.445 T 时 C_{12} 达到极大值 0.034, 而后 C_{12} 随着磁场强度的增加而减小并趋于零, 即出现纠缠态恢复的现象. 图 3 显示, 对于更高的温度区域, 外加磁场强度不再诱导纠缠态的出现, 即纠缠态消失.

图 3(c) 和 (d) 以及图 3(e) 和 (f) 分别描述了 C_{12} 在 Y 轴方向磁场和 Z 轴方向磁场作用下的变化情况. 数值计算结果表明, 外加 Y 轴方向和 Z 轴方向的磁场对 C_{12} 的影响趋势与 X 轴方向是相似的, 这与朗德 g 因子在三个方向上的分量差异较小有关^[30]. 但由于参数 J , D 在各个方向的分量不同^[30], 还是导致了三个方向上 C_{12} 的值有所差别, 这种差别在零温附近尤为明显. 以温度 $T = 0.1$ K 为例: 调节磁场强度的大小, 当磁场强度 H_y 为 2.592 T 时 C_{12} 到达极大值 0.966; 当磁场强度 H_z 为 0.879 T 时 C_{12} 到达极大值 0.809. 对于温度 $T = 2.0$ K 的情况, 当三个方向上磁场强度分别为 $H_x = 3.520$ T, $H_y = 3.521$ T 和 $H_z = 3.735$ T 时, 配对纠缠度 C_{12} 分别到达各自极大值 0.178, 0.178 和 0.166. 对于配对纠缠度 C_{12} 而言, 在相同的温度下, 相对于外加垂直于自旋环平面的磁场, 调节平行于自旋环平面的磁场大小可以得到更高的配对纠缠度.

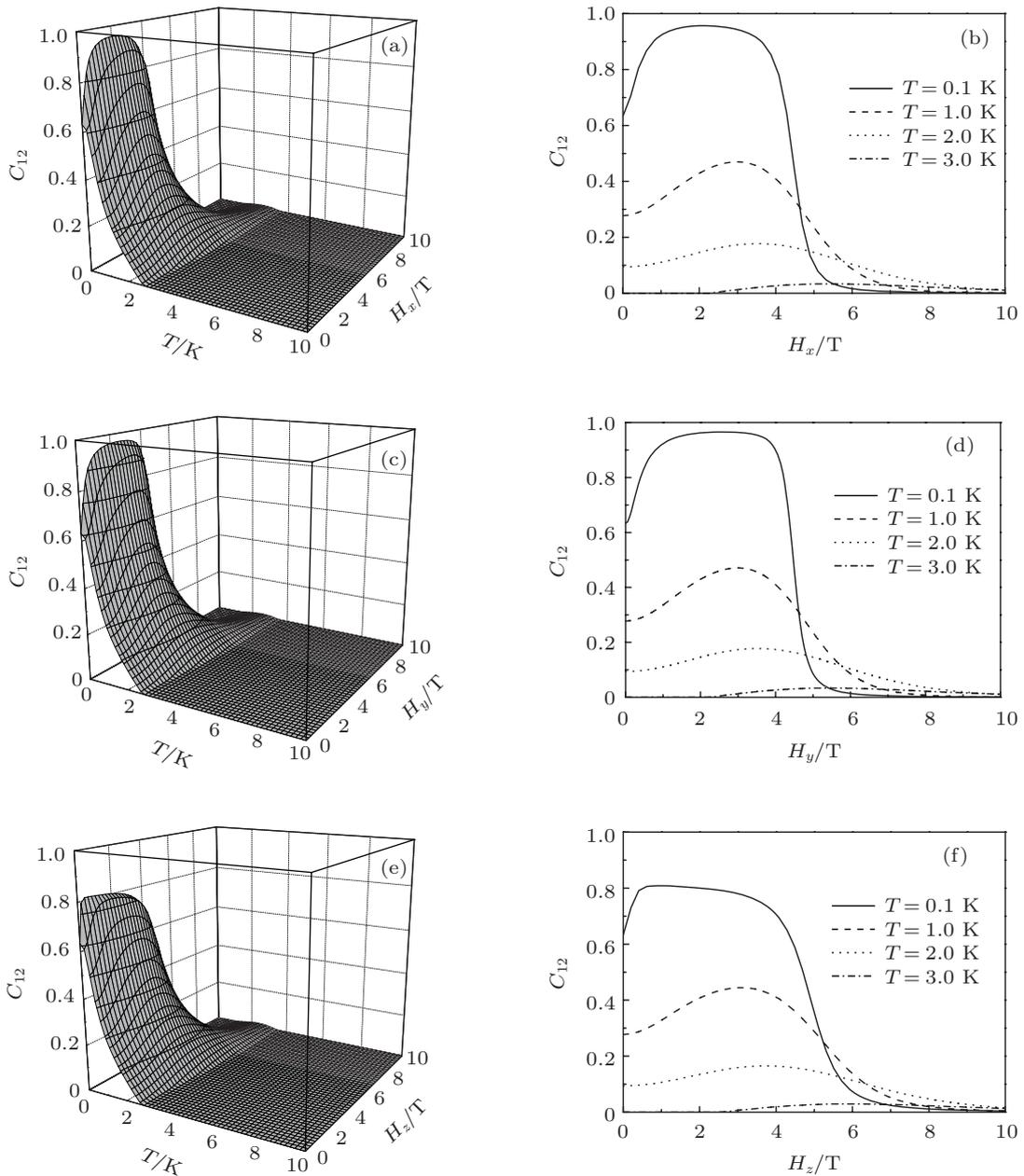


图3 配对纠缠度 C_{12} 随磁场强度和温度的变化 (a) 和 (b) 对应磁场沿 X 轴方向的情形; (c) 和 (d) 对应磁场沿 Y 轴方向的情形; (e) 和 (f) 对应磁场沿 Z 轴方向的情形

3.2 磁场和温度对 C_{23} 的影响

图 4 描述了在不同方向的磁场作用下 C_{23} 随磁场强度和温度的变化情况. 不难发现, 在零温附近时, 外加方向不同的磁场时, 磁场强度对配对纠缠度 C_{23} 的影响存在明显差异 (如图 4(b), (d) 和 (f) 中实线所示). 以 $T = 0.1$ K 为例, 当磁场强度为零时, $C_{23} = 0.139$. 在外加 X 轴方向磁场作用下, 配对纠缠度 C_{23} 随磁场强度 H_x 的增加先减小, 在 $H_x = 0.939$ T 处 C_{23} 减小到一个极小值 0.101, 而后随 H_x 的增加而增大, 在 $H_x = 4.231$ T 处 C_{23} 增大

到一个极大值 0.235 后再下降并迅速趋近于零. 在外加 Y 轴方向磁场作用下, 配对纠缠度 C_{23} 随磁场强度 H_y 的增加出现了明显的震荡现象. C_{23} 随着 H_y 的增加先减小, 并在 $H_y = 1.199$ T 处 C_{23} 达到极小值 0.093, 之后 C_{23} 随 H_y 增加, 在 $H_y = 2.692$ T 处 C_{23} 达到极大值 0.103 后又再次减小, 在 H_y 为 4.229 T 时 C_{23} 达到另一个极小值 0.005, 之后 C_{23} 又随 H_y 增加, 在 H_y 为 4.574 T 时达到极大值 0.054 后迅速下降并趋于零. 在外加 Z 轴方向磁场作用下, 随磁场强度 H_z 的变化, 配对纠缠度 C_{23} 会出现一段近似平台区, 这一点与配对纠缠度 C_{12} 随磁场

强度 H_z 的变化较为相似 (如图 4(f) 和图 3(f) 中实线所示). 在另一方面, 当温度更高时 (以 $T = 2.0$ K 为例), 外加方向不同的磁场强度对配对纠缠度 C_{23} 的影响趋势在定性上一致 (如图 4(b), (d) 和 (f) 中点划线所示), 三个磁场方向上都会出现纠缠态恢复的现象, 与前文中的 C_{12} 的性质相似.

图 4 同样显示对于更高的温度区域, 即当温度超过某个临界温度时, 外加磁场强度不再诱导纠缠态的出现, 即纠缠态消失, 图 4(b), (d) 和 (f) 中 $T = 3.0$ K 对应的点划线已经与坐标横轴重合. 如

前所述, 我们数值计算结果显示在零温附近, 外加方向不同的磁场时, 磁场强度对配对纠缠度 C_{23} 的影响存在明显差异. 这是由于在零温附近系统的基态占据主导地位, 此时 $\{\text{Cu}_3\}$ 型三角自旋环中 DM 相互作用对系统的纠缠态有较大影响, 而 DM 参数大致遵循 C_3 对称性, 使得张量 D 的 X 轴方向和 Y 轴方向对应的分量存在较大差异, 进而导致纠缠态情况存在差异. 从表 1 给出的 $\{\text{Cu}_3\}$ 型三角自旋环等效自旋哈密顿量 (1) 式中的实验拟合参数可以看

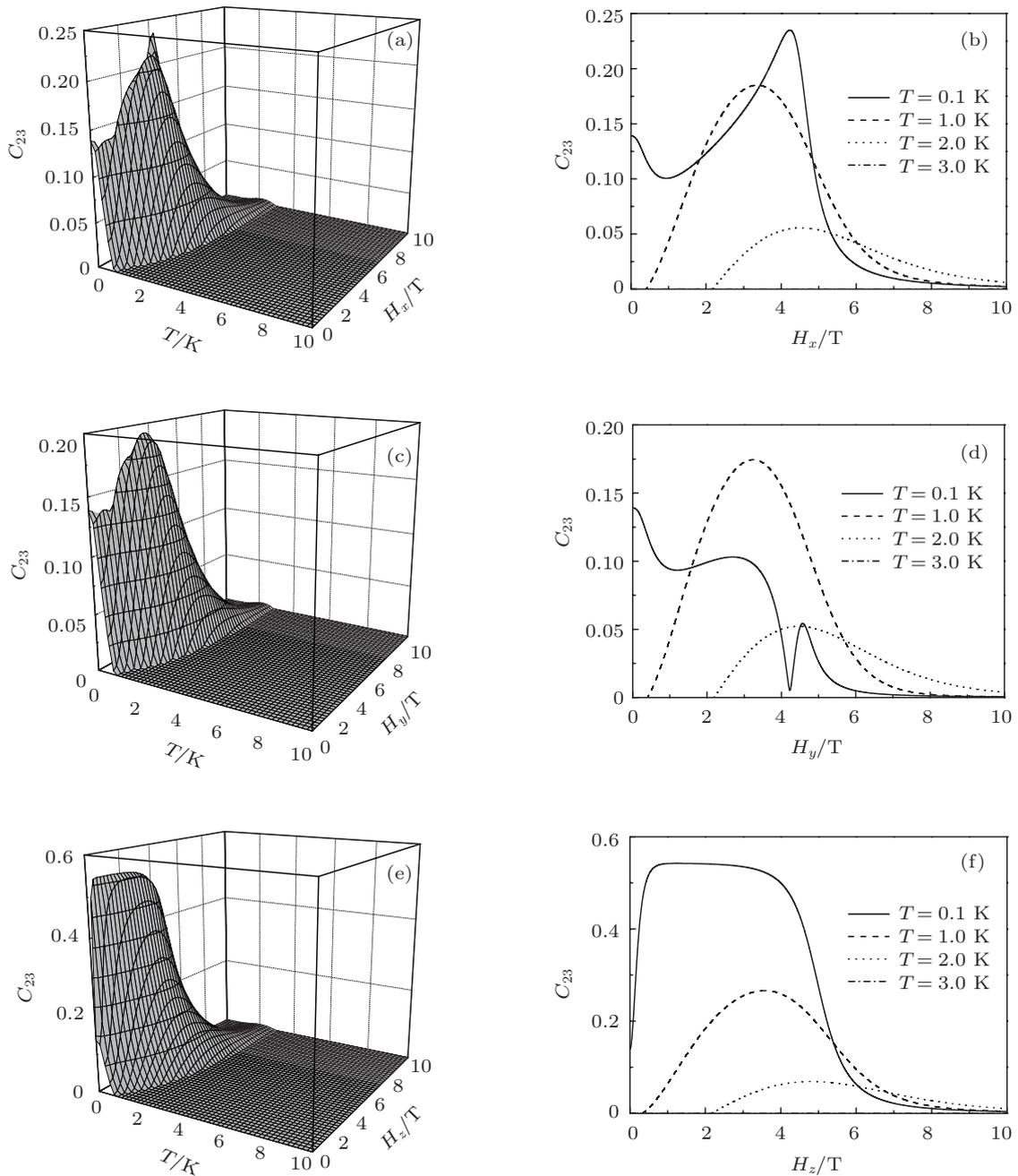


图 4 配对纠缠度 C_{23} 随磁场强度和温度的变化 (a) 和 (b) 对应磁场沿 X 轴方向的情形; (c) 和 (d) 对应磁场沿 Y 轴方向的情形; (e) 和 (f) 对应磁场沿 Z 轴方向的情形

出, DM 参数比交换作用参数 J 小一个数量级, 于是在更高温度条件下, 交换作用对纠缠态起了主要作用, 而参数 J 在三个方向上的分量差异不大, 因此在更高温度条件下三个方向的纠缠 C_{23} 差异不大.

3.3 磁场和温度对 C_{13} 的影响

图 5 描述了在不同方向的磁场作用下 C_{13} 随磁场强度和温度的变化情况. 我们数值计算的结果显

示, 磁场和温度对 C_{13} 的影响趋势与 C_{23} 是相似的, 这是由于 $\{\text{Cu}_3\}$ 型三角自旋环实际上是一个等腰三角形 (如图 1 所示), $d_{23} = d_{13} = 4.696 \text{ \AA}$, 导致第 2 与第 3 量子比特间交换参数和第 1 与第 3 量子比特间的交换参数对应的分量完全相同. 外加方向不同的磁场时, 磁场强度对配对纠缠度 C_{13} 影响的差别仍存在于在零温附近. 这种 C_{13} 变化的差异同样是来源于 $\{\text{Cu}_3\}$ 型三角自旋环中 DM 相互作用. 对于 C_{13} 具体的分析, 此处不再赘述. 比较图 3 至图 5

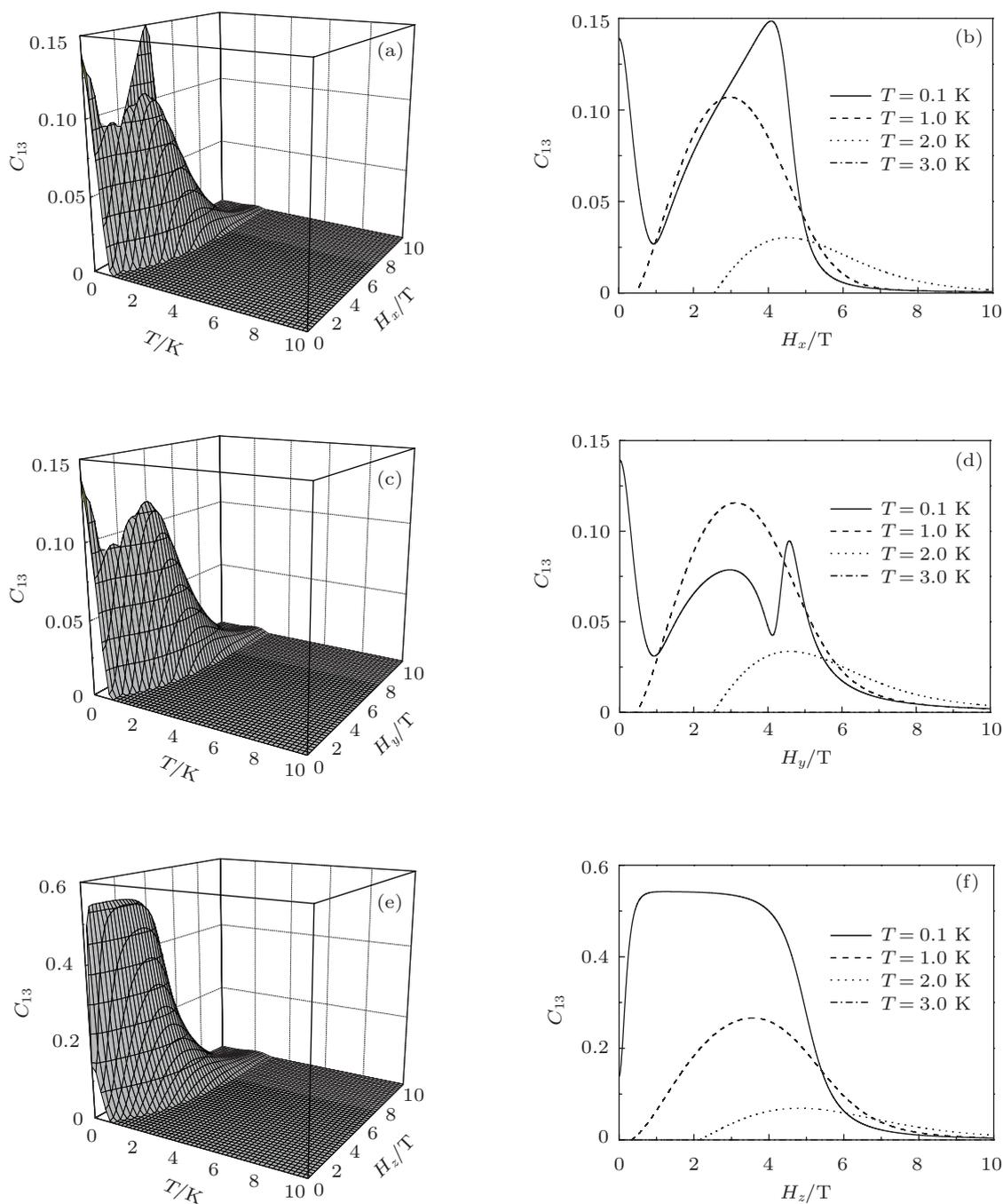


图 5 配对纠缠度 C_{13} 随磁场强度和温度的变化 (a) 和 (b) 对应磁场沿 X 轴方向的情形; (c) 和 (d) 对应磁场沿 Y 轴方向的情形; (e) 和 (f) 对应磁场沿 Z 轴方向的情形

给出的数值计算结果, 我们发现在一般情况下调节磁场强度的大小, C_{12} 比 C_{23} 和 C_{13} 能达到更大的纠缠度. 对于配对纠缠度 C_{23} 和 C_{13} 而言, 在相同的温度下, 相对于外加平行于自旋环平面的磁场, 调节垂直于自旋环平面的磁场大小可以得到更高的配对纠缠度. 这个性质与配对纠缠度 C_{12} 的情况相反.

3.4 磁场对临界温度 T_c 的影响

前文的计算结果已显示对于一个给定的磁场强度, 当温度 T 超过某个温度值时纠缠态消失. 这个特定的温度值被称为配对纠缠态的临界温度 T_c . 在本文的数值计算结果讨论中, 我们假定配对纠缠度 $C_{ij} < 10^{-3}$ 时对应纠缠态消失. 图 6 分别给出了配对纠缠度 C_{12} , C_{23} 和 C_{13} 对应的临界温度 T_c 随三个不同方向磁场强度的变化情况. $\{\text{Cu}_3\}$ 型三角自旋环中配对纠缠态的临界温度 T_c 随外加磁场强度的变化表现出非单调变化行为. 在图 6 中曲线内侧区域对应存在纠缠态的情况, 曲线外侧区域则对应纠缠态消失的情况.

从图 6 中不难看出, 对于任意两量子比特间的配对纠缠度 C_{12} , C_{23} 和 C_{13} , 外加磁场沿 Z 轴方向时, $\{\text{Cu}_3\}$ 型三角自旋环中存在纠缠态的区域比外加磁场沿 X 轴方向和 Y 轴方向时的都要大. 在另一方面, 对于配对纠缠度 C_{12} 而言, 外加磁场沿 X 轴方向和 Y 轴方向时的 T_c - H 相界线差别较小, 如图 6(a) 所示; 对于 C_{23} 而言, 外加磁场沿 X 轴方向时存在纠缠态的区域比外加磁场沿 Y 轴方向时的区域大, 如图 6(b) 所示; 对于 C_{13} 而言, 情况恰好与 C_{23} 的相反, 外加磁场沿 Y 轴方向时存在纠缠态的区域比外加磁场沿 X 轴方向时的区域大, 如图 6(c) 所示. 值得注意的是, 外加 X 轴方向的磁场时 C_{13} 的 T_c - H 相图中, 在相界线包围的区域内有一小块区域也呈现消纠缠现象, 如图 6(c) 实线所示. 该区域左端点对应的参数为

$$H_x = 3.086 \text{ T}, \quad T_c = 0.389 \text{ K};$$

该区域右端点对应的参数为

$$H_x = 4.810 \text{ T}, \quad T_c = 0.589 \text{ K}.$$

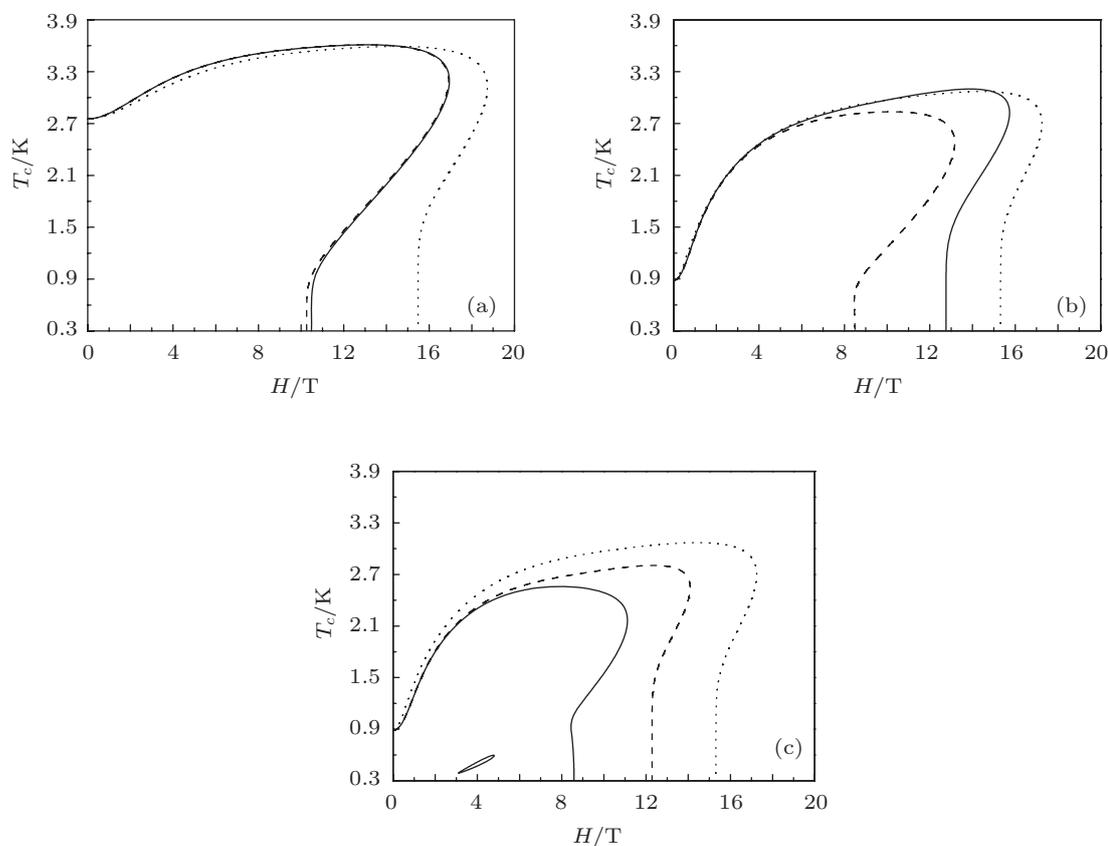


图 6 外加不同方向的磁场时, 临界温度 T_c 随磁场强度的变化 (实线表示磁场沿 X 轴方向, 虚线表示沿 Y 轴方向, 点线表示沿 Z 轴方向, 此处数值计算中假定 $C_{ij} < 10^{-3}$ 时无纠缠) (a) C_{12} ; (b) C_{23} ; (c) C_{13}

4 结论

我们基于单分子磁体 $\text{Na}_9[\text{Cu}_3\text{Na}_3(\text{H}_2\text{O})_9(\alpha\text{-AsW}_9\text{O}_{33})_2]\cdot 26\text{H}_2\text{O}$ 的实验拟合参数, 利用数值计算求解配对纠缠度的方法, 研究了 $\{\text{Cu}_3\}$ 型三角自旋环在外加磁场作用下的热纠缠性质. 由于 $\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体中反铁磁耦合的 Cu^{2+} 离子实际上形成一个相对等边三角形有微小变形的等腰三角自旋环, 以及 Cu^{2+} 离子之间 DM 耦合效应的作用, 使得任意两个 Cu^{2+} 离子量子比特之间的配对纠缠度 (分别记为 C_{12} , C_{23} 和 C_{13}) 是有所差别的. 而且我们的计算结果还表明, 外加不同方向的磁场对 $\{\text{Cu}_3\}$ 型三角自旋环配对纠缠度的影响也各不相同.

研究结果显示, 在一般情况下调节磁场强度的大小, C_{12} 比 C_{23} 和 C_{13} 可以到达更大的纠缠度. 对于配对纠缠度 C_{23} 和 C_{13} 而言, 在相同的温度下, 相对于外加平行于自旋环平面的磁场, 调节垂直于自旋环平面的磁场大小可以得到更高的配对纠缠度. 这个性质与配对纠缠度 C_{12} 的情况相反. 我们最后给出配对纠缠度 C_{12} , C_{23} 和 C_{13} 各自对应的临界温度 T_c 随磁场强度的变化图, 由此可以得到单分子磁体三角自旋环中存在纠缠态的参数范围. 通过选择适当的磁场方向和大小以及温度等实验参数, 可以有效地调节和提高 $\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体中的配对纠缠度.

- [1] Arnesen M C, Bose S, Vedral V 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 017901
- [2] Wang X G 2001 *Phys. Rev. A* **64** 012313
- [3] Wang X G 2001 *Phys. Lett. A* **281** 101
- [4] Wang X G 2002 *Phys. Rev. A* **66** 034302
- [5] Zhang G F, Li S S 2005 *Phys. Rev. A* **72** 034302
- [6] Sun Y, Chen Y, Chen H 2003 *Phys. Rev. A* **68** 044301
- [7] Zhang Y L, Zhou B 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 120301 (in Chinese) [张英丽, 周斌 2011 物理学报 **60** 120301]
- [8] Xi X Q, Chen W X, Liu Q, Yue R H 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3026 (in Chinese) [惠小强, 陈文学, 刘起, 岳瑞宏 2006 物理学报 **55** 3026]
- [9] Cao M, Zhu S Q 2005 *Phys. Rev. A* **71** 034311
- [10] Wu K D, Zhou B, Cao W Q 2007 *Phys. Lett. A* **362** 381
- [11] Cao M, Zhu S Q 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 2888
- [12] Li D C, Wang X P, Cao Z L 2008 *J. Phys.: Condens. Matter* **20** 325229
- [13] Pan H Z, Kuang L M 2004 *Chin. Phys. Lett.* **21** 424
- [14] Xi X Q, Chen W X, Yue R H 2002 *Chin. Phys. Lett.* **19** 1044
- [15] Lu P, Wang J S 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5955 (in Chinese) [卢鹏, 王顺金 2009 物理学报 **58** 5955]
- [16] Ren J Z, Shao X Q, Zhang S, Yeon K H 2010 *Chin. Phys. B* **19** 100307
- [17] Zhou L, Song H S, Guo Y Q, Li C 2003 *Phys. Rev. A* **68** 024301
- [18] Zhang T, Xi X Q, Yue R H 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2755 (in Chinese) [张涛, 惠小强, 岳瑞宏 2004 物理学报 **53** 2755]
- [19] Wang Y H, Xia Y J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7479 (in Chinese) [王彦辉, 夏云杰 2009 物理学报 **58** 7479]
- [20] Hu Z N, Yi K S, Park K S 2007 *J. Phys. A: Math. Theor.* **40** 7283
- [21] Łuczak J, Bulka B R 2012 *J. Phys.: Condens. Matter* **24** 375303
- [22] Zhou B 2011 *Int. J. Mod. Phys. B* **25** 2135
- [23] Hou J M, Du L, Ding J Y, Zhang W X 2010 *Chin. Phys. B* **19** 110313
- [24] Qin M, Tian D P, Tao Y J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5395 (in Chinese) [秦猛, 田东平, 陶应娟 2008 物理学报 **57** 5395]
- [25] Zheng Q, Zhang X P, Zhi Q J, Ren Z Z 2009 *Chin. Phys. B* **18** 3210
- [26] Thomas L, Lionti F, Ballou R, Gatteschi D, Sessoli R, Barbara B 1996 *Nature* **383** 145
- [27] Wernsdorfer W, Sessoli R 1999 *Science* **284** 133
- [28] Kortz U, Nellutla S, Stowe A C, Dalal N S, Rauwald U, Danquah W, Ravot D 2004 *Inorg. Chem.* **43** 2308
- [29] Stowe A C, Nellutla S, Dalal N S, Kortz U 2004 *Eur. J. Inorg. Chem.* **19** 3792
- [30] Choi K Y, Matsuda Y H, Nojiri H, Kortz U, Hussain F, Stowe A C, Ramsey C, Dalal N S 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 107202
- [31] Bogani L, Wernsdorfer W 2008 *Nature Mater.* **7** 179
- [32] Leuenberger M N, Loss D 2001 *Nature* **410** 789
- [33] Zhou B, Tao R B, Shen S Q, Liang J Q 2002 *Phys. Rev. A* **66** 010301
- [34] Meier F, Levy J, Loss D 2003 *Phys. Rev. B* **68** 134417
- [35] Troiani F, Ghirri A, Affronte M, Carretta S, Santini P, Amoretti G, Piligkos S, Timco G, Winpenny R E P 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 207208
- [36] Lehmann J, Gaita-Ariño A, Coronado E, Loss D 2007 *Nature Nanotech.* **2** 312
- [37] Trif M, Troiani F, Stepanenko D, Loss D 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 217201
- [38] Kortz U, Al-Kassem N K, Savelieff M G, Kadi N A A, Sadakane M 2001 *Inorg. Chem.* **40** 4742
- [39] Hill S, Wootters W K 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 5022
- [40] Wootters W K 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 2245
- [41] Coffman V, Kundu J, Wootters W K 2000 *Phys. Rev. A* **61** 052306

Thermal entanglement in a $\{\text{Cu}_3\}$ single molecular magnet in the magnetic field*

Li Ji-Qiang Cheng Zhi Zhou Bin[†]

(School of Physics and Electronic Technology, Hubei University, Wuhan 430062, China)

(Received 10 May 2013; revised manuscript received 7 August 2013)

Abstract

We have investigated the properties of thermal entanglement in a triangular spin ring of the single molecular magnet (SMM) $\text{Na}_9[\text{Cu}_3\text{Na}_3(\text{H}_2\text{O})_9(\alpha\text{-AsW}_9\text{O}_{33})_2]\cdot 26\text{H}_2\text{O}$ in a magnetic field, and the pairwise concurrences of arbitrary two Cu^{2+} ion qubits are calculated numerically, hereafter abbreviated as C_{12} , C_{23} and C_{13} , respectively. Results show that the magnitude and direction of magnetic field as well as temperature have important effects on the pairwise thermal entanglement. Moreover, C_{12} , C_{23} and C_{13} have difference variations with the change of the parameters. We also plot the changes of the critical temperatures T_c of C_{12} , C_{23} and C_{13} with the magnetic fields along three different directions, and from the critical temperature-magnetic field phase diagrams one can obtain the ranges of parameters in which the pairwise thermal entanglement in a triangular spin ring of the SMM exists. Therefore, the pairwise entanglement can be controlled and enhanced in the SMM by choosing appropriate magnitude and direction of magnetic field and temperature.

Keywords: pairwise entanglement, single molecular magnet, triangular spin ring

PACS: 03.65.Ud

DOI: 10.7498/aps.62.190302

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11274102), and the Program for New Century Excellent Talents in University of Ministry of Education of China (Grant No. NCET-11-0960).

[†] Corresponding author. E-mail: binzhou@hubu.edu.cn