

带有三体相互作用的  $S = 1$  自旋链中的保真率和纠缠熵

任杰 顾利萍 尤文龙

Fidelity susceptibility and entanglement entropy in  $S = 1$  quantum spin chain with three-site interactions

Ren Jie Gu Li-Ping You Wen-Long

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 020302 (2018) DOI: 10.7498/aps.20172087

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.20172087>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I2>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[一种生成质量最优路径纠缠微波信号的压缩参量选择方法](#)

An approach to selecting the optimal squeezed parameter for generating path entangled microwave signal

物理学报.2017, 66(23): 230302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.230302>

[一维自旋 1 键交替 XXZ 链中的量子纠缠和临界指数](#)

Quantum entanglement and critical exponents in one-dimensional spin-1 bond-alternating XXZ chains

物理学报.2017, 66(12): 120301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.120301>

[基于量子图态的量子秘密共享](#)

Quantum secret sharing with quantum graph states

物理学报.2016, 65(16): 160301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.160301>

[量子 BB84 协议在联合旋转噪音信道上的安全性分析](#)

Security analysis of BB84 protocol in the collective-rotation noise channel

物理学报.2016, 65(3): 030302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.030302>

[光学体系宏观-微观纠缠及其在量子密钥分配中的  \$\tau\$](#)

Macro-micro entanglement in optical system and its application in quantum key distribution

物理学报.2015, 64(14): 140303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.140303>

# 带有三体相互作用的 $S = 1$ 自旋链中的保真率和纠缠熵\*

任杰<sup>1)†</sup> 顾利萍<sup>1)</sup> 尤文龙<sup>2)</sup>

1) (常熟理工学院物理系, 常熟 215500)

2) (苏州大学物理与光电·能源学院, 苏州 215006)

(2017年9月21日收到; 2017年10月13日收到修改稿)

研究了带有次近邻和三体相互作用的  $S = 1$  自旋链的保真率和纠缠熵. 通过密度矩阵重整化群数值方法计算了三体相互作用对保真率的影响, 并分析了其与量子相变的关系. 研究表明保真率可以探测 Haldane 相与二聚物相之间的相变. 此外还研究了该相变与量子纠缠熵的关系. 通过保真率和量子纠缠熵这两个信息观测量得到的结果和弦序参量得到的结果一致. 在此基础上给出了相图.

**关键词:** 量子相变, 保真率, 量子纠缠熵, 密度矩阵重整化群

**PACS:** 03.67.-a, 05.30.Jp

**DOI:** 10.7498/aps.67.20172087

## 1 引言

在过去的二十年中, 量子自旋系统中的量子相变一直是物理学家研究的热点之一<sup>[1]</sup>. 这些研究当中, 自旋  $S = 1$  海森伯模型也吸引了不少研究者的注意<sup>[2-4]</sup>, 其中原因之一是系统的基态为著名的 Haldane 相. 这个相最显著的特征之一是有非局域的弦序参量. 另外一个特点是基态和自旋三重激发态之间是非简并的, 这点和自旋为  $1/2$  的海森伯自旋链有着很大的差别. 实验上发现很多材料为  $S = 1$  的准一维自旋链, 例如  $\text{Y}_2\text{BaNi}_5$ <sup>[5]</sup>,  $\text{CsNiCl}_3$ <sup>[6]</sup>,  $\text{Dy}_2\text{BaNiO}_5$ <sup>[7]</sup>,  $\text{Nd}_2\text{BaNiO}_5$ <sup>[8]</sup>. 然而完美的一维海森伯自旋链在材料中很少出现, 或多或少会出现一些各向异性或者杂乱性以及其它类型的复杂相互作用, 如次近邻相互作用甚至多体相互作用. 值得一提的是, 很多准一维材料具有锯齿形结构, 次近邻格点间的距离与最近邻格点间的距离相比差别并不是很大, 所以研究带有次近邻的相互作用以及多体相互作用的  $S = 1$  自旋链是一件有现实意义的事情. 最近, 很多研究利用从量子信

息中衍生出来的概念来研究量子多体系统的基态相变问题, 其中最常见的是利用量子纠缠熵和保真率探测量子多体系统中的量子临界点. 大量的研究表明, 这两个观测量在强关联体系中对相变探测都是非常有效的<sup>[9-17]</sup>, 这是因为系统发生相变时, 系统的基态性质会发生剧烈的变化, 从而使得这两个物理量也会相应地发生剧烈的变化. 基于这两个量子信息观测量的普适性, 本文将利用它们研究有邻近相互作用以及多体相互作用的  $S = 1$  自旋链中的量子相变.

## 2 研究模型

系统的哈密顿量如下:

$$H = \sum_{i=1}^N (J_1 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J_2 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}) + \sum_{i=1}^N [J_3 (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})(\mathbf{S}_{i+1} \cdot \mathbf{S}_{i+2}) + \text{h.c.}], \quad (1)$$

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11374043, 11474211) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: jren@cslg.edu.cn

其中  $S_i$  为  $i$  格点上的  $S = 1$  的自旋算符; 参数  $J_1$  为近邻的相互作用, 假设  $J_1 = 1$ ; 参数  $J_2, J_3$  分别代表次近邻相互作用和三体相互作用; 符号 h.c. 表示前一项的转置共轭. 此外, 本文中采用了开放的边界条件,  $N$  代表自旋链的长度.

### 3 量子信息度量与算法

量子保真度, 一个来自量子信息理论的概念, 可以用来探测物理系统中的量子相变. 假设一个简单系统, 其系统的哈密顿量可以写成  $H(J_3) = H_0 + J_3 H_1$ , 其中  $H_0$  为主要部分,  $H_1$  为驱动部分,  $J_3$  为  $H_1$  的大小. 如果  $\rho(J_3)$  代表系统基态的密度矩阵, 那么两个基态  $\rho(J_3)$  和  $\rho(J_3 + \delta J_3)$  之间的保真度定义如下:

$$F(J_3, \delta J_3) = \text{Tr} \left[ \sqrt{\rho^{1/2}(J_3) \rho(J_3 + \delta J_3) \rho^{1/2}(J_3)} \right], \quad (2)$$

其中  $\delta J_3$  是一很小的变化量. 对于一个纯态  $\rho = |\psi_0\rangle\langle\psi_0|$ , 方程 (2) 可以写成

$$F(J_3, \delta J_3) = |\langle\psi_0(J_3)|\psi_0(J_3 + \delta J_3)\rangle|, \quad (3)$$

其表示两个态的交叠程度. 当  $\delta J_3 = 0$ , 保真度会达到其最大值  $F(J_3, 0) = 1$ . 为了  $\delta J_3$  避免任意性, 一般采用平均保真率, 其定义如下:

$$\chi = \lim_{\delta J_3 \rightarrow 0} \frac{-2 \ln F(J_3, \delta J_3)}{N(\delta J_3)^2}, \quad (4)$$

其与量子相变之间的关系已经得到证实 [10,11].

另一方面, 纠缠熵被人们用来度量系统的两体纠缠, 其定义如下. 假设  $|\psi_0\rangle$  表示系统的基态, 系统可以分成 A, B 两个部分, 一般情况下, 把第一个自旋到第  $L$  个看成 A 部分, 剩下的部分就是 B 部分. 其中 A 部分的约化密度矩阵可以表示为

$$\rho_A = \text{Tr}_B(|\psi_0\rangle\langle\psi_0|). \quad (5)$$

A, B 部分之间的两体纠缠可以表示为

$$S_L = -\text{Tr}(\rho_A \log_2 \rho_A). \quad (6)$$

众所周知, 研究强关联系统的一个典型难题就是系统希尔伯特空间的维度随着粒子数的增加呈指数性增长. 值得庆幸的是, 利用密度矩阵重整化群的方法, 可以得到大尺度的一维强关联系统的近似基态 [18,19], 从而便于研究系统的特性. 利用有限系统密度矩阵重整化群的方法, 计算哈密顿量公式 (1) 的基态, 采用双精度数据并保留了 200 个态, 使得截断误差在  $10^{-8}$  以下.

### 4 数值结果

利用密度矩阵重整化群的方法计算了系统 (1) 基态的保真率随  $J_3$  的变化, 其中系统的  $N$  达到 55. 图 1 表示不同大小的系统的基态保真率与三体相互作用  $J_3$  之间的关系. 不同大小的系统的保真率都存在一个峰值, 并且这个峰值随着系统的增大而变大. 峰值对应的  $J_3$  随着  $N$  的增大而减小. 众所周知, 保真度是度量两个态的相似度, 而量子相变发生的时候, 量子临界点两侧的量子态相似度最低, 所以保真率的峰值恰好对应系统的相变点, 这正是我们用保真率探测相变的原因. 保真率峰值对应的  $J_3$  有着如下的关系:

$$J_3 \sim J_3^c + a_1 N^{b_1}, \quad (7)$$

其中  $a_1, b_1$  是常数, 这个结果在图 1 的插图中显示. 得到  $a_1 = 0.0352$ ,  $b_1 = -0.247$ ,  $J_3^c = 0.111$ . 当  $J_3 = 0$ , 系统处于 Haldane 相, 当  $J_3$  很大时, 系统处在二聚物相.  $J_3^c = 0.111$  就是上述这两种相的相变点, 这个结果和以前的研究结果一致 [20].

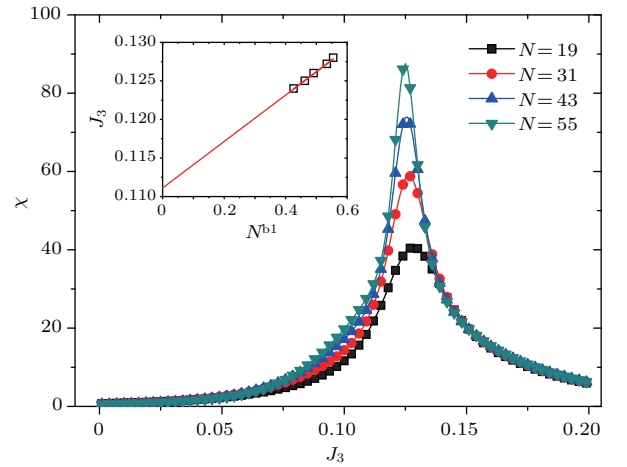


图 1 平均保真率随三体相互作用  $J_3$  的变化关系. 其中  $J_2 = 0$ , 插图为平均保真率极值对应的  $J_3^c$  的尺度效应, 直线为拟合线.

Fig. 1. The fidelity susceptibility per site is plotted as a function of the three-site interaction  $J_3$  for different system sizes with  $J_2 = 0$ . Inset: finite-size scaling of  $J_3^c$  of the fidelity susceptibility. The line is the fit line.

此外, 还研究了系统左边部分和右边部分之间的纠缠熵, 其中  $L = (N + 1)/2$ . 图 2 表示系统左边部分和右边部分之间的纠缠熵随  $J_3$  变化的关系. 可以看出纠缠熵随  $J_3$  增大到达一个峰值, 随着  $J_3$  的进一步增大, 纠缠熵迅速下降到 0. 此时  $J_3 = 0.167$ , 且不随系统变化而变化. 这表

明这个点就是系统的Majumdar-Ghosh (MG) 点. 对于任意的自旋, 其MG对应的位置可以表达为  $J_3/J_1 = 1/[4S(S+1) - 2]$  [21], 这里  $S = 1$ , 很容易得到  $J_3/J_1 = 0.167$ , 这验证了本文结果的正确性.

一般情况下, 纠缠熵的极值对应点就是系统的相变点. 拟合纠缠熵峰值对应的位置随系统  $N$  的变化关系, 始终没有得到  $J_3^c = 0.111$  这个点. 这说明在此系统中该结论不成立. 有时纠缠熵的极值

对应点不是系统的相变点, 而是纠缠熵一阶导数的极值对应点是系统的相变点 [15,16,21]. 这是因为系统能量的二阶导数部分往往对应密度矩阵的一阶导数. 图 2 (b) 表示纠缠熵的一阶导数随三体相互作用  $J_3$  之间的关系. 在  $J_3 = 0.12$  附近纠缠熵的一阶导数有极小值. 通过 (6) 式拟合, 很容易就得到  $J_3^c = 0.111, a_2 = 0.029, b_2 = -0.195$  [见图 2 (b) 插图].

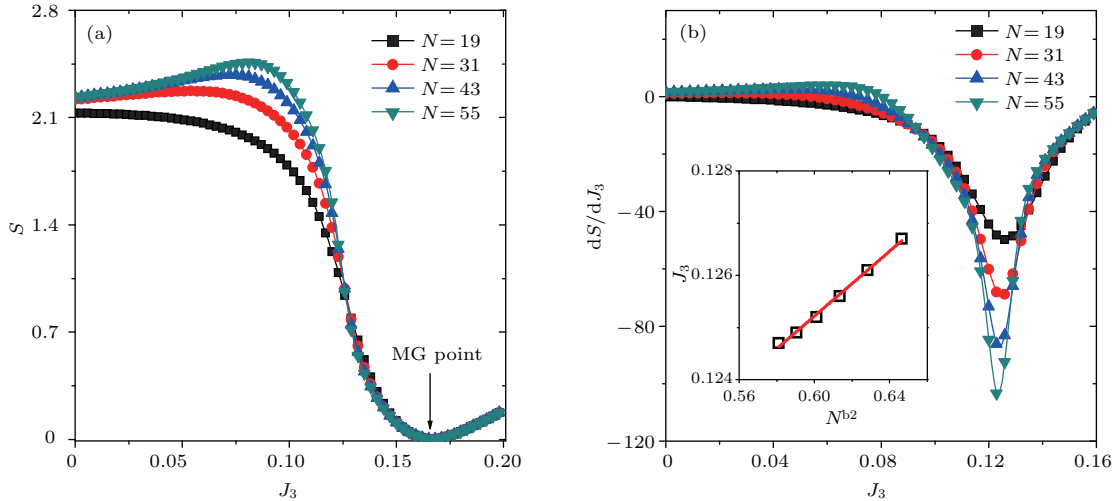


图 2 (a) 纠缠熵和 (b) 其一阶导数随三体相互作用  $J_3$  的变化关系 其中  $J_2 = 0$ , (b) 当中的插图为纠缠熵一阶导数极值对应的  $J_3$  的尺度效应, 直线为拟合线  
 Fig. 2. (a) The entanglement and (b) its first deviation are plotted as a function of the three-site interaction  $J_3$  for different system sizes with  $J_2 = 0$ . Inset (b): finite-size scaling of  $J_3^c$  come from the first deviation of entanglement entropy. The line is the fit line.

为了进一步验证本文的结果, 数值模拟了弦序参量, 其结果在图 3 中显示. 弦序参量的定义如下 [22]:

$$O_x = - \lim_{j \rightarrow \infty} \left[ S_i^x \exp \left( i\pi \sum_{i < l < j} S_l^x \right) S_j^x \right]. \quad (8)$$

弦序参量可以探测 Haldane 相, 因为在 Haldane 相中弦序参量为正值. 从图 3 可以看出, 随着  $J_3$  的增长, 弦序参量迅速下降为零, 这表明系统从 Haldane 相变化到二聚物相. 发现不同大小的系统弦序参量随  $1/N$  呈线性关系, 见图 3 插图. 本文展示了  $J_3 = 0.105$  和  $J_3 = 0.115$  这两种情况. 若将  $N$  推广到无穷, 也就是  $1/N = 0$ , 研究发现  $O_x(J_3 = 0.105) > 0, O_x(J_3 = 0.115) < 0$ , 这就表明在这两种情况下系统处在不同的相.

进一步研究  $J_2 = -0.3$  的情况, 得到类似的结果 (见图 4). 通过图 4 (a) 研究发现保真率的峰值停留在  $J_3 = 0.212$  位置上, 几乎不随系统  $N$  的改变而

变化, 说明 Haldane 相与二聚物相间的相变点就在此点. 图 4 (b) 揭示了纠缠熵与  $J_3$  变化关系, 很容易

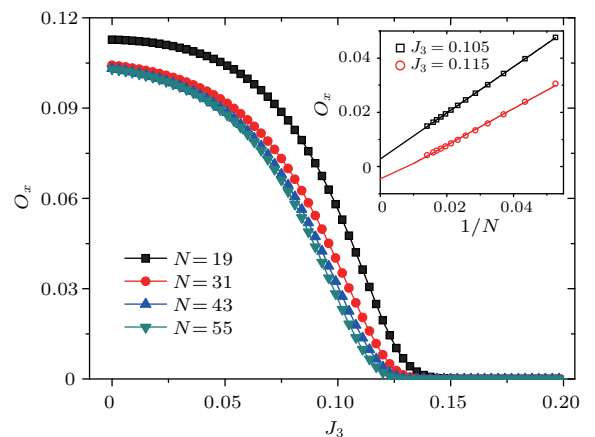


图 3 弦序参量随三体相互作用  $J_3$  的变化关系 其中  $J_2 = 0$ ; 插图为弦序参量的尺度效应, 其中  $J_3 = 0.105, J_3 = 0.115$   
 Fig. 3. The string order parameter is plotted as a function of the three-site interaction  $J_3$  for different system sizes with  $J_2 = 0$ . Inset: scaling of string order parameter with  $J_3 = 0.105, J_3 = 0.115$ .

看出纠缠熵为零的点也就是到MG点在  $J_3 = 0.267$ . 图4(c)可以通过纠缠熵的一阶导数的极值探测到量子相变点. 在此基础上, 研究不同  $J_2$  情况下的保真率和纠缠熵随  $J_3$  的变化关系, 并得到其相变边界. 因此, 本文进一步展示了系统的相图随  $J_2$  以及  $J_3$  的变化关系(见图5).  $J_2 > 0, J_3 > 0$  部分的相图已经在文献[20]中显示. 当  $J_2 = 0$  时, 系统相变发生在  $J_3 = 0.111$ , 此相变属于二级相变. 随着  $J_2$  的增长, 此相变会从二级相变转化成一二级相变. 随着  $J_2$  的进一步增长, 会出现次近邻的 Haldane 相与 Haldane 相的一级相变. 众所周知,

保真率在探测一级相变会出现比二级相变时更尖锐的峰值[23,24]. 此外出现的次近邻的 Haldane 与二聚物相之间的二级相变非常类似于 Haldane 相与二聚物相之间的相变, 保真率也能成功探测此相变. 为了避免重复, 这里不再展示  $J_2 > 0, J_3 > 0$  部分的相图, 本文中只展示了  $J_2 < 0, J_3 > 0$  部分的相图. 随着  $J_2 < 0$  的出现, 系统相变仍属于二级相变, 只是相变点  $J_3$  增大. 对于MG点也类似的结论, 并且相变点和 MG 点之间的差距也越来越小, 最后重合在一起, 成为相变边界.

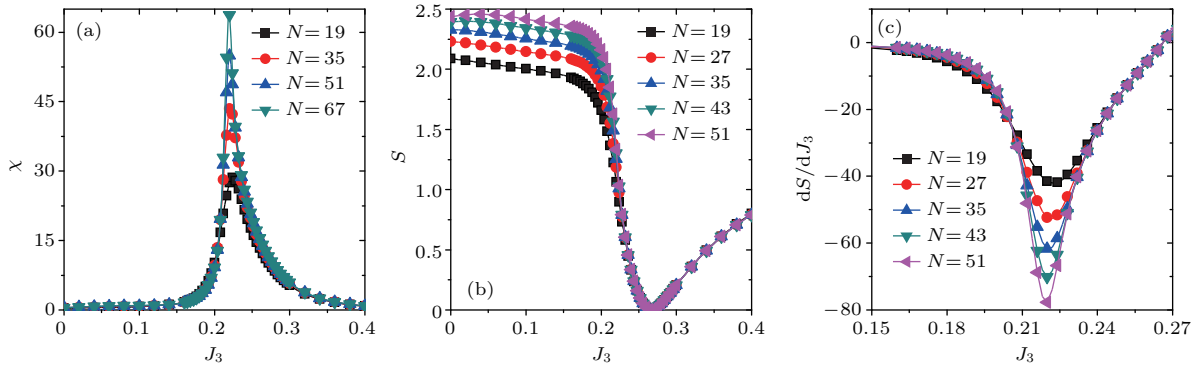


图4 (a) 平均保真率, (b) 纠缠熵, (c) 纠缠熵的一阶导数随三体相互作用  $J_3$  的变化关系 ( $J_2 = -0.3$ )

Fig. 4. (a) Fidelity susceptibility per site, (b) entanglement entropy, (c) the first deviation of entanglement entropy are plotted as a function of the three-site interaction  $J_3$  for different system sizes with  $J_2 = -0.3$ .

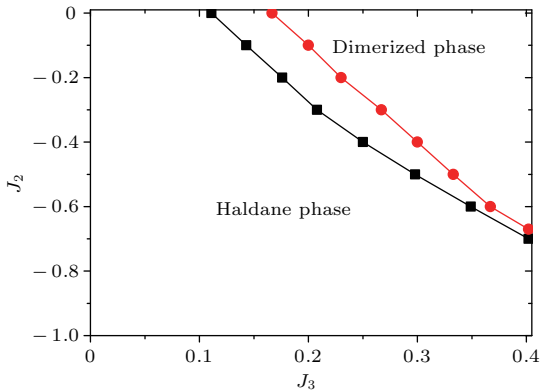


图5 系统的相变图 其中  $J_2 < 0, J_3 > 0$ ; 黑线为 Haldane 与二聚物相变边界, 红色线为 MG 点

Fig. 5. Phase diagram of a spin-1 Heisenberg chain with the interactions  $J_2 < 0$  and  $J_3 > 0$ . The black indicates the boundary between Haldane phase and dimerized phase, and the red line indicate the MG points.

## 5 结 论

研究了带有次近邻相互作用和三体相互作用的自旋  $S = 1$  一维自旋链中量子纠缠熵和量子保真率, 并分析了这两个量子观测量与该系统中的

量子相变之间的关系. 研究结果表明系统存在的 Haldane 相与二聚物相之间的相变可以通过保真率以及纠缠熵的一阶导数观测到. 这两个量子信息观测量在  $S = 1$  的自旋链中被证实都是很不错的量子相变的指针, 可以帮助我们进一步了解该系统. 应用这两个量子信息观测量来确定量子相变临界点的优越性在于它们可以帮助我们进一步判定其他的序参量是否可靠.

## 参考文献

- [1] Sachdev S 1999 *Quantum Phase Transitions* (Cambridge: Cambridge University Press) p133
- [2] den Nijs M, Rommelse K 1989 *Phys. Rev. B* **40** 4709
- [3] Chen W, Hida K, Sanctuary B C 2003 *Phys. Rev. B* **67** 104401
- [4] Degli Esposti Boschi C, Ercolelli E, Ortolani F, Roncaglia M 2003 *Eur. Phys. J. B* **35** 465
- [5] Darriet J, Regnault L 1993 *Solid State Commun.* **86** 409
- [6] Buyers W J L, Morra R M, Armstrong R L, Hogan M J, Gerlach P, Hirakawa K 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 371

- [7] Singh K, Basu T, Chowki S, Mahapatra N, Iyer K K, Paulose P L, Sampathkumaran E V 2013 *Phys. Rev. B* **88** 094438
- [8] Zheludev A, Tranquada J M, Vogt T, Buttrey D J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 7210
- [9] Li W, Andreas W, Delft J V 2013 *Phys. Rev. B* **88** 245121
- [10] You W L, Li Y W, Gu S J 2007 *Phys. Rev. E* **76** 022101
- [11] Cozzini M, Ionicioiu R, Zanardi P 2007 *Phys. Rev. B* **76** 104420
- [12] Ren J, Zhu S Q 2008 *Eur. Phys. J. D* **50** 103
- [13] Ren J, Xu X F, Gu L P, Li J L 2012 *Phys. Rev. A* **86** 064301
- [14] Ren J, Liu G H, You W L 2015 *J. Phys.: Condens. Matter* **27** 105602
- [15] Ren J, Zhu S Q 2009 *Phys. Rev. A* **79** 034302
- [16] Liu G H, Wang H L, Tian G S 2008 *Phys. Rev. B* **77** 214418
- [17] Zhao J H 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 220501 (in Chinese)  
[赵建辉 2012 物理学报 **61** 220501]
- [18] White S R 1993 *Phys. Rev. B* **48** 10345
- [19] Schollwöck U 2005 *Rev. Mod. Phys.* **77** 259
- [20] Chepiga N, Affleck I, Mila F 2016 *Phys. Rev. B* **93** 241108
- [21] Michaud F, Vernay F, Manmana S R, Mila F 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 127202
- [22] Wu L A, Sarandy M S, Lidar D A 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 250404
- [23] Gu S J 2010 *Int. J. Mod. Phys. B* **24** 4371
- [24] You W L, Dong Y L 2011 *Phys. Rev. B* **84** 174426



# Fidelity susceptibility and entanglement entropy in $S = 1$ quantum spin chain with three-site interactions\*

Ren Jie<sup>1)†</sup> Gu Li-Ping<sup>1)</sup> You Wen-Long<sup>2)</sup>

1) (Department of Physics, Changshu Institute of Technology, Changshu 215500, China)

2) (College of Physics, Optoelectronics and Energy, Soochow University, Suzhou 215006, China)

( Received 21 September 2017; revised manuscript received 13 October 2017 )

## Abstract

In the present work, we study the fidelity susceptibility and the entanglement entropy in an antiferromagnetic spin-1 chain with additional next-nearest neighbor interactions and three-site interactions, which are given by

$$H = \sum_i (J_1 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J_2 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}) + \sum_i [J_3 (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})(\mathbf{S}_{i+1} \cdot \mathbf{S}_{i+2}) + \text{h.c.}].$$

By using the density matrix renormalization group method, the ground-state properties of the system are calculated with very high accuracy. We investigate the effect of the three-site interaction  $J_3$  on the fidelity susceptibility numerically, and then analyze its relation with the quantum phase transition (QPT). The fidelity measures the similarity between two states, and the fidelity susceptibility describes the associated changing rate. The QPT is intuitively accompanied by an abrupt change in the structure of the ground-state wave function, so generally a peak of the fidelity susceptibility indicates a QPT and the location of the peak denotes the critical point. For the case of  $J_2 = 0$ , a peak of the fidelity susceptibility is found by varying  $J_3$ , and the height of the peak grows as the system size increases. The location of the peak shifts to a slightly lower  $J_3$  up to a particular value as the system size increases. Through a finite size scaling, the critical point  $J_3^c = 0.111$  of the QPT from the Haldane spin liquid to the dimerized phase is identified. We also study the effect of the three-site interaction on the entanglement entropy between the right half part and the rest. It is noted that the peak of the entanglement entropy does not coincide with the critical point. Instead, the critical point is determined by the position at which the first-order derivative of the entanglement entropy takes its minimum, since a second-order QPT is signaled by the first derivative of density matrix element. Moreover, the entanglement entropy disappears when  $J_3 = 1/6$ , which corresponds to the size-independent Majumdar-Ghosh point. The positions of quantum critical points extracted from these two quantum information observables agree well with those obtained by the string order parameters, which characterizes the topological order in the Haldane phase. Secondly, we also study the case of  $J_2 \neq 0$ , and obtain the critical points by both the fidelity susceptibility and the entanglement entropy. Finally we provide a ground-state phase diagram of the system. To sum up, the quantum information observables are effective tools for detecting diverse QPTs in spin-1 models.

**Keywords:** quantum phase transitions, fidelity susceptibility, entanglement entropy, density-matrix renormalization group

**PACS:** 03.67.-a, 05.30.Jp

**DOI:** 10.7498/aps.67.20172087

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11374043, 11474211).

† Corresponding author. E-mail: [ren@cslg.edu.cn](mailto:ren@cslg.edu.cn)