

## 极性分子摆动态的三体量子关联\*

李艳杰 刘金明†

(华东师范大学, 精密光谱科学与技术国家重点实验室, 上海 200062)

(2014年4月16日收到; 2014年6月8日收到修改稿)

极性分子具有较长的相干时间和较强的偶极-偶极相互作用, 因此它被视为量子信息处理的有效量子载体. 基于分子摆动态作为量子比特, 研究了处于热平衡状态下三极性分子线性链系统的三体量子关联特性, 分析了三体负性熵纠缠度、测量诱导扰动和三体量子失协随与电场强度、分子电偶极矩、分子转动常数、偶极-偶极相互作用和温度等参数有关的三个无量纲变量之间的变化关系. 研究表明: 在其他参数给定的情况下, 随电场强度的增加, 三体量子关联均变小; 随偶极-偶极相互作用强度的增大, 三体量子关联先增加到峰值再逐渐变小; 温度越高, 负性熵纠缠度和三体量子失协越小, 但测量诱导扰动随温度的改变在电场强度和偶极-偶极相互作用影响下呈现不同的变化趋势. 此外, 通过调节电场强度、偶极-偶极相互作用和温度, 可改变与操控极性分子摆动态的三体量子关联.

**关键词:** 摆动态, 三体负性熵纠缠度, 测量诱导扰动, 三体量子失协

**PACS:** 03.65.Ud, 03.67.-a, 03.65.Yz

**DOI:** 10.7498/aps.63.200302

## 1 引言

量子纠缠是量子物理不同于经典物理的最奇特、最不可思议的现象, 也是量子信息学区别于经典信息学最独特之处. 从量子力学的基本理论形成以来, 量子纠缠在量子信息学的各个领域都有广泛而重要的应用<sup>[1-3]</sup>. 随着对量子纠缠的深入了解与研究, 人们提出了各种度量纠缠的方法, 包括负性熵纠缠度<sup>[4]</sup>、形成纠缠度<sup>[5-7]</sup>以及相对熵纠缠度<sup>[8,9]</sup>等. 过去较长的一段时间里, 人们对量子关联的认识仅局限于量子纠缠, 通常认为量子纠缠就是量子关联. 然而, 最近的研究结果发现, 量子纠缠并不能刻画量子系统中的所有量子关联, 某些非纠缠态也能用于量子信息处理, 而且非纠缠的量子关联在一些量子通信和量子计算任务中扮演着关键的作用. 因此, 量子纠缠只是量子关联的一部分, 但不等同于量子关联.

为了理解和描述量子关联, 人们基于量子测量提出了将总关联分成经典关联与量子关联的分类方法. 2001年, Ollivier和Zurek<sup>[10]</sup>及Henderson和Vedral<sup>[11]</sup>依据量子测量分别独立提出了量子失协的概念, 作为量子关联的一种度量方式. 2008年, Luo<sup>[12]</sup>提出利用测量诱导的扰动来度量量子关联, 并将其定义为给定态和与之距离最近的经典态间的量子互信息差. 2010年, 文献<sup>[13,14]</sup>提出了一种计算比较方便的量子关联度量方法, 即几何量子失协. 同一年, 为了将量子纠缠和量子关联进行统一的比较, Modi等<sup>[15]</sup>提出利用相对熵来量化量子关联. 随后, 文献<sup>[16,17]</sup>将两体量子失协推广到多体量子系统的情形, 给出了三体量子失协的度量方法. 近年来, 关于非纠缠的量子关联的理论<sup>[18-27]</sup>和实验<sup>[28-30]</sup>研究已得到广泛关注.

另一方面, 最近人们在制备、冷却和操控极性分子的方法与技术方面取得了令人瞩目的成就<sup>[31-35]</sup>. 而且, 极性分子综合了中性原子和囚禁

\* 国家自然科学基金(批准号: 11174081, 11034002, 11134003, 11104075, 60708003)和国家重点基础研究发展计划(批准号: 2011CB921602, 2012CB821302)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: jmlu@phy.ecnu.edu.cn

离子的优点,即具有较长的相干时间和较强的偶极-偶极相互作用,使得其有望作为量子信息处理的一种新载体. 2002年, DeMille<sup>[36]</sup>提出了一种基于极性分子进行量子计算的原创性方案,即利用囚禁在一维光学晶格中、部分朝向外电场、具有偶极相互作用的双原子分子的偶极矩作为量子比特来构造量子信息处理器. 至今,已相继提出了一些利用极性分子作为量子信息物理载体的量子计算方案<sup>[37-41]</sup>.

最近, Wei等<sup>[42]</sup>研究了两个极性分子摆动态的共生纠缠度,并基于分子摆动态提出了一种实现量子受控非门的方案. Zhu等<sup>[43]</sup>通过采用光学控制理论来设计合适的激光脉冲,理论探讨了基于两个极性双原子分子摆动态构造非门、控制非门、Hadamard门这些基本量子逻辑门的实现方法. 据我们所知,以往的量子信息研究中未考虑三个极性分子摆动态相互间存在耦合的情形. 本文研究三个极性分子摆动态存在互相耦合时的三体量子关联特性,分析了负性熵纠缠度,测量诱导扰动和三体量子失协受分子电偶极矩、外电场强度、分子转动常数、偶极-偶极相互作用和温度等参数影响的变化规律. 研究结果表明,通过改变电场强度、偶极-偶极相互作用和温度,可有效操控极性分子摆动态的三体量子关联. 而且,电场强度越大,三体量子关联均越小;随着偶极-偶极作用强度的增加,三体量子关联都先增加到峰值再逐渐变小.

## 2 三体量子关联简介和极性分子摆动态模型

### 2.1 三体负性熵纠缠度

三体负性熵纠缠度<sup>[44]</sup>可用来定量计算三量子比特 $a$ ,  $b$ 和 $c$ 组成的混合态 $\rho$ 的纠缠度,其定义式为 $N^{(3)}(\rho) = \sqrt[3]{N_{a-bc}N_{b-ac}N_{c-ab}}$ ,它是两体负值度 $N_{i-jk}$  (当 $i$ 取 $a, b, c$ 时,  $jk = bc, ac, ab$ )的几何平均值,其中

$$N_{i-jk} = \sum_q |\lambda_q(\rho^{T_i})| - 1,$$

$\lambda_q(\rho^{T_i})$ 是总密度矩阵 $\rho$ 关于子系统 $i$ 的部分转置矩阵 $\rho^{T_i}$ 的本征值. 对于对称的三体量子系统, $N^{(3)}$ 简化为该系统任意两子系的两体负性熵纠缠度.

### 2.2 三体量子失协

对于三体量子系统,人们已提出量化真正总关联、经典关联和量子关联的计算方法. 按照文献<sup>[16, 17]</sup>的思路,三体混合态 $\rho$ 的总关联可表示为

$$T^{(3)}(\rho) = T(\rho) - T^{(2)}(\rho), \quad (1)$$

其中, $T(\rho)$ 是Shannon经典互信息的量子推广,

$$T(\rho) = S(\rho_a) + S(\rho_b) + S(\rho_c) - S(\rho),$$

这里 $S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log_2 \rho)$ 是整个系统的冯诺依曼熵, $S(\rho_i)$  ( $i = a, b, c$ )是相应约化密度矩阵的冯诺依曼熵.  $T(\rho)$ 描述 $\rho$ 和与它本身最近直积态 $\Pi_\rho = \rho_a \otimes \rho_b \otimes \rho_c$ 间的距离.  $T^{(2)}(\rho)$ 是系统中任意两个粒子间总两体关联的最大值,即

$$T^{(2)}(\rho) = \max[I^{(2)}(\rho_{a,b}), I^{(2)}(\rho_{a,c}), I^{(2)}(\rho_{b,c})], \quad (2)$$

这里 $I^{(2)}(\rho_{i,j}) = S(\rho_i) + S(\rho_j) - S(\rho_{ij})$  ( $i, j = a, b, c$ )表示由两个粒子 $i$ 和 $j$ 组成子系统的两体量子互信息.

类似于 $T^{(3)}(\rho)$ ,真正三体经典关联 $J^{(3)}(\rho)$ 定义为总经典关联 $J(\rho)$ 和任意两子系统经典关联的最大值 $J^{(2)}(\rho)$ 之差,即

$$J^{(3)}(\rho) = J(\rho) - J^{(2)}(\rho). \quad (3)$$

在量子状态下,三体总经典关联定义为经典关联的6种可能的量子拓展的最大值,即

$$J(\rho) = \max_{i,j,k} [S(\rho_i) - S(\rho_{i|j}) + S(\rho_k) - S(\rho_{k|ij})], \quad (4)$$

这里,

$$S(\rho_{i|j}) = \min_{\{E_j^m\}} \sum_m p_m S(\rho_{i|E_j^m}),$$

$$S(\rho_{k|ij}) = \min_{\{E_i^l, E_j^m\}} \sum_{lm} p_{lm} S(\rho_{k|E_i^l E_j^m})$$

表示分别以 $\{E_i^l\}$ ,  $\{E_j^m\}$ 为基矢对粒子 $i$ 和 $j$ 进行正算子取值测度的条件熵. 而且

$$p_m = \text{Tr}_{ij}(E_j^m \rho_{ij}),$$

$$\rho_{i|E_j^m} = \frac{\text{Tr}_j(E_j^m \rho_{ij})}{p_m},$$

$$p_{lm} = \text{Tr}_{ijk}(E_i^l E_j^m \rho),$$

$$\rho_{k|E_i^l E_j^m} = \frac{\text{Tr}_{ij}(E_i^l E_j^m \rho)}{p_{lm}}.$$

此外,  $J^{(2)}(\rho)$  对应系统任意两个量子比特中两体经典关联的最大值:

$$J^{(2)}(\rho) = \max[J^{(2)}(\rho_{a,b}), J^{(2)}(\rho_{a,c}), J^{(2)}(\rho_{b,c})], \quad (5)$$

其中,

$$J^{(2)}(\rho_{a,b}) = \max[J_{a:b}^{(2)}(\rho_{a,b}), J_{b:a}^{(2)}(\rho_{a,b})],$$

$$J_{a:b}^{(2)}(\rho_{a,b}) = \max_{\{E_b^m\}} [S(\rho_a) - S(\rho_a|E_b^m)].$$

综上, 真正的三体量子失协 (TQD) 定义为

$$D^{(3)}(\rho) = T^{(3)}(\rho) - J^{(3)}(\rho). \quad (6)$$

## 2.3 测量诱导扰动

测量诱导扰动 (MID) 被定义为给定态和与之最近的经典态  $\Pi_\rho$  间的量子互信息量之差<sup>[12]</sup>:

$$\text{MID}(\rho) = I(\rho) - I(\Pi_\rho), \quad (7)$$

这里

$$\Pi_\rho = \sum_{a,b,c} (\Pi_a \otimes \Pi_b \otimes \Pi_c) \times \rho(\Pi_a \otimes \Pi_b \otimes \Pi_c)$$

表示分别以三个约化态的谱分解

$$\rho_A = \sum_a p_a \Pi_a,$$

$$\rho_B = \sum_b p_b \Pi_b,$$

$$\rho_C = \sum_c p_c \Pi_c$$

为基矢对各自子系统进行局域测量. 因系统的约化态不受这种局部测量的影响, 所以 MID 表征局域

测量下的熵消耗, 即

$$\text{MID}(\rho) = S(\Pi_\rho) - S(\rho). \quad (8)$$

## 2.4 极性分子摆动态

外电场中单个被囚禁的线性极性分子的哈密顿量可写为<sup>[42]</sup>

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) + BJ^2 - \mu \cdot \varepsilon, \quad (9)$$

其中,  $m$  为分子质量,  $B$  为转动常数,  $\mu$  表示分子固有电偶极矩; 分子具有平动动能  $p^2/(2m)$ , 势能  $V(r)$ , 转动能量  $BJ^2$ , 以及与外电场  $\varepsilon$  的相互作用能  $\mu \cdot \varepsilon$ . 在极低温度下, 囚禁分子的平动缓慢, 接近简谐振动. 因此, 平动能和势能  $\frac{p^2}{2m} + V(r)$  几乎是常数, 可从总哈密顿量  $H$  中删除, 剩下的转动能量和 Stark 相互作用项可表示为

$$H_S = BJ^2 - \mu\varepsilon \cos \theta, \quad (10)$$

$H_S$  呈现球面摆形式,  $\theta$  是分子轴和电场方向的夹角. 通过求解球面摆本征态, 采用量子数  $\tilde{J}$  和  $M$  表征无外场的转动态. 这里, 因 Stark 相互作用中混杂了转动态,  $\tilde{J}$  不是好量子数, 然而只要方位角保留电场方向的对称性,  $M$  ( $\tilde{J}$  在电场方向的投影) 仍可看成好量子数. 遵循 DeMille 的方法, 选取最低  $M = 0$  的  $\tilde{J} = 0$  和  $\tilde{J} = 1$  的摆动态作为量子比特态  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$ , 它们是球谐函数  $Y_{f,0}$  的叠加:

$$|0\rangle = \sum_f p_f Y_{f,0}(\xi, \varphi),$$

$$|1\rangle = \sum_f q_f Y_{f,0}(\xi, \varphi), \quad (11)$$

其中  $p_f$  和  $q_f$  是与转动量子数  $f$  有关的球谐函数的叠加系数.

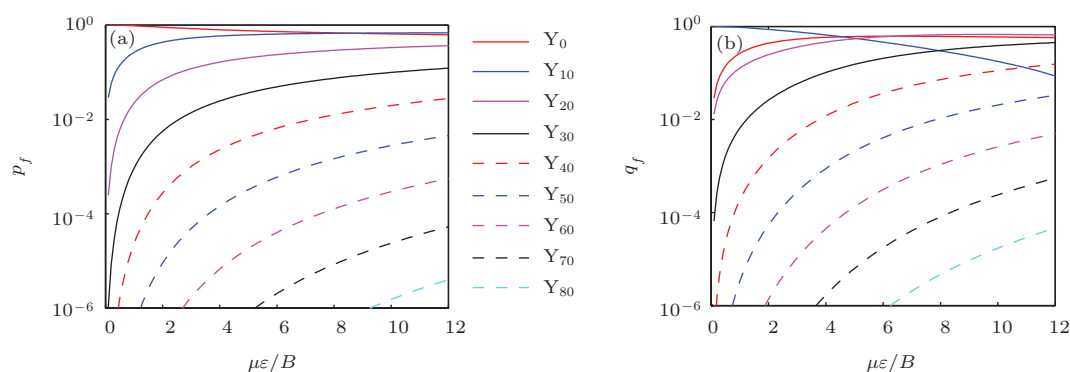


图1 (网刊彩色) 构成量子比特态的球谐函数的叠加系数随  $\mu\varepsilon/B$  的变化 (a) 对应摆动态  $|0\rangle$  的系数  $p_f$ ; (b) 对应摆动态  $|1\rangle$  的系数  $q_f$

图1给出了构成摆动量子比特基矢 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的球谐函数的叠加系数随 $\mu\epsilon/B$ 的变化关系. 从图1(a)中可看出: 当无外电场( $\mu\epsilon/B = 0$ )时,  $Y_{00}$ 的系数为1; 随着 $\mu\epsilon/B$ 的增加,  $Y_{00}$ 的系数慢慢减小, 而其他球谐函数的系数均逐渐增加. 从图1(b)中可知: 当无外电场( $\mu\epsilon/B = 0$ )时,  $Y_{10}$ 的系数为1; 随 $\mu\epsilon/B$ 的增加,  $Y_{10}$ 的系数逐渐减小, 而其他球谐函数的系数都慢慢增加; 当 $\mu\epsilon/B$ 增加到一定值时,  $Y_{00}$ ,  $Y_{20}$ ,  $Y_{30}$ 和 $Y_{40}$ 的系数值可超过 $Y_{10}$ 的系数值.

本文假定三个相同的极性分子呈线性等距排列, 两两分子间的偶极-偶极相互作用可表示为

$$V_{xy} = \frac{\boldsymbol{\mu}_x \cdot \boldsymbol{\mu}_y - 3(\boldsymbol{\mu}_x \cdot \mathbf{n})(\boldsymbol{\mu}_y \cdot \mathbf{n})}{|\mathbf{r}_x - \mathbf{r}_y|^3} \quad (x, y = 1, 2, 3), \quad (12)$$

其中,  $\mathbf{n}$ 表示分子 $x$ 至分子 $y$ 的距离 $\mathbf{r}_{xy}$ 方向的单位向量,  $\boldsymbol{\mu}_x$ 和 $\boldsymbol{\mu}_y$ 表示分子的电偶极矩. 当外场存在时, 可用与电场方向有关的角度来表征偶极-偶极相互作用. 通过对方位角取平均( $M = 0$ 态对应均匀分布)后, 偶极-偶极相互作用可简化为

$$V_{xy} = \Omega_{xy}(1 - 3\cos^2\alpha)\cos\theta_x\cos\theta_y, \quad (13)$$

这里,  $\Omega_{xy} = \mu^2/r_{xy}^3$ , 角度 $\alpha$ 是向量 $\mathbf{r}_{xy}$ 与电场方向的夹角, 极角 $\theta_x$ 和 $\theta_y$ 分别是电偶极矩 $\boldsymbol{\mu}_x$ 和 $\boldsymbol{\mu}_y$ 与电场方向的夹角. 而且也假定三个相同的极性分子所处外场的方向一致, 但外场强度呈现梯度变化, 取梯度差为电场本身的0.01. 因为外电场方向有一个可观的梯度且在极性分子阵列中每个位置的Stark效应不同, 所以分子量子比特的状态可分别寻址.

在摆动态基矢 $\{|000\rangle, |001\rangle, |1010\rangle, \dots, |111\rangle\}$ 中, 三个极性分子的哈密顿量可写为

$$\mathbf{H}' = \mathbf{H}_{S1} + \mathbf{H}_{S2} + \mathbf{H}_{S3} + \mathbf{V}_{12} + \mathbf{V}_{13} + \mathbf{V}_{23}, \quad (14)$$

其中,

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{S1} &= \begin{pmatrix} E_0^1 & 0 \\ 0 & E_1^1 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{I}_2 \otimes \mathbf{I}_3, \\ \mathbf{H}_{S2} &= \mathbf{I}_1 \otimes \begin{pmatrix} E_0^2 & 0 \\ 0 & E_1^2 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{I}_3, \\ \mathbf{H}_{S3} &= \mathbf{I}_1 \otimes \mathbf{I}_2 \otimes \begin{pmatrix} E_0^3 & 0 \\ 0 & E_1^3 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_{12} &= \Omega_{12} \left[ \begin{pmatrix} C_0^1 & C_t^1 \\ C_t^1 & C_1^1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} C_0^2 & C_t^2 \\ C_t^2 & C_1^2 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{I}_3 \right], \\ \mathbf{V}_{13} &= \Omega_{13} \left[ \begin{pmatrix} C_0^1 & C_t^1 \\ C_t^1 & C_1^1 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{I}_2 \otimes \begin{pmatrix} C_0^3 & C_t^3 \\ C_t^3 & C_1^3 \end{pmatrix} \right], \\ \mathbf{V}_{23} &= \Omega_{23} \left[ \mathbf{I}_1 \otimes \begin{pmatrix} C_0^2 & C_t^2 \\ C_t^2 & C_1^2 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} C_0^3 & C_t^3 \\ C_t^3 & C_1^3 \end{pmatrix} \right]. \end{aligned}$$

这里,  $E_0^x$ 和 $E_1^x$  ( $x = 1, 2, 3$ )分别表示摆动态量子比特 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的本征能量,  $\mathbf{I}_x$ 是 $2 \times 2$ 维的单位矩阵.  $C_0^x$ 和 $C_1^x$ 分别表示 $\cos\theta_x$ 在基矢 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 下的期望值, 即分子取向度,  $C_t^x$ 表示基矢 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 之间的跃迁偶极矩:

$$\begin{aligned} C_0^x &= \langle 0 | \cos\theta_x | 0 \rangle, \\ C_1^x &= \langle 1 | \cos\theta_x | 1 \rangle, \\ C_t^x &= \langle 0 | \cos\theta_x | 1 \rangle. \end{aligned} \quad (15)$$

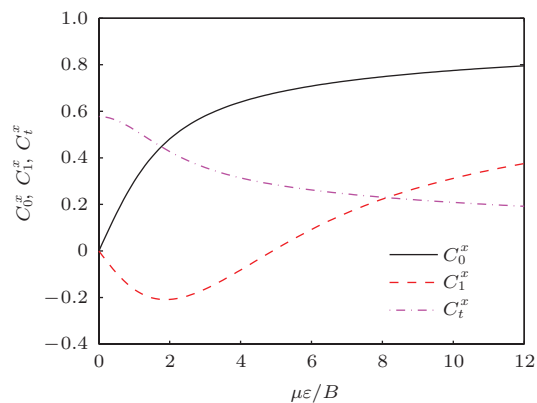


图2 分子取向度 $C_0^x$ ,  $C_1^x$ 及跃迁偶极矩 $C_t^x$ 随 $\mu\epsilon/B$ 的变化

图2给出了分子取向度 $C_0^x$ ,  $C_1^x$ 以及跃迁偶极矩 $C_t^x$ 随 $\mu\epsilon/B$ 的变化曲线. 由图可知: 随着 $\mu\epsilon/B$ 的增加,  $C_0^x$ 从零开始单调增加, 而 $C_1^x$ 先从零开始减小再逐渐增加; 当 $\mu\epsilon/B < 4.5$ 时,  $C_1^x$ 均为负值. 此外, 跃迁偶极矩 $C_t^x$ 随 $\mu\epsilon/B$ 的增加单调递减. 图中所呈现的分子取向度 $C_0^x$ 和 $C_1^x$ 与 $\mu\epsilon/B$ 的变化关系可由摆动态 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的角分布随 $\mu\epsilon/B$ 的演化加

以解释<sup>[42]</sup>.

为了计算热平衡状态下极性分子摆动态的量子关联, 引入与温度有关的密度矩阵  $\rho(T) = \exp(-\beta H')/Z$ , 其中  $\beta = 1/(k_B T)$ ,  $k_B$  为玻尔兹曼常数;  $Z$  表示配分函数, 其形式为

$$Z = \text{Tr}[\exp(-\beta H')] = \sum_{\eta} g_{\eta} e^{-\beta E_{\eta}}, \quad (16)$$

这里  $E_{\eta}$  为本征值,  $g_{\eta}$  为简并度. 因此, 密度矩阵可写为

$$\rho(T) = \frac{1}{Z} \sum_{\eta} e^{\beta E_{\eta}} |\Psi_{\eta}\rangle \langle \Psi_{\eta}|, \quad (17)$$

其中  $|\Psi_{\eta}\rangle$  是第  $\eta$  个本征函数. 根据密度矩阵  $\rho(T)$ , 可计算分子摆动态的三体负性熵纠缠度、测量诱导扰动和三体量子失协.

### 3 极性分子摆动态的量子关联

现考虑热平衡条件下三个极性分子摆动态的负性熵纠缠度, 测量诱导扰动和三体量子失协与分子偶极矩、外电场强度、转动常数、偶极-偶极耦合强

度和温度等参数的依赖关系. 以下数值计算中已取偶极-偶极相互作用参数  $\Omega = \Omega_{12} = \Omega_{23} = 8\Omega_{13}$ , 并假定外电场方向与极性分子线性链向量  $\mathbf{r}_{xy}$  相垂直, 即取夹角  $\alpha = \pi/2$ .

通过数值计算, 图3给出了三个极性分子摆动态的三体负性熵纠缠度  $N^{(3)}$  分别与  $\mu\varepsilon/B$  和  $\Omega/B$  的变化关系. 从图3(a)可看出, 不同温度下  $N^{(3)}$  随  $\mu\varepsilon/B$  的增加逐渐减小; 在其他参数值确定的情况下,  $k_B T/B$  越大,  $N^{(3)}$  越小. 图3(b)显示, 随着  $\Omega/B$  的增加,  $N^{(3)}$  呈现先迅速增大而后逐渐减小的趋势; 在其他参数给定时,  $k_B T/B$  越大,  $N^{(3)}$  越小.

图4给出了极性分子摆动态的三体量子失协 TQD 分别随  $\mu\varepsilon/B$  和  $\Omega/B$  的变化曲线. 图4(a)显示, 随着  $\mu\varepsilon/B$  的逐渐增大, TQD 逐渐变小; 图4(b)显示, 随着  $\Omega/B$  的增加, TQD 从零开始先迅速增加到峰值再逐渐减小. 因此, 从图4可知, 在无量纲参数  $\mu\varepsilon/B$  和  $\Omega/B$  给定的情况下,  $k_B T/B$  越大, 相应的 TQD 越小, 这与图3中的三体负性熵纠缠度随  $k_B T/B$  的变化趋势类似.

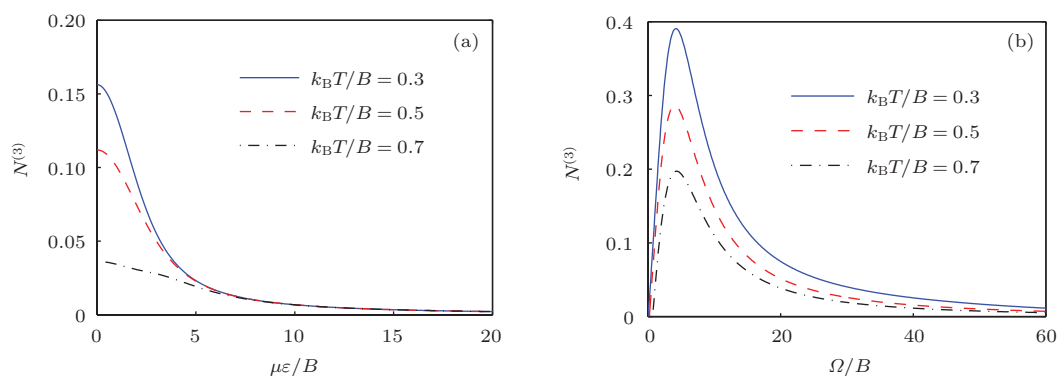


图3 不同温度下三个偶极子摆动态的三体负性熵纠缠度  $N^{(3)}$  随  $\mu\varepsilon/B$  和  $\Omega/B$  的变化 (a) 随  $\mu\varepsilon/B$  的变化, 令  $\Omega/B = 1$ ; (b) 随  $\Omega/B$  的变化, 令  $\mu\varepsilon/B = 1$

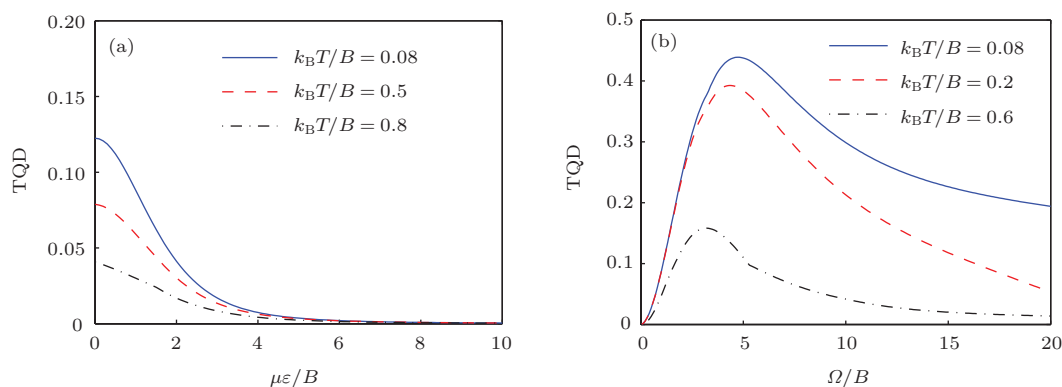


图4 不同温度下三个偶极子摆动态的三体量子失协 TQD 与  $\mu\varepsilon/B$  和  $\Omega/B$  的关系 (a)  $\mu\varepsilon/B$ , 令  $\Omega/B = 1$ ; (b)  $\Omega/B$ , 令  $\mu\varepsilon/B = 1$

图5给出了三个极性分子摆动态的测量诱导干扰MID分别随 $\mu\epsilon/B$ 和 $\Omega/B$ 的变化关系. 从图5(a)可知, MID随 $\mu\epsilon/B$ 的增加逐渐减小; 而当 $k_B T/B = 0.5$ 时, MID值比 $k_B T/B = 0.08$ 和 $k_B T/B = 1$ 时相应的MID值要大. 图5(b)显示, 随 $\Omega/B$ 的增加, MID先从零增加到各自的峰值再慢慢减小; 且在 $\mu\epsilon/B$ 和 $\Omega/B$ 给定的情况下, 随 $k_B T/B$ 的增加, 相应的MID也增大.

图6数值给出了极性分子摆动态的MID随三个无量纲参量 $\mu\epsilon/B$ ,  $\Omega/B$ 和 $k_B T/B$ 中任意两个

变化的等高线图. 从图6(a)可看出,  $\mu\epsilon/B$ 越大, MID 越小; 当 $\mu\epsilon/B$ 较小且 $k_B T/B$ 取适当值时, MID 较大; 特别在 $\mu\epsilon/B$ 接近零且 $k_B T/B \in [0.35, 0.62]$ 时, MID将出现峰值. 从图6(b)可知,  $\Omega/B$ 值适中, 且 $k_B T/B$ 趋于1时, MID可达到极大值;  $\Omega/B$ 很小时, 不管 $k_B T/B$ 值多大, MID都很小; 此外,  $\Omega/B$ 较大且 $k_B T/B$ 较小时, MID也很小. 从图6(c)可知, 当 $\Omega/B \in [6.4, 12]$ 且 $\mu\epsilon/B$ 趋于0时, MID可达到极大值; 当 $\Omega/B$ 足够小, 不论 $\mu\epsilon/B$ 多大, MID都呈现较小值.

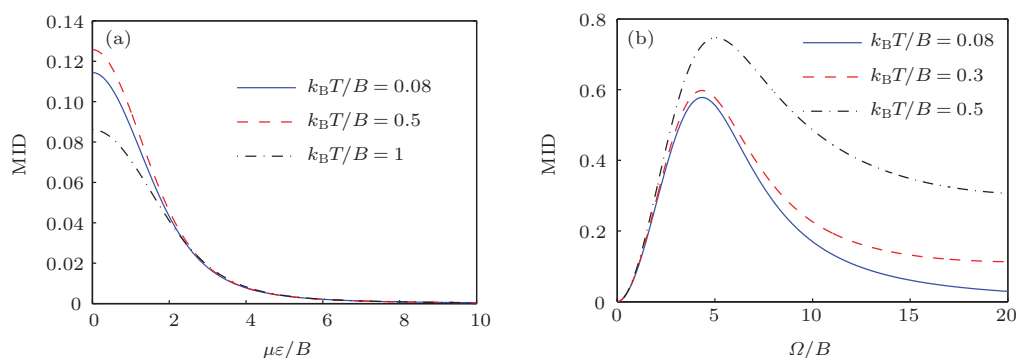


图5 不同温度下三个偶极子摆动态的测量诱导扰动MID与 $\mu\epsilon/B$ 和 $\Omega/B$ 的关系 (a)  $\mu\epsilon/B$ , 令 $\Omega/B = 1$ ; (b)  $\Omega/B$ , 令 $\mu\epsilon/B = 1$

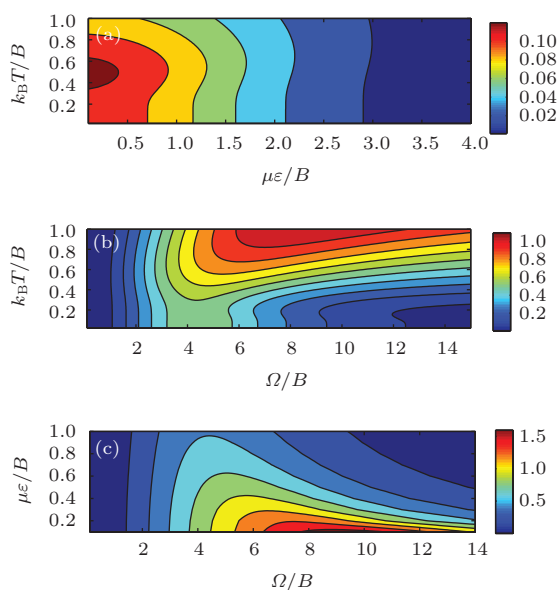


图6 (网刊彩色) 三个偶极子摆动态测量诱导干扰MID的等高线 (a) 与 $\mu\epsilon/B$ 和 $k_B T/B$ 的关系, 已令 $\Omega/B = 1$ ; (b) 与 $\Omega/B$ 和 $k_B T/B$ 的关系, 已令 $\mu\epsilon/B = 1$ ; (c) 与 $\mu\epsilon/B$ 和 $\Omega/B$ 的关系, 已令 $k_B T/B = 0.02$

## 4 结 论

本文研究了热平衡状态下三个极性分子摆动态的三体量子关联特性, 数值分析了三体负性熵

纠缠度、测量诱导扰动和三体量子失协随与电场强度、分子电偶极矩、分子转动常数、偶极-偶极相互作用和温度等有关的三个无量纲变量之间的变化关系. 研究发现, 分子摆动态的三种三体量子关联, 即 $N^{(3)}$ , MID和TQD随 $\mu\epsilon/B$ ,  $\Omega/B$ 或 $k_B T/B$ 的改变呈现类似的演化趋势但又有所不同. 具体体现在:  $\mu\epsilon/B$ 变大, 三量子关联均减小, 这是因为随着电场强度的逐渐增加, 外电场与极性分子的相互作用将占主导地位, 使得极性分子摆动态间的相互作用变弱. 而且 $\Omega/B$ 增加, 三体量子关联先从零开始迅速增加到峰值, 随后逐渐减弱. 然而, 温度的改变对三量子关联的影响有一定的差异:  $N^{(3)}$ 和TQD与温度呈负相关性, 即温度越高, 两者均越小, 其原因在于随着温度的升高, 处于转动基态的分子数布居变少, 而处于振转激发态的分子数布居增多, 更多振转激发态的布居将使得分子摆动态间的相互耦合减弱, 导致分子摆动态的 $N^{(3)}$ 和TQD值变小. 而随 $\mu\epsilon/B$ 变化的MID在温度适中时较强, 在温度偏高或偏低时均较小; 随 $\Omega/B$ 变化的MID则与温度呈正相关性, 温度越高, MID 越强. 因此, 通过调节外电场强度、极性分子间距和温度, 可有

效改变与操控三个极性分子摆动态存在耦合时的三体量子关联。

值得提及的是: 文献[42, 43]仅考虑两个极性分子摆动态的共生纠缠度及提出利用分子摆动态制备两量子比特逻辑门的方法, 而本文着重探讨三个极性分子摆动态的三体量子关联, 涉及三个极性分子间的相互耦合, 不仅讨论了分子摆动态的三体负性熵纠缠度, 还讨论了与三体量子纠缠截然不同的三体量子失协和测量诱导扰动, 这可为下一步直接产生分子摆动态的三比特量子逻辑门以及研究多个极性分子摆动态的量子关联特性奠定基础。此外, 与文献[42]中未涉及电场强度的梯度变化不同, 本文在计算电场强度的过程中引入了电场梯度, 这更接近相关实验方案中提出的对极性分子需能有效寻址的要求[36], 原因在于当电场强度存在适当梯度时, 极性分子阵列中每个分子的电偶极矩与外电场的相互作用能量就不同, 导致每个分子的电偶极跃迁频率也不同, 故可选择合适频率的微波光场来对特定的分子进行寻址, 这种频率寻址能够克服利用微波光场很难对相距很近的极性分子进行空间寻址的缺点。

感谢本实验室魏启博士和新加坡国立大学量子技术中心张成杰博士具有启发性的建议和讨论。

## 参考文献

- [1] Nielsen M A, Chuang I L 2000 *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [2] Amico L, Fazio R, Osterloh A, Vedral V 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 517
- [3] Horodecki R, Horodecki P, Horodecki M, Horodecki K 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 865
- [4] Vidal G, Werner R F 2002 *Phys. Rev. A* **65** 032314
- [5] Bennett C H, DiVincenzo D P, Smolin J A, Wootters W K 1996 *Phys. Rev. A* **54** 3824
- [6] Wootters W K 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 2245
- [7] Hill S, Wootters W K 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 5022
- [8] Vedral V, Plenio M B, Rippin M A, Knight P L 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 2275
- [9] Vedral V 2002 *Rev. Mod. Phys.* **74** 197
- [10] Ollivier H, Zurek W H 2001 *Phys. Rev. Lett.* **88** 017901
- [11] Henderson L, Vedral V 2001 *J. Phys. A* **34** 6899
- [12] Luo S 2008 *Phys. Rev. A* **77** 022301
- [13] Dakic B, Vedral V, Brukner C 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 190502
- [14] Luo S, Fu S 2010 *Phys. Rev. A* **82** 034302
- [15] Modi K, Paterek T, Son W, Vedral V, Williamson M 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 080501
- [16] Giorgi G L, Bellomo B, Galve F, Zambrini R 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 190501
- [17] Buscemi F, Bordone P 2013 *Phys. Rev. A* **87** 042310
- [18] Werlang T, Souza S, Fanchini F F, Boas C J V 2009 *Phys. Rev. A* **80** 024103
- [19] Wang B, Xu Z Y, Chen Z Q, Feng M 2010 *Phys. Rev. A* **81** 014101
- [20] Man Z X, Xia Y J, An N B 2011 *J. Phys. B* **44** 095504
- [21] Yang Y, Wang A M 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 130305 (in Chinese) [杨阳, 王安民 2013 物理学报 **62** 130305]
- [22] Guo H, Liu J M, Zhang C J, Oh C H 2012 *Quantum Inf. Comput.* **12** 0677
- [23] Hu M L, Fan H 2012 *Ann. Phys.* **327** 851
- [24] He Z, Li L W 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 180301 (in Chinese) [贺志, 李龙武 2013 物理学报 **62** 180301]
- [25] Modi K, Brodutch A, Cable H, Paterek T, Vedral V 2012 *Rev. Mod. Phys.* **84** 1655
- [26] Shen C G, Zhang G F, Fan K M, Zhu H J 2014 *Chin. Phys. B* **23** 050310
- [27] Qiu L, Ye B 2014 *Chin. Phys. B* **23** 050304
- [28] Xu J S, Xu X Y, Li C F, Zhang C J, Zou X B, Guo G C 2010 *Nat. Commun.* **1** 7
- [29] Auccaise R, Celeri L C, Soares-Pinto D O, de Azevedo E R, Maziero J, Souza A M, Bonagamba T J, Sarthour R S, Oliveira I S, Serra R M 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 140403
- [30] Rong X, Jin F, Wang Z, Geng J, Ju C, Wang Y, Zhang R, Duan C, Shi M, Du J 2013 *Phys. Rev. B* **88** 054419
- [31] Krems R, Friedrich B, Stwalley W C 2009 *Cold Molecules: Theory, Experiment, Applications* (London: Taylor Francis)
- [32] Carr L D, DeMille D, Krems R V, Ye J 2009 *New J. Phys.* **11** 055049
- [33] Dulieu O, Gabbanini C 2009 *Rep. Prog. Phys.* **72** 086401
- [34] Ulmanis J, Deiglmayr J, Repp M, Wester R, Weidemüller M 2012 *Chem. Rev.* **112** 4890
- [35] Deng L Z, Liang Y, Gu Z X, Hou S Y, Li S Q, Xia Y, Yin J P 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 140401
- [36] DeMille D 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 067901
- [37] Andre A, DeMille D, Doyle J M, Lukin M D, Maxwell S E, Rabl P, Schoelkopf R J, Zoller P 2006 *Nat. Phys.* **2** 636
- [38] Tordrup K, Negretti A, Molmer K 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 040501
- [39] Chen Q, Yang W, Feng M 2012 *Phys. Rev. A* **86** 045801
- [40] Charron E, Milman P, Keller A, Atabek O 2007 *Phys. Rev. A* **75** 033414
- [41] Kuznetsova E, Gacesa M, Yelin S F, Cote R 2010 *Phys. Rev. A* **81** 030301
- [42] Wei Q, Kais S, Friedrich B, Herschbach D 2011 *J. Chem. Phys.* **134** 124107
- [43] Zhu J, Kais S, Wei Q, Herschbach D, Friedrich B 2013 *J. Chem. Phys.* **138** 024104
- [44] Sabin C, Garcia-Alcaine G 2008 *Eur. Phys. J. D* **48** 43

# Tripartite quantum correlations of polar molecules in pendular states<sup>\*</sup>

Li Yan-Jie   Liu Jin-Ming<sup>†</sup>

(State Key Laboratory of Precision Spectroscopy, East China Normal University, Shanghai 200062, China)

( Received 16 April 2014; revised manuscript received 8 June 2014 )

## Abstract

Cold polar molecules have long coherence time and strong dipole-dipole interaction and thus are regarded as a promising quantum carrier for quantum information processing. In this paper, by employing the pendular states of polar molecules as qubit, we investigate the properties of three types of tripartite quantum correlations for three linear polar molecules and numerically analyze the relations of tripartite negativity, measurement-induced disturbance (MID), and tripartite quantum discord (TQD) to three dimensionless reduced variables that relate to external field strength, dipole moment, rotational constant, dipole-dipole coupling, and temperature. The result shows that if the values of the other parameters are fixed, the three quantum correlations decrease with the increase of the field strength, and the three quantum correlations first increase to their respective maxima and then diminish gradually as the dipole-dipole coupling becomes larger. Moreover, as the temperature increases, both tripartite negativity and TQD become small, but with the variation of temperature there exhibit different evolution tendencies for MID between the influence of the electric field strength and that of the dipole-dipole coupling. In addition, the three quantum correlations of polar molecules in pendular state can be manipulated by tuning the external electric field strength, dipole-dipole coupling, and temperature.

**Keywords:** pendular state, tripartite negativity, measurement-induced disturbance, tripartite quantum discord

**PACS:** 03.65.Ud, 03.67.-a, 03.65.Yz

**DOI:** 10.7498/aps.63.200302

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11174081, 11034002, 11134003, 11104075, 60708003) and the National Basic Research Program of China (Grant Nos. 2011CB921602, 2012CB821302).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [jmliu@phy.ecnu.edu.cn](mailto:jmliu@phy.ecnu.edu.cn)