

准一维混合自旋 (1/2, 5/2) Ising-XXZ 模型的量子相干和互信息*

孙振辉¹⁾ 胡丽贞¹⁾²⁾ 徐玉良¹⁾ 孔祥木^{1)†}

1) (鲁东大学物理与光电工程学院, 理论物理研究所, 烟台 264025)

2) (北京师范大学物理学系, 北京 100875)

(2023 年 3 月 12 日收到; 2023 年 5 月 6 日收到修改稿)

准一维混合自旋 (1/2, 5/2) Ising-XXZ 模型可以用来研究一些材料 (如异质三金属化合物 Fe-Mn-Cu) 的磁性, 该研究也有助于这类材料在量子信息等领域的應用. 本文利用转移矩阵法计算了该模型的量子相干和互信息, 讨论了 Ising 作用、温度和磁场对其的影响. 结果表明, 在极低温度下随 Ising 作用的增强量子相干逐渐减小, 而互信息在各向同性系统中存在一个极小值, 在各向异性系统 ($\Delta = 4$) 中存在多个极小值. 进一步研究发现, 量子相干和互信息在量子临界点存在突变, 其一阶导数在该点存在奇异行为. 还研究了有限温度下的量子相干和互信息, 当磁场较弱时, 两者随温度的升高单调减小; 当磁场较强时, 热涨落与磁场的竞争使得两者随温度的升高先增大后减小. 相比于量子互信息, 量子相干存在于更大的磁场和温度范围内, 有利于在实验中对其进行调控.

关键词: 量子相干, 量子互信息, 量子相变, Ising-XXZ 模型, 转移矩阵法

PACS: 03.67.-a, 34.80.Pa, 75.10.Pq, 05.70.Jk

DOI: 10.7498/aps.72.20230381

1 引言

自旋系统中的量子纠缠、相干和互信息是量子信息领域的重要资源, 近 20 年来受到广泛关注^[1,2]. 在量子理论中, 微观粒子具有波粒二象性, 其状态满足态叠加原理可以产生干涉现象, 量子相干可以用来刻画量子态产生干涉的能力或描述量子系统的关联程度^[3]. 早期对量子相干的研究仅仅是定性的, 2014 年 Baumgratz 等^[4] 采用范数理论提出了一种量化相干的方案, 开始了对量子相干的定量研究. 最近, 研究者们又将量子相干应用到量子计量学、量子生物学和量子热力学等前沿课题的研究中^[5-9]. 经典互信息可以通过 Shannon 熵来进行刻画^[10], 能够度量经典系统的关联, 而量子互信息则可用

von Neumann 熵来刻画, 可以度量量子多体系统中两粒子 (子系统) 的总关联^[11,12].

量子相变在凝聚态物理和量子信息科学领域具有十分重要的意义, 促进了这两个学科间的交叉和融合. 经典相变发生在有限温度, 由热涨落引起; 而量子相变则发生在绝对零度, 由 Heisenberg 不确定性原理导致的量子涨落引起. 通过调节哈密顿量中的某一参数, 系统可以发生量子相变. 2002 年, Osterloh 团队^[13] 研究了一类一维磁性系统的量子纠缠, 结果表明纠缠的一阶导数在量子临界点存在奇异行为, 发现了纠缠与量子相变的内在联系, 随后人们对多种系统的纠缠与量子相变的关系进行了研究^[14-17]. 近年来, 人们还研究了自旋系统的量子相干和互信息, 发现也可以用这两个量来表征多体系统的量子相变^[18-29]. 例如秦猛等^[25] 利用重整

* 山东省自然科学基金 (批准号: ZR202111160185) 和国家自然科学基金 (批准号: 11675090, 11905095) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: kongxm668@163.com

化群方法研究了 XY 自旋系统的量子相干, 结果表明其一阶导数在量子相变点存在奇异行为; 周焕强等^[29] 研究了 XY 模型的量子互信息, 发现其可以用来表征系统的量子相变. 此外, 当温度较低时, 它们也可以在多种自旋系统中近似地显示出量子临界点^[30–39]. 例如李彦超等^[35] 研究了 XY 和 XXZ 模型的量子相干, 得到了类似的结论.

对于量子相干和互信息, 已经对一维自旋模型进行了较多的研究, 而对准一维自旋模型的研究却相对较少. 最近 Souza 等^[40] 提出了一个可以精确求解的准一维自旋 $1/2$ Ising- XXZ 模型, 可以定性描述异质三金属配位化合物 $[\text{CuMn}(\text{L})][\text{Fe}(\text{bpb})(\text{CN})_2] \cdot \text{ClO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (缩写: Fe-Mn-Cu) 的磁性^[41]. 随后学者们研究了该模型的基态相图、磁化率以及量子纠缠、保真度等信息量^[40,42,43], 发现该系统磁化率的理论值是实验值的 2 倍, 这促使人们对更符合实际材料的准一维混合自旋 $(1/2, 5/2)$ Ising- XXZ 模型进行研究. Souza 等^[44] 发现混合自旋系统具有更加复杂的基态相图, 磁化强度和量子纠缠等物理量的行为也更为奇特.

转移矩阵法是统计物理学中计算配分函数常用的方法之一^[45], 通常用来研究固体自旋系统^[46–49]. Rojas 团队^[46] 利用此方法研究了 Ising- XXZ 钻石链的热纠缠, 讨论了 Ising 作用、外磁场和各向异性参数对临界温度的影响. 本课题组研究了 Ising- XXZ 钻石链的量子失协和形成纠缠, 发现两者的一阶导数可以近似地显示出量子临界点^[47]. 本文利用转移矩阵法计算准一维混合自旋 $(1/2, 5/2)$ Ising- XXZ 模型的量子相干和互信息, 讨论 Ising 作用、温度和磁场对其的影响, 探讨两者与系统量子相变的关系.

2 模型和方法

异质三金属化合物 Fe-Mn-Cu 的磁性结构^[40] 见图 1, 其主链由 Fe^{3+} 和 Mn^{2+} 交替连接构成, Cu^{2+} 横向附着在 Mn^{2+} 上. Souza 等^[44] 提出的混合自旋 Ising- XXZ 模型可以描述该化合物的磁性, 用 $s = 1/2$ 的经典 Ising 自旋 σ_i ($\sigma_i = \pm 1/2$) 表示 Fe^{3+} , 用 $s = 5/2$ 与 $s = 1/2$ 的量子 Heisenberg 自旋 $\mathbf{S}_{i,1}$ 和 $\mathbf{S}_{i,2}$ ($\mathbf{S}_{i,1} = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$; $\mathbf{S}_{i,2} = \pm 1/2$) 分别表示 Mn^{2+} 和 Cu^{2+} . 设 Fe^{3+} 和 Mn^{2+} 之间是 Ising 作用 J_1 , Mn^{2+} 和 Cu^{2+} 之间是 Heisenberg 作

用 J_2 , 考虑周期性边界条件 $\sigma_{N+1} = \sigma_1$, 该模型的哈密顿量为

$$H = - \sum_{i=1}^N (J_1 S_{i,1}^z (\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z) + J_2 (\mathbf{S}_{i,1}, \mathbf{S}_{i,2})_{\Delta} + h_1 \sigma_i^z + h_2 S_{i,1}^z + h_3 S_{i,2}^z), \quad (1)$$

其中, N 表示经典 Ising 自旋 σ_i 的个数, Δ 是各向异性参数. 此外,

$$(\mathbf{S}_{i,1}, \mathbf{S}_{i,2})_{\Delta} = \Delta (S_{i,1}^x S_{i,2}^x + S_{i,1}^y S_{i,2}^y) + S_{i,1}^z S_{i,2}^z, \\ h_i = g_i \mu_0 h,$$

g_i 是 Landé 因子, μ_0 是 Bohr 磁子, h 是 z 方向上的外加磁场, 为了方便计算令 $g_i \mu_0 = 1$. 作为理论模型, 不失一般性, 对于这类准一维材料可以令 Heisenberg 作用 $J_2 = -1$, Ising 作用 J_1 是可变化的 (取决于具体的材料).

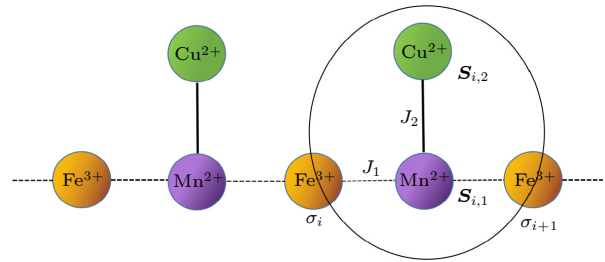


图 1 异质三金属化合物 Fe-Mn-Cu 的磁性结构^[40]. 虚线表示 Fe^{3+} 和 Mn^{2+} 之间的 Ising 作用 J_1 , 实线表示 Mn^{2+} 和 Cu^{2+} 之间的 Heisenberg 作用 J_2 . 实线圆圈包围的自旋是第 i 个自旋块

Fig. 1. Magnetic structure of heterotrimetallic Fe-Mn-Cu coordination polymer^[40]. The dashed lines denote Ising couplings J_1 between Fe^{3+} and Mn^{2+} , while the solid lines denote Heisenberg couplings J_2 between Mn^{2+} and Cu^{2+} . The i -th spin block consists the spins surrounded by the solid-line circle.

该模型的基态相图已由 Souza 等^[44] 给出 (见图 2). 从图 2(a) 可以看出: 当 $\Delta = 1$ 时, 基态相图由饱和顺磁 (SPA) 相、饱和亚铁磁 (SFI) 相、不饱和顺磁 2 (UPA-2) 相和不饱和亚铁磁 2 (UFI-2) 相构成. 由图 2(b) 可知, 当 $\Delta = 4$ 时, 系统出现了 3 个新的相, 分别是不饱和顺磁 1 (UPA-1) 相、不饱和顺磁 0 (UPA-0) 相和不饱和亚铁磁 1 (UFI-1) 相. 图 2(c) 表明 $h = 0$ 时, 基态相图由不饱和顺磁 2 (UPA-2) 相、不饱和顺磁 1 (UPA-1) 相、不饱和顺磁 0 (UPA-0) 相、不饱和亚铁磁 2 (UFI-2) 相和不饱和亚铁磁 1 (UFI-1) 相构成.

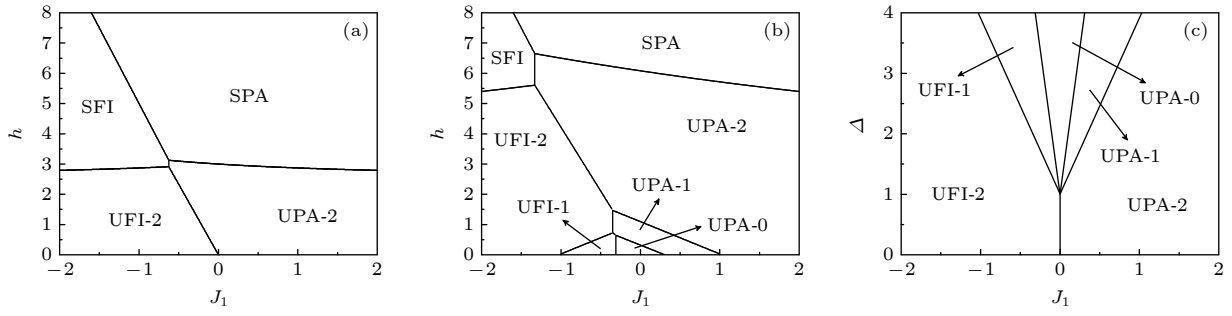


图 2 准一维混合自旋 $(1/2, 5/2)$ Ising-XXZ 系统的基态相图^[44] (a) $\Delta = 1$ 时, 系统存在 4 个相 UPA-2, SPA, UFI-2 和 SFI; (b) $\Delta = 4$ 时, 产生了 3 个新的相 UPA-1, UPA-0 和 UFI-1; (c) $h = 0$ 时, 系统存在 5 个相 UPA-2, UPA-1, UPA-0, UFI-2 和 UFI-1

Fig. 2. Ground-state phase diagrams of quasi-one-dimensional mixed spin- $(1/2, 5/2)$ Ising-XXZ system^[44]: (a) There are four phases UPA-2, SPA, UFI-2 and SFI for $\Delta = 1$; (b) three new phases UPA-1, UPA-0 and UFI-1 emerge for $\Delta = 4$; (c) there are five phases UPA-2, UPA-1, UPA-0, UFI-2 and UFI-1 for $h = 0$.

首先对系统进行等效变换. 将系统分成 N 个自旋块, 第 i 个由两个经典 Ising 自旋 σ_i, σ_{i+1} 以及两个 Heisenberg 自旋 $\mathbf{S}_{i,1}, \mathbf{S}_{i,2}$ 组成, 如图 1 所示, 其哈密顿量可以表示为

$$\begin{aligned} H_i(\sigma_i^z, \sigma_{i+1}^z) &= -J_1 S_{i,1}^z (\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z) - J_2 (\mathbf{S}_{i,1}, \mathbf{S}_{i,2})_\Delta \\ &\quad - \frac{h_1}{2} (\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z) - h_2 S_{i,1}^z - h_3 S_{i,2}^z. \end{aligned} \quad (2)$$

定义该自旋块的密度矩阵:

$$\begin{aligned} \rho(\sigma_i, \sigma_{i+1}) &= \frac{1}{Z_i} e^{-\beta H_i(\sigma_i, \sigma_{i+1})} \\ &= \frac{1}{Z_i} \sum_{p=1}^{12} e^{-\beta \varepsilon_p(\sigma_i, \sigma_{i+1})} |\varphi_p\rangle \langle \varphi_p|, \end{aligned} \quad (3)$$

其中 $\beta = 1/(k_B T)$, T 是热力学温度, Z_i 是 σ_i 和 σ_{i+1} 取一定值时该自旋块的配分函数. (3) 式中 $\varepsilon_p(\sigma_i, \sigma_{i+1})$, $|\varphi_p\rangle$ ($p = 1, 2, \dots, 12$) 分别是 $H_i(\sigma_i, \sigma_{i+1})$ 的本征值和本征态^[44]. 令 Boltzmann 常数 $k_B = 1$, 约化掉 Heisenberg 自旋 $\mathbf{S}_{i,1}$ 和 $\mathbf{S}_{i,2}$, 得到 σ_i 和 σ_{i+1} 取一定值时的 Boltzmann 因子:

$$\begin{aligned} \omega(\sigma_i, \sigma_{i+1}) &= \text{tr}_{\{\mathbf{S}_{i,1}, \mathbf{S}_{i,2}\}} [\rho(\sigma_i, \sigma_{i+1})] \\ &= \frac{1}{Z_i} \sum_{p=1}^{12} e^{-\beta \varepsilon_p(\sigma_i, \sigma_{i+1})}, \end{aligned} \quad (4)$$

然后利用转移矩阵法计算系统的配分函数^[46]:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \omega(\sigma_1, \sigma_2) \cdots \omega(\sigma_N, \sigma_1), \quad (5)$$

进一步可表示为 $Z_N = \text{tr}(\mathbf{W}^N)$, 其中转移矩阵为

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \omega_{++} & \omega_{+-} \\ \omega_{-+} & \omega_{--} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

矩阵元

$$\begin{aligned} \omega_{++} &\equiv \omega\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \quad \omega_{+-} \equiv \omega\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right), \\ \omega_{-+} &\equiv \omega\left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \quad \omega_{--} \equiv \omega\left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right). \end{aligned}$$

对角化 \mathbf{W} , 得到其本征值:

$$\Lambda_{\pm} = \frac{\omega_{++} + \omega_{--} \pm [(\omega_{++} - \omega_{--})^2 + 4\omega_{+-}^2]^{1/2}}{2}. \quad (7)$$

系统的配分函数为

$$Z_N = \Lambda_+^N + \Lambda_-^N = \Lambda_+^N \left[1 + (\Lambda_- / \Lambda_+)^N\right].$$

由 (7) 式可以看出 $\Lambda_+ > \Lambda_-$, 在热力学极限下 $Z_N = \Lambda_+^N$.

为研究系统中最近邻 Heisenberg 自旋 $\mathbf{S}_{i,1}$ 和 $\mathbf{S}_{i,2}$ 之间的量子相干和互信息, 首先需要计算其约化密度矩阵. 除第 i 个自旋块的 Heisenberg 自旋外约化掉系统的其余自旋得到约化密度算符 ρ , 其矩阵元可以表示为

$$\begin{aligned} \rho_{pq} &= \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\sigma\}} \omega(\sigma_1, \sigma_2) \cdots \omega(\sigma_{i-1}, \sigma_i) \\ &\quad \times \rho_{pq}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \omega(\sigma_{i+1}, \sigma_{i+2}) \cdots \omega(\sigma_N, \sigma_1) \\ &= \frac{1}{Z_N} \text{tr}(\mathbf{W}^{i-1} \rho_{pq} \mathbf{W}^{N-i}) = \frac{1}{Z_N} \text{tr}(\rho_{pq} \mathbf{W}^{N-1}), \end{aligned} \quad (8)$$

式中, ρ_{pq} ($p, q = 1, 2, \dots, 12$) 是 ρ 在 $S_{i,1}^z$ 和 $S_{i,2}^z$ 直积表象中的矩阵元:

$$\rho_{pq} = \begin{pmatrix} \rho_{pq}(1, 1) & \rho_{pq}(1, -1) \\ \rho_{pq}(-1, 1) & \rho_{pq}(-1, -1) \end{pmatrix}, \quad (9)$$

由于约化密度矩阵 ρ 的解析表达式过于复杂这里

不再列出. 采用 l_1 范数相干的方法来度量混合自旋系统的量子相干^[4], 其定义为

$$C_{l_1}(\rho) = \sum_{p \neq q} |\rho_{pq}|, \quad (10)$$

其中 \sum 是对非对角矩阵元绝对值求和.

考虑一个包含 A 和 B 子系统的复合系统, 密度矩阵为 ρ_{AB} , 则其量子互信息 \mathcal{I} 定义为^[11,12]

$$\mathcal{I}(\rho_{AB}) = S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{AB}), \quad (11)$$

其中 von Neumann 熵和子系统 $A(B)$ 的约化密度矩阵分别为

$$S(\rho_\alpha) = -\text{tr}(\rho_\alpha \log_2 \rho_\alpha) \quad (\alpha = A, B, AB),$$

$$\rho_{A(B)} = \text{tr}_{B(A)}(\rho_{AB}).$$

后文利用数值计算的方法, 讨论最近邻自旋 $S_{i,1}$ 和 $S_{i,2}$ 之间量子相干 C_{l_1} 和互信息 \mathcal{I} 随 Ising 作用 J_1 , 温度 T 和磁场 h 的变化规律.

3 各向同性系统

首先讨论各向同性系统中, 没有磁场情况下的量子相干 C_{l_1} 和互信息 \mathcal{I} . 根据 (10) 式和 (11) 式,

得到两者及其一阶导数在一定温度下随 Ising 作用 J_1 的变化, 如图 3 所示. 从图 3(a), (b) 发现 C_{l_1} 与 \mathcal{I} 都是 J_1 的偶函数, 随着 J_1 的增强 C_{l_1} 单调减小, 而 \mathcal{I} 在 $T = 0.01$ 和 0.05 时先增大后减小, 在 $T = 0.10$ 和 0.15 时先减小后增大再减小. 当 $T = 0.01$ 时, 两者在 $J_1 = 0$ 时发生突变, C_{l_1} 突然增大到极大值, 而 \mathcal{I} 从极大值减小到极小值, 随着温度的升高, 它们的突变行为逐渐消失. 对比图 2(c) 发现当系统跨越 $J_1 = 0$ 时, 经历了不饱和亚铁磁 2 相到不饱和顺磁 2 相的相变. 图 3(c), (d) 给出了 C_{l_1} 和 \mathcal{I} 的一阶导数随 J_1 的变化, 发现两者的一阶导数存在奇异行为, 随着温度的升高奇异行为消失.

接下来讨论磁场对系统的量子相干 C_{l_1} 和互信息 \mathcal{I} 的影响. 图 4 给出了 $J_1 = -0.5$ 时两者及其一阶导数随磁场的变化, 发现其在温度趋于零时随磁场的增强发生了 2 次突变, 其一阶导数在相应位置存在奇异行为. 以 $T = 0.01$ 为例, 当系统跨越 $h = 2.4$ 时, 其基态发生转变, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 突然增大到一稳定值, 两者的一阶导数在该点存在奇异行为, 结合图 2(a) 发现此时系统从不饱和亚铁磁 2 相转变为不饱和顺

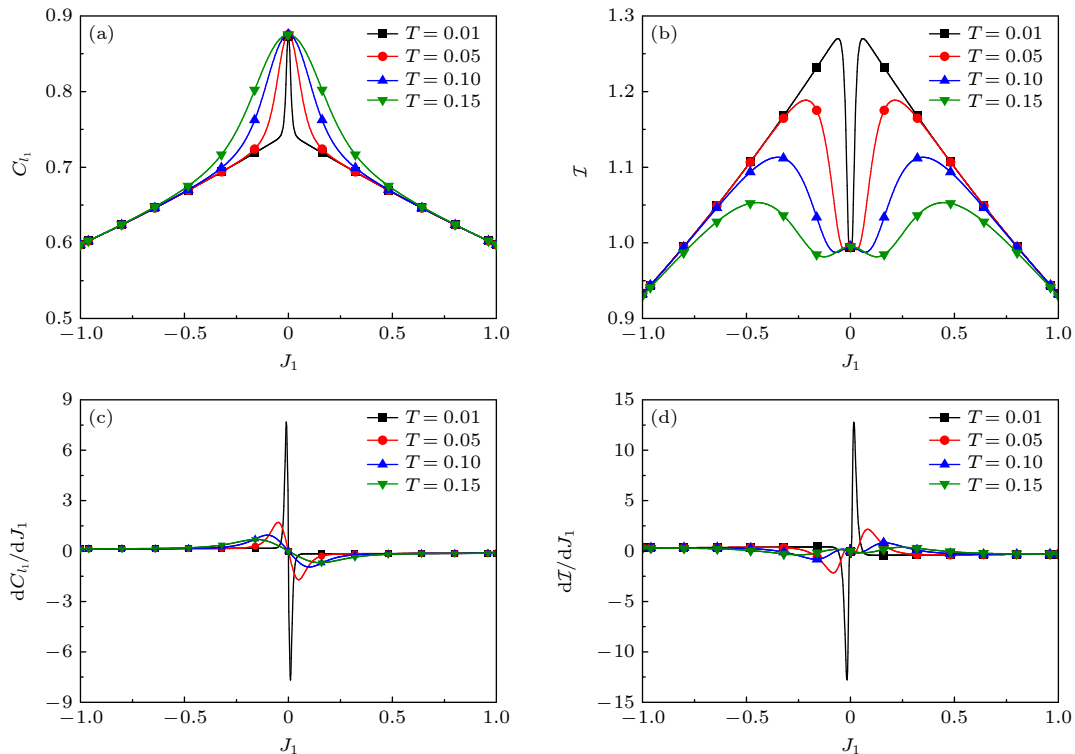


图 3 $\Delta = 1, h = 0$ 时, 量子相干 C_{l_1} 和互信息 \mathcal{I} 及其一阶导数在一定温度下随 J_1 的变化 (a), (b) 极低温情况下, C_{l_1} 在 $J_1 = 0$ 时存在极大值, \mathcal{I} 存在极小值; (c), (d) $T = 0.01$ 时, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 的一阶导数存在奇异行为, 随着温度的升高奇异行为消失

Fig. 3. Quantum coherence C_{l_1} , mutual information \mathcal{I} and their first derivatives as functions of J_1 for various temperatures at $\Delta = 1$ and $h = 0$: (a), (b) At extremely low temperatures, there are a maximum at $J_1 = 0$ for C_{l_1} and a minimum for \mathcal{I} ; (c), (d) when $T = 0.01$, the first derivatives of C_{l_1} and \mathcal{I} exhibit singular behaviors which disappear as the temperature increases.

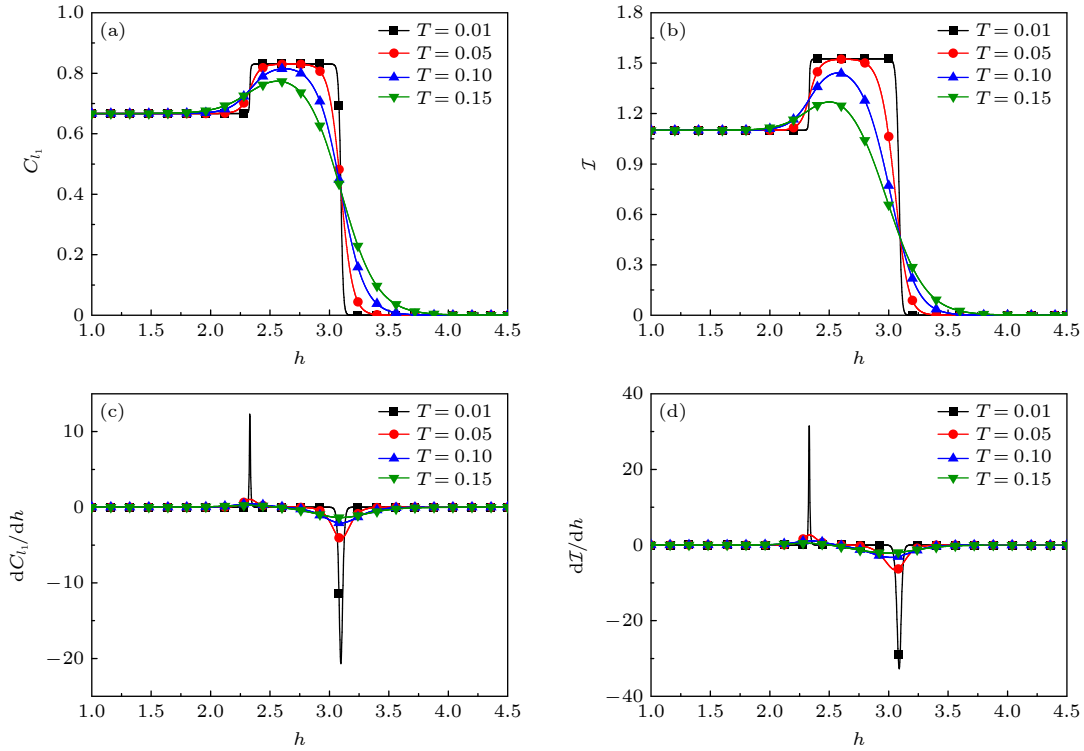


图 4 $\Delta = 1$, $J_1 = -0.5$ 时, 量子相干 C_{l_1} 和互信息 \mathcal{I} 及其一阶导数在一定温度下随磁场的变化 (a), (b) $T = 0.01$ 时, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 在 $h = 2.4$ 和 3.1 时存在不连续跃变; (c), (d) C_{l_1} 和 \mathcal{I} 的一阶导数在量子相变点存在奇异行为

Fig. 4. Quantum coherence C_{l_1} , mutual information \mathcal{I} and their first derivatives with respect to magnetic field for various temperatures at $\Delta = 1$ and $J_1 = -0.5$: (a), (b) Discontinuous jumps of C_{l_1} and \mathcal{I} occur at $h = 2.4$ and 3.1 when $T = 0.01$; (c), (d) first derivatives of C_{l_1} and \mathcal{I} exhibit singular behaviors at the quantum phase transition points.

磁 2 相, 顺磁相中的 C_{l_1} 和 \mathcal{I} 大于亚铁磁相; 当跨越 $h = 3.1$ 后, 强磁场使所有自旋指向磁场的方向, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 突变为 0, 其一阶导数在该点也存在奇异行为, 系统从不饱和顺磁 2 相转变为饱和顺磁相. 随着温度的升高热涨落逐渐增强, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 曲线的斜率减小, 两者的突变行为消失, 其极大值减小.

进一步讨论温度 T 对量子相干 C_{l_1} 和互信息 \mathcal{I} 的影响. 图 5 给出了 $J_1 = -0.5$ 时, 在一定的磁场下, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 随温度的变化以及两者随温度和磁场变化的密度图. 由图 5(a), (b) 发现 $h = 2.7, 2.9, 3.0$ 时, 随着温度的升高热涨落增强, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 单调减小; 当 $3.1 \leq h \leq 5.0$ 时, 两者随温度的升高先增大后减小. 这是由于当温度趋于零时, 在强磁场的影响下所有自旋都指向磁场的方向, 此时系统不存在 C_{l_1} 和 \mathcal{I} ; 而在一定温度范围内受热涨落的影响部分自旋发生翻转, 两者逐渐增大; 随着温度继续升高热涨落占主导地位, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 逐渐减小. 结果表明随着 h 增大, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 的极大值减小, 此时磁场对两者的产生起到了抑制作用.

最后讨论温度和磁场同时变化对量子相干和

互信息的影响. 为了更详细了解两者随温度和磁场的变化, 图 5(c), (d) 给出了它们的密度图. 结果发现在低温情况下, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 随 h 先增大后减小; 而温度较高时, 两者单调减小. 当 $T > 5$ 时, \mathcal{I} 趋近于 0, 而 C_{l_1} 仍然存在有效值, 这说明在实验中可以更好地对其进行调控. 当 $0 < h < 2.4$ 时, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 随 T 先增大后减小, 参考图 2(a) 发现此时系统处于不饱和亚铁磁 2 相; 当 $2.4 < h < 3.1$ 时, 两者随 T 增大逐渐减小, 系统处于不饱和顺磁 2 相; 当 $h > 3.1$ 时, 它们随温度升高从零逐渐增大然后减小, 系统处于饱和顺磁相.

4 各向异性系统

本节讨论系统在各向异性 ($\Delta = 4$) 情况下的量子相干 C_{l_1} 和互信息 \mathcal{I} , 由图 2 发现此时系统的相图更加复杂. 图 6 给出了 $h = 0$ 时, 该系统中 C_{l_1} 和 \mathcal{I} 及其一阶导数随 J_1 的变化, 结果发现 C_{l_1} 逐渐减小, \mathcal{I} 存在 4 个极小值. 在极低温度下, 两者随着 J_1 的增大发生了 4 次突变, 如图 6(a), (b) 所示. 以

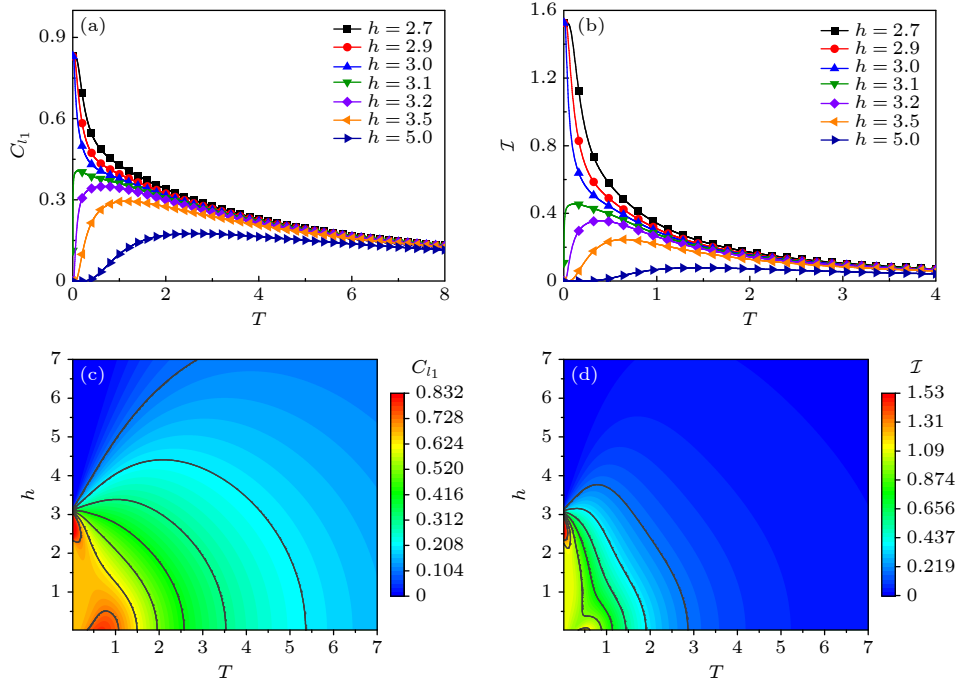


图 5 $\Delta = 1$, $J_1 = -0.5$ 时, 量子相干 C_{l_1} 和互信息 \mathcal{I} 随温度和磁场的变化 (a), (b) 当 $h < 3.1$ 时, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 随 T 的增大逐渐减小, 而当 $h > 3.1$ 时, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 先增大后减小; (c), (d) 当 $T > 5$ 时, C_{l_1} 仍存在有效值, 而 \mathcal{I} 几乎为 0

Fig. 5. Variations of quantum coherence C_{l_1} and mutual information \mathcal{I} with temperature and magnetic field at $\Delta = 1$ and $J_1 = -0.5$: (a), (b) For $h < 3.1$, C_{l_1} and \mathcal{I} gradually decrease with increasing T , while increase firstly and then decrease for $h > 3.1$; (c), (d) C_{l_1} still keeps limited strength while \mathcal{I} approaches to zero in the region of $T > 5$.

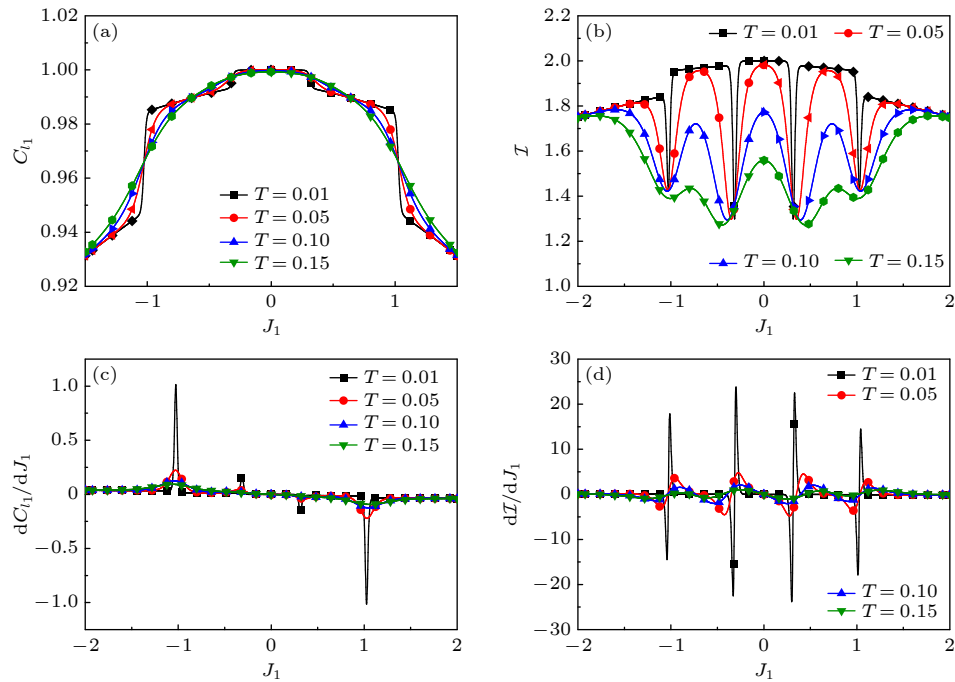


图 6 $\Delta = 4$, $h = 0$ 时, 量子相干 C_{l_1} 和互信息 \mathcal{I} 及其一阶导数随 Ising 作用 J_1 的变化 (a) C_{l_1} 随 J_1 的增大逐渐减小, 当温度趋于 0 时存在突变行为; (b) \mathcal{I} 随 J_1 的增大存在 4 个极小值, 随着温度降低, \mathcal{I} 逐渐增大, 其极小值点逐渐趋于量子相变点; (c), (d) C_{l_1} 和 \mathcal{I} 的一阶导数在量子相变点存在奇异行为

Fig. 6. Ising interaction dependence of quantum coherence C_{l_1} , mutual information \mathcal{I} and their first derivatives for several values of temperature at $\Delta = 4$ and $h = 0$: (a) As J_1 increases, C_{l_1} gradually decreases, and jumps abruptly when T approaches to 0; (b) there are 4 minima for \mathcal{I} as J_1 increases, as T nears to 0, \mathcal{I} gradually increases, and its minimum points gradually approach to the phase transition points; (c), (d) the first derivatives of C_{l_1} and \mathcal{I} exhibit singular behaviors at quantum phase transition points.

$T = 0.01$ 为例, 当系统分别跨越 $J_1 = -1.03, -0.31, 0.31, 1.03$ 时, C_{l_1} 发生突变, 而 \mathcal{I} 达到极小值. 参考图 2(b) 发现系统依次经历了不饱和亚铁磁 2 相 \rightarrow 不饱和亚铁磁 1 相 \rightarrow 不饱和顺磁 0 相 \rightarrow 不饱和顺磁 1 相 \rightarrow 不饱和顺磁 2 相. 随着温度升高, C_{l_1} 的突变行为消失, 而 \mathcal{I} 的极小值逐渐偏离量子相变点. 对比图 3 发现, 各向异性有利于增强系统的 C_{l_1} 和 \mathcal{I} . 图 6(c), (d) 给出了量子相干和互信息的一阶导数随 J_1 的变化, 从图 6 看出 $T = 0.01$ 时, 两者的一阶导数在量子相变点存在奇异行为, 随着温度的升高奇异行为消失.

接下来讨论磁场 h 对量子相干 C_{l_1} 和互信息 \mathcal{I} 的影响. 图 7 给出了 $J_1 = -0.5$ 时, 两者及其一阶导数随 h 的变化. 从图 7(a), (b) 发现温度趋于 0 时, 两者随着磁场的增强发生了 3 次突变. 以 $T = 0.01$ 为例, 当 $h = 0.6$ 时, C_{l_1} 从极大值 0.99 减小为 0.963

(图 7(a) 内插图), \mathcal{I} 达到极小值 1.5. 结合图 2(b) 发现, 当系统跨越该点时, 经历了不饱和亚铁磁 1 相到不饱和亚铁磁 2 相的相变. 当 $h = 2.2$ 时, C_{l_1} 由 0.963 增大到 0.99, \mathcal{I} 从 1.7 增大到 1.9. 当系统穿过该点时, 经历了不饱和亚铁磁 2 相到不饱和顺磁 2 相的相变. 当 $h = 6.3$ 时, 强磁场使所有自旋都指向磁场的方向, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 突变为 0. 当系统跨越该点时, 经历了不饱和顺磁 2 相到饱和顺磁相的相变. 这表明在极低温度下它们的突变行为可以近似地显示出系统的量子相变点, 随着温度的升高两者的突变行为消失. 图 7(c), (d) 给出了一定温度下量子相干和互信息的一阶导数随磁场的变化, 发现两者的一阶导数在量子相变点存在奇异行为.

进一步讨论温度 T 对量子相干 C_{l_1} 和互信息 \mathcal{I} 的影响. 图 8 给出了在一定的磁场下, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 随温度的变化以及两者随温度和磁场变化的密度图.

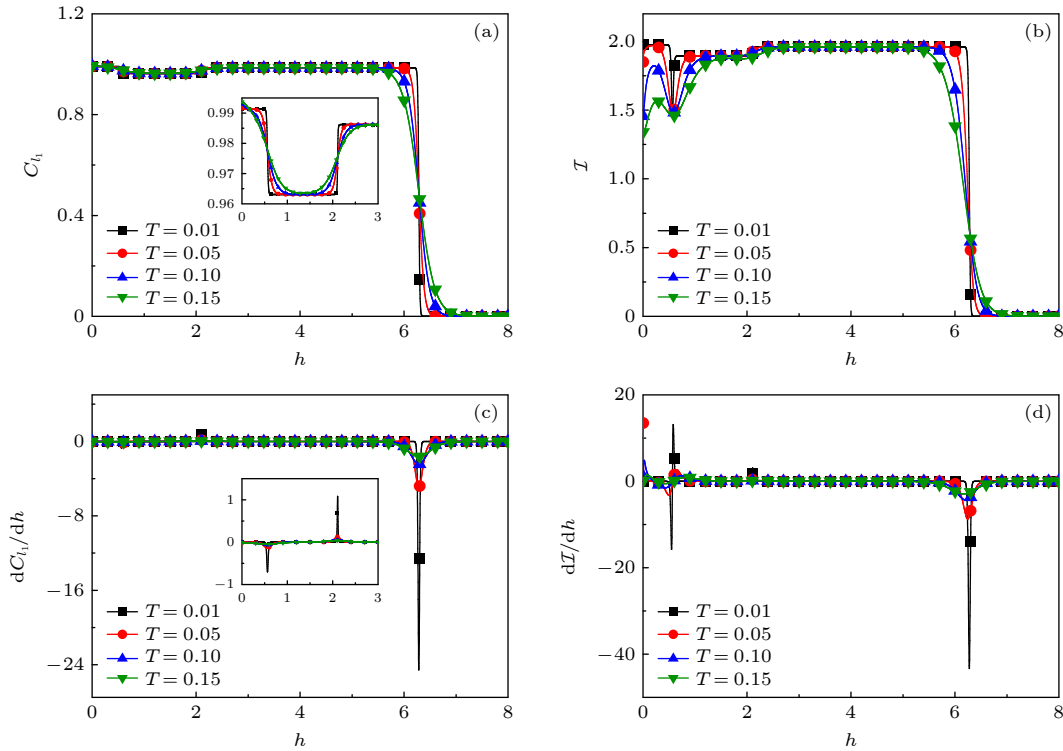


图 7 $\Delta = 4, J_1 = -0.5$ 时, 量子相干 C_{l_1} 和互信息 \mathcal{I} 及其一阶导数随磁场的变化 (a) 当 $T = 0.01$ 时 C_{l_1} 随 h 的增大发生 3 次突变, 随着温度升高, 突变行为消失 (插图给出了 $0 \leq h \leq 3$ 时 C_{l_1} 随 h 的变化); (b) 当 $T = 0.01$ 时 \mathcal{I} 随 h 的增大发生 3 次突变, 在 $h = 0.6$ 时达到极小值, 随着温度升高, 突变行为消失, 极小值逐渐减小; (c), (d) C_{l_1} 和 \mathcal{I} 的一阶导数在量子相变点存在奇异行为 (图 (c) 插图给出了 $0 \leq h \leq 3$ 时 C_{l_1} 的一阶导数随 h 的变化)

Fig. 7. Quantum coherence C_{l_1} , mutual information \mathcal{I} and their first derivatives with respect to magnetic field at $\Delta = 4$ and $J_1 = -0.5$: (a) For $T = 0.01$, C_{l_1} and \mathcal{I} jump abruptly 3 times as h increases while changing smoothly with increasing T (Inset: the variations of C_{l_1} with h for $0 \leq h \leq 3$); (b) \mathcal{I} jumps abruptly 3 times as h increases, and reaches the minimum at $h = 0.6$ for $T = 0.01$, as T increases, the jump behaviors disappear, and the minimum gradually decreases; (c), (d) the first derivatives of C_{l_1} and \mathcal{I} exhibit singular behaviors at quantum phase transition points (Inset in panel (c) shows the behavior of the first derivative of C_{l_1} versus h for $0 \leq h \leq 3$).

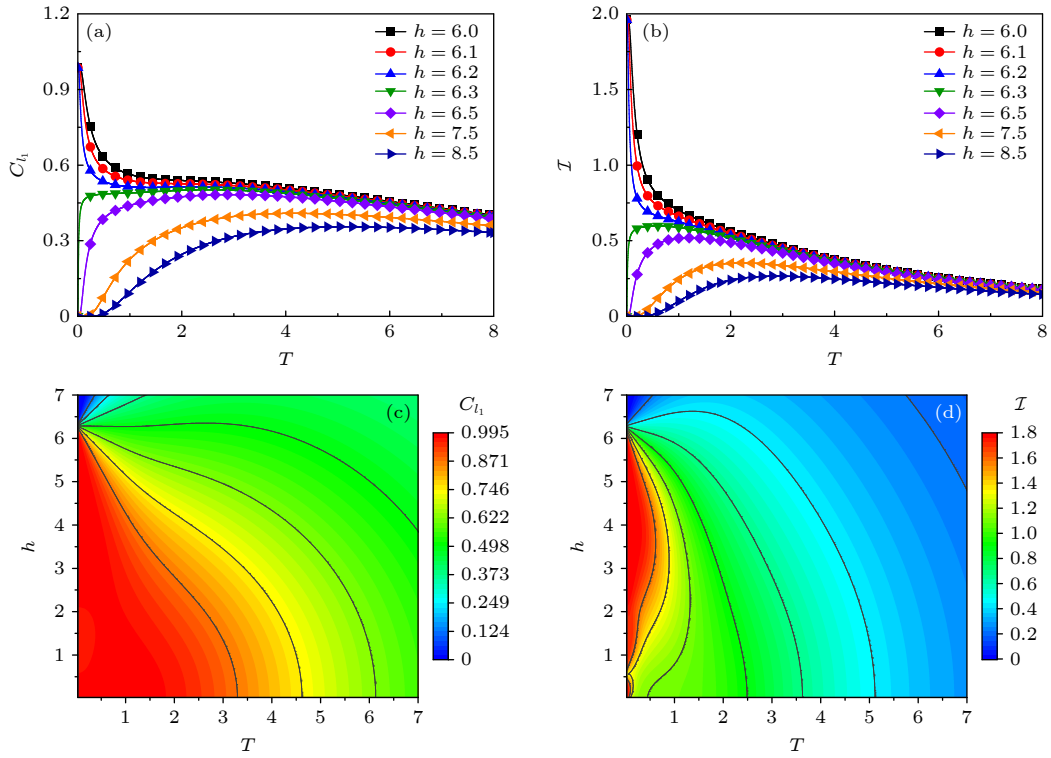


图 8 $\Delta = 4$, $J_1 = -0.5$, 量子相干 C_{l_1} 和互信息 \mathcal{I} 随温度和磁场的变化 (a), (b) 当 $h \geq 6.3$ 时, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 随温度的升高先增大后减小; (c), (d) 当 $T > 3$ 时, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 随磁场的增强逐渐减小

Fig. 8. Variations of quantum coherence C_{l_1} and mutual information \mathcal{I} with T and h for $\Delta = 4$ and $J_1 = -0.5$: (a), (b) C_{l_1} and \mathcal{I} increase firstly and then decrease with increasing T in the region of $h \geq 6.3$; (c), (d) with the increase of h , C_{l_1} and \mathcal{I} gradually decrease for $T > 3$.

从图 8(a), (b) 中发现磁场 $h = 6.0, 6.1, 6.2$ 时, 随着温度的升高热涨落占主导地位, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 逐渐减小. 当 $h = 6.3, 6.5, 7.5, 8.5$ 时, 它们随温度的升高先增大后减小. 这是由于当温度趋于零时, 所有自旋在较强磁场下指向同一方向, 系统处于饱和顺磁相. 而在低温情况下, 热涨落将系统激发到相干态^[44], C_{l_1} 和 \mathcal{I} 逐渐增大; 随着温度继续升高, 热涨落占主导地位, 两者逐渐减小.

最后讨论温度和磁场同时变化对 C_{l_1} 和 \mathcal{I} 的影响, 如图 8(c), (d) 所示. 结果表明, 当 $T > 3$ 时, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 随磁场的增强逐渐减小. 当 $0 < h < 6.3$ 时, C_{l_1} 和 \mathcal{I} 随温度的升高逐渐减小; 当 $h > 6.3$ 时, 两者随温度的升高先增大后减小, 参考图 2(b) 发现此时系统处于饱和顺磁相.

5 总 结

利用转移矩阵法研究了准一维混合自旋 $(1/2, 5/2)$ Ising-XXZ 模型的量子相干和互信息, 讨论了它们随 Ising 作用、温度和磁场的变化. 结果

发现, 在极低温下随 Ising 作用的增强量子相干逐渐减小, 而互信息在各向同性系统中存在一个极小值, 在各向异性系统 ($\Delta = 4$) 中存在多个极小值. 进一步研究发现, 随着磁场的增强量子相干和互信息在相变点存在突变, 其一阶导数在该点存在奇异行为. 在较弱磁场下, 两者随温度的升高单调减小, 而在较强磁场下热涨落与磁场竞争, 它们表现出先增大后减小的行为. 并且各向异性系统中的量子相干和互信息要大于各向同性系统. 相比于量子互信息, 量子相干存在于更大的磁场和温度范围内, 有利于在实验中对其进行调控.

参考文献

- [1] Amico L, Fazio R, Osterloh A, Vedral V 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 517
- [2] Nielsen M A, Chuang I L 2000 *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge: Cambridge University Press) pp1-665
- [3] Cui X D, Du M M, Tong D M 2020 *Phys. Rev. A* **102** 032419
- [4] Baumgratz T, Cramer M, Plenio M B 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 140401
- [5] Hu M L, Hu X Y, Wang J C, Peng Y, Zhang Y R, Fan H

- 2018 *Phys. Rep.* **762** 1
- [6] Lloyd S 2011 *J. Phys. Conf. Ser.* **302** 012037
- [7] Lambert N, Chen Y N, Cheng Y C, Li C M, Chen G Y, Nori F 2013 *Nat. Phys.* **9** 10
- [8] Lostaglio M, Jennings D, Rudolph T 2015 *Nat. Commun.* **6** 6383
- [9] Aberg J 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 150402
- [10] Shannon C E 1948 *Bell Syst. Tech. J.* **27** 379
- [11] Henderson L, Vedral V 2001 *J. Phys. A: Math. Gen.* **34** 6899
- [12] Ollivier H, Zurek W H 2001 *Phys. Rev. Lett.* **88** 017901
- [13] Osterloh A, Amico L, Falci G, Fazio R 2002 *Nature* **416** 608
- [14] Ma F W, Liu S X, Kong X M 2011 *Phys. Rev. A* **84** 042302
- [15] Gu S J, Lin H Q, Li Y Q 2003 *Phys. Rev. A* **68** 042330
- [16] Osborne T J, Nielsen M A 2002 *Phys. Rev. A* **66** 032110
- [17] Glaser U, Büttner H, Fehske H 2003 *Phys. Rev. A* **68** 032318
- [18] Karpat G, Çakmak B, Fanchini F F 2014 *Phys. Rev. B* **90** 104431
- [19] Sun W Y, Wang D, Ye L 2017 *Physica B* **524** 27
- [20] Lei S G, Tong P Q 2016 *Quantum Inf. Process.* **15** 1811
- [21] Malvezzi A L, Karpat G, Çakmak B, Fanchini F F, Debarba T, Vianna R O 2016 *Phys. Rev. B* **93** 184428
- [22] Hu M L, Gao Y Y, Fan H 2020 *Phys. Rev. A* **101** 032305
- [23] Valdez M A, Jaschke D, Vargas D L, Carr L D 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 225301
- [24] Yi T C, Ding Y R, Ren J, Wang Y M, You W L 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 140303 (in Chinese) [伊天成, 丁悦然, 任杰, 王艺敏, 尤文龙 2018 物理学报 **67** 140303]
- [25] Qin M, Ren Z Z, Zhang X 2018 *Phys. Rev. A* **98** 012303
- [26] Thakur P, Durganandini P 2020 *Phys. Rev. B* **102** 064409
- [27] Mao R, Dai Y W, Cho S Y, Zhou H Q 2021 *Phys. Rev. B* **103** 014446
- [28] Li C X, Yang S, Xu J B, Lin H Q 2023 *Phys. Rev. B* **107** 085130
- [29] Dai Y W, Chen X H, Cho S Y, Zhou H Q 2021 *Phys. Rev. E* **104** 044137
- [30] Dong J J, Huang D, Yang Y f 2021 *Phys. Rev. B* **104** L081115
- [31] Li Y C, Lin H Q 2016 *Sci. Rep.* **6** 26365
- [32] Sha Y T, Wang Y, Sun Z H, Hou X W 2018 *Ann. Phys.* **392** 229
- [33] Yin S Y, Song J, Liu S T, Song G L 2021 *Phys. Rev. A* **389** 127089
- [34] Chen J J, Cui J, Zhang Y R, Fan H 2016 *Phys. Rev. A* **94** 022112
- [35] Li Y C, Zhang J, Lin H Q 2020 *Phys. Rev. B* **101** 115142
- [36] Iaconis J, Inglis S, Kallin A B, Melko R G 2013 *Phys. Rev. B* **87** 195134
- [37] Wilms J, Vidal J, Verstraete F, Dusuel S 2012 *J. Stat. Mech. Theory Exp.* **2012** P01023
- [38] Walsh C, Semon P, Poulin D, Sordi G, Tremblay A S 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 067203
- [39] Wilms J, Troyer M, Verstraete F 2011 *J. Stat. Mech. Theory Exp.* **2011** P10011
- [40] Souza F, Lyra M L, Strečka J, Pereira M S S 2019 *J. Magn. Magn. Mater.* **471** 423
- [41] Wang H, Zhang L F, Ni Z H, Zhong W F, Tian L J, Jiang J 2010 *Cryst. Growth Des.* **10** 4231
- [42] Zad H A, Rojas M 2021 *Physica E* **126** 114455
- [43] Zheng Y D, Mao Z, Zhou B 2019 *Chin. Phys. B* **28** 120307
- [44] Souza F, Veríssimo L M, Strečka J, Lyra M L, Pereira M S S 2020 *Phys. Rev. B* **102** 064414
- [45] Baxter R J 2016 *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (San Diego: Academic Press) pp1—482
- [46] Rojas O, Rojas M, Ananikian N S, de Souza S M 2012 *Phys. Rev. A* **86** 042330
- [47] Gao K, Xu Y L, Kong X M, Liu Z Q 2015 *Physica A* **429** 10
- [48] Carvalho I M, Rojas O, de Souza S M, Rojas M 2019 *Quantum Inf. Process.* **18** 134
- [49] Torrico J, Rojas M, de Souza S M, Rojas O, Ananikian N S 2014 *Europhys. Lett.* **108** 50007

Quantum coherence and mutual information of mixed spin-(1/2, 5/2) Ising-XXZ model on quasi-one-dimensional lattices*

Sun Zhen-Hui¹⁾ Hu Li-Zhen¹⁾²⁾ Xu Yu-Liang¹⁾ Kong Xiang-Mu^{1)†}

1) (*School of Physics and Optoelectronic Engineering, Institute of Theoretical Physics, Ludong University, Yantai 264025, China*)

2) (*Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China*)

(Received 12 March 2023; revised manuscript received 6 May 2023)

Abstract

The mixed spin-(1/2, 5/2) Ising-XXZ model on quasi-one-dimensional lattices can be used to study the properties of some materials (such as heterotrimetallic Fe-Mn-Cu coordination polymer), and the study on this model is beneficial to the practical applications of such materials in the field of quantum information. The quantum coherence and mutual information are calculated by the transfer matrix method, and the effects of Ising interaction, temperature and magnetic field on them are discussed. The results show that the quantum coherence decreases gradually with the increase of Ising interaction at extremely low temperatures, while there is one minimum value of mutual information in an isotropic system and there appear four minimum values in an anisotropic ($\Delta = 4$) system. Furthermore, quantum coherence and mutual information jump abruptly at quantum phase transition points where the first derivatives of them exhibit singular behaviors. The quantum coherence and mutual information at finite temperatures are also studied. As the temperature increases, they decrease monotonically in a weak magnetic field, but they first increase and then decrease in a higher magnetic field, which is caused by the competition between thermal fluctuation and magnetic field. Compared with quantum mutual information, quantum coherence exists over a wider range of magnetic field and temperature, which can be easily manipulated experimentally.

Keywords: quantum coherence, quantum mutual information, quantum phase transition, Ising-XXZ model, transfer matrix method

PACS: 03.67.-a, 34.80.Pa, 75.10.Pq, 05.70.Jk

DOI: 10.7498/aps.72.20230381

* Project supported by the Natural Science Foundation of Shandong Province, China (Grant No. ZR202111160185) and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11675090, 11905095).

† Corresponding author. E-mail: kongxm668@163.com



准一维混合自旋(1/2, 5/2) Ising-XXZ模型的量子相干和互信息

孙振辉 胡丽贞 徐玉良 孔祥木

Quantum coherence and mutual information of mixed spin-(1/2, 5/2) Ising-XXZ model on quasi-one-dimensional lattices

Sun Zhen-Hui Hu Li-Zhen Xu Yu-Liang Kong Xiang-Mu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 130301 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230381

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230381>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

量子相干

Quantum coherence

物理学报. 2019, 68(3): 030304 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181779>

一维扩展量子罗盘模型的拓扑序和量子相变

Topological orders and quantum phase transitions in a one-dimensional extended quantum compass model

物理学报. 2018, 67(19): 190301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180855>

自旋-1/2量子罗盘链的量子相与相变

Quantum phases and transitions of spin-1/2 quantum compass chain

物理学报. 2022, 71(3): 030302 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211433>

具有Dzyaloshinskii-Moriya相互作用的XY模型的量子相干性

Quantum coherence of XY model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction

物理学报. 2018, 67(14): 140303 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172755>

含有Dzyaloshinskii-Moriya相互作用的自旋1键交替海森伯模型的量子相变和拓扑序标度

Quantum phase transition and topological order scaling in spin-1 bond-alternating Heisenberg model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction

物理学报. 2020, 69(9): 090302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191773>

Jaynes-Cummings晶格模型和Rabi晶格模型的量子相变

The quantum phase transition in the Jaynes-Cummings lattice model and the Rabi lattice model

物理学报. 2021, 70(10): 100201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202066>