

{Cu₃} 单分子磁体在热平衡和磁场作用下的三体纠缠

郑一丹 周斌

Tripartite entanglement of {Cu₃} single molecular magnet with magnetic field in thermal equilibrium

Zheng Yi-Dan Zhou Bin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 120301 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.120301

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.120301>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I12>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

等距离耦合腔系统中的非局域性

[Dynamics of nonlocality in an equidistance cavity coupled by fibers](#)

物理学报.2016, 65(10): 100301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.100301>

基于轨道角动量的多自由度 W 态纠缠系统

[Entangled W state of multi degree of freedom system based on orbital angular momentum](#)

物理学报.2015, 64(14): 140301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.140301>

Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用和内禀消相干对基于两量子比特 Heisenberg 自旋系统的量子密集编码的影响

[Effects of Dzyaloshinskii-Moriya interaction and intrinsic decoherence on quantum dense coding via a two-qubit Heisenberg spin system](#)

物理学报.2015, 64(8): 080302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.080302>

非均匀磁场和杂质磁场对自旋 1 系统量子关联的影响

[Effects of inhomogeneous magnetic field and magnetic impurity on the quantum correlation of spin-1 system](#)

物理学报.2015, 64(3): 030301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.030301>

共同环境中三原子间纠缠演化特性研究

[Entanglement evolution of three interacting twolevel atoms within a common environment](#)

物理学报.2015, 64(1): 010302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.010302>

{Cu₃} 单分子磁体在热平衡和磁场作用下的 三体纠缠*

郑一丹 周斌†

(湖北大学物理与电子科学学院, 武汉 430062)

(2016年3月21日收到; 2016年4月14日收到修改稿)

本文研究了 $\text{Na}_9[\text{Cu}_3\text{Na}_3(\text{H}_2\text{O})_9(\alpha\text{-AsW}_9\text{O}_{33})_2]\cdot 26\text{H}_2\text{O}$ (简记为 {Cu₃}) 单分子磁体在热平衡和外加磁场作用下的三体纠缠性质, 利用等效自旋模型和实验拟合参数, 数值计算了 {Cu₃} 型三角自旋环中三体负性纠缠度 (tripartite negativity). 分别考虑沿垂直于三角自旋环方向的磁场、平行于三角自旋环方向的磁场, 以及倾斜磁场的情形. 结果表明, 磁场的方向、大小以及温度对系统三体负性纠缠度有着重要影响. 文中给出了在不同磁场方向下, 临界温度随磁场强度的变化图, 由此可以得到三体纠缠存在的参数区域. 同时发现在特定的参数区域, 该系统存在纠缠恢复现象. 因此适当调节温度、磁场强度大小和磁场方向可以有效调控 {Cu₃} 型三角自旋环中的三体纠缠性质.

关键词: 热纠缠, 三体负性纠缠度, 单分子磁体

PACS: 03.65.Ud

DOI: 10.7498/aps.65.120301

1 引言

量子纠缠是量子系统区别于经典系统的重要特征之一. 近年来, 量子纠缠作为量子信息技术的一种重要资源受到了广泛的关注^[1-7]. 考虑到热涨落对系统量子态的影响, 各种自旋模型中的热纠缠性质引起了人们的研究兴趣, 特别是对自旋 1/2 的海森伯自旋链模型中的两量子比特及多量子比特中的配对纠缠进行了大量的研究^[8-13]. 人们对多体纠缠以及高自旋纠缠等问题也展开了相关研究^[14-17]. Sabín 和 García-Alcaine^[18] 将三量子比特的纠缠状况分为三类, 即完全分离态、双可分离态以及完全三体纠缠态. 他们提出三量子比特的完全三体纠缠态的度量至少满足以下三个条件: 1) 任何完全分离态和双可分离态的度量值必须为 0, 任何完全三体纠缠态的度量值必须为非 0; 2) 度量值在局域幺正变换下不变; 3) 度量值在

局域操作和经典通信下不增加. 对于三体纠缠的度量方法也存在很多讨论^[19-23], 如 Coffman 等^[19] 提出了一种称为 3-tangle 的纠缠度量方法, 但后来发现 3-tangle 并不能满足第一个条件^[18]. Sabín 和 García-Alcaine^[18] 根据上述三量子比特的完全三体纠缠的度量条件提出了三体负性纠缠度的度量方法. 之后, 人们利用此度量方法对量子信息技术的有关问题进行了大量的研究^[24-31]. 例如, Ma 等^[24] 将三体负性纠缠度作为纠缠度量研究了具有 Dzialoshinski-Moriya (简记为 DM) 相互作用的自旋星模型的热纠缠性质; 在文献^[28] 中人们利用三体负性纠缠度研究了极性分子摆动态的三体量子关联问题.

基于量子计算的物理实现, 能够找到具体材料实现纠缠态的操纵和调控是十分重要的. 纳米尺度的单分子磁体在低温下存在着奇特的量子效应, 如磁化强度量子隧穿^[32,33], Berry 相干涉^[34], 量子自旋相干^[35] 等, 因此纳米尺度的单分子磁体已成为

* 国家自然科学基金 (批准号: 11274102)、教育部新世纪优秀人才支持计划 (批准号: NCET-11-0960) 和高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20134208110001) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: binzhou@hubu.edu.cn

人们研究的热点材料, 其中 $\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体是这类材料的典型代表之一^[36-38]. Islam 等^[39]用第一性原理研究了 $\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体的自旋电子耦合, 结果表明, 即使没有自旋轨道的相互作用, 相反手性的两个基态对与电场依然耦合. 另外, $\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体因存在自旋电子耦合成为实现具有容错的几何相位门的备选材料之一^[40], 这是实现量子计算的关键. 除此之外, $\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体的热纠缠也引起人们的兴趣^[41,42]. 文献^[41]基于实验拟合参数研究了 $\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体在磁场中的任意两个量子比特的配对纠缠. 之后, 文献^[42]还考虑了基态下 $\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体在磁场中的全局纠缠. 然而, 我们注意到此前未有研究考虑 $\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体在热平衡和磁场作用下的三体纠缠. 因此, 本文重点研究磁场大小、方向以及温度的变化对 $\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体中三体纠缠的影响.

2 理论模型和三体负性纠缠度

2.1 理论模型

$\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体是三明治状结构, 具有 D_{3h} 对称性, 每个单胞是两个由 Cu^{2+} 离子组成的三角环构成. 由于每一个 Cu^{2+} 离子之间的超交换路径是相同的, 因此 $\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体可看作是一个 $S = 1/2$ 的三角自旋环, 每个 Cu^{2+} 离子即为一个量子比特^[38]. $\{\text{Cu}_3\}$ 型三角自旋环在原子体系中的结构为等腰三角形, 相邻 Cu^{2+} 离子之间距离分别为 $d_{12} = 4.689 \text{ \AA}$ 和 $d_{23} = d_{13} = 4.696 \text{ \AA}$. 考虑外加磁场的 $\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体系统, 其等效自旋哈密顿量可以写成以下形式^[38]:

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

其中, J 为交换作用参数, 由静态磁化率实验结果显示 Cu^{2+} 离子之间是反铁磁耦合的^[36]; \mathbf{S} 为自旋算符; \mathbf{D} 为 DM 相互作用张量, 在自旋环内遵循近似的 C_3 对称性^[38]: $(D_{31}^x, D_{31}^y) = \Re\left(\frac{4\pi}{3}\right)(D_{12}^x, D_{12}^y)$ 和 $(D_{23}^x, D_{23}^y) = \Re\left(\frac{2\pi}{3}\right)(D_{12}^x, D_{12}^y)$, 其中 $\Re(\varphi)$ 指绕垂直自旋环面

轴(即 z 轴)旋转 φ 角; μ_B 为玻尔磁子; $\tilde{\mathbf{g}}_l$ 为朗德 g 因子; \mathbf{H} 为磁场矢量. 文献^[36]根据 $\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体的磁化强度和自旋电子共振所得到的实验结果, 结合 DM 相互作用张量的对称性分析, 拟合出了关于其自旋哈密顿量的实验数据: $J_{12}^{x,y} = 4.50 \text{ K}$, $J_{12}^z = 4.56 \text{ K}$, $J_{23}^{x,y} = J_{31}^{x,y} = 4.03 \text{ K}$, $J_{23}^z = J_{31}^z = 4.06 \text{ K}$, $D_{ll+1}^z = 0.53 \text{ K}$, $D_{12}^{x,y} = 0.53 \text{ K}$, $g_{11}^{x,y} = 2.25 \text{ K}$, $g_{22}^{x,y} = 2.10 \text{ K}$, $g_{33}^{x,y} = 2.40 \text{ K}$, $g_{ll}^z = 2.06 \text{ K}$. 本文将利用这些实验拟合参数进行数值计算.

2.2 三体负性纠缠度

三体负性纠缠度 (tripartite negativity, 后记为 N) 是 Sabín 和 García-Alcaine^[18] 根据三量子比特的完全三体纠缠态度量所需满足的三个条件提出的一种有效度量方法, 其定义为:

$$N_{ABC}(\rho) = (N_{A-BC} N_{B-AC} N_{C-AB})^{\frac{1}{3}}, \quad (2)$$

式中, N_{A-BC} , N_{B-AC} , N_{C-AB} 是两体负性纠缠度, 定义^[43]:

$$N_{I-JK} = -2 \sum_i \sigma_i(\rho^{TI}), \quad (3)$$

其中, $\sigma_i(\rho^{TI})$ 是矩阵 ρ^{TI} 的负本征值, 而矩阵 ρ^{TI} 是三粒子密度矩阵 ρ 对第 I 部分的部分转置密度矩阵, 其定义为 $\langle k_I, j_{JK} | \rho^{TI} | i_I, l_{JK} \rangle = \langle i_I, j_{JK} | \rho | k_I, l_{JK} \rangle$, I, J, K 分别代表三个子系统, $I = A, B, C$ 时, 相对应的 $JK = BC, AC, AB$. 如果 $N > 0$, 则系统处于完全三体纠缠态; 如果 $N = 0$, 则系统处于非完全三体纠缠态. 基于哈密顿量(1)的8个本征值 E_n 和本征矢 $|\psi_n\rangle$ ($n = 1, 2, \dots, 8$), 考虑温度为 T 时, 三粒子密度矩阵为

$$\rho(T) = \frac{1}{Z} \sum_{n=1}^8 \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right) |\psi_n\rangle \langle \psi_n|, \quad (4)$$

其中 k_B 为玻尔兹曼常数, Z 为配分函数

$$Z = \sum_{n=1}^8 \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right). \quad (5)$$

3 结果与讨论

本节中, 我们基于上述给出的实验拟合参数和计算步骤, 利用数值计算方法求解 $\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体在温度和磁场作用下的三体负性纠缠度 N , 研究 $\{\text{Cu}_3\}$ 型三角自旋环中三体纠缠性质. 下面我们将

分别考虑沿垂直于三角自旋环方向的磁场 (沿 z 轴方向)、平行于三角自旋环方向的磁场 (沿 x 轴和 y 轴方向) 以及倾斜磁场 (位于 xz 平面内) 的情形.

3.1 磁场沿 z 轴方向的情形

图 1 显示了磁场沿 z 轴方向时, 三体负性纠缠度 N 随磁场强度和温度的变化关系. 从图 1(a) 中可以看出, 在一定的温度和磁场强度范围内, 三体负性纠缠度 N 不为零, 表明在此参数区间, $\{\text{Cu}_3\}$ 型三角自旋环处存在三体纠缠量子态. 当超过某个温度值 (临界温度 T_c) 和磁场强度 (临界磁场度 H_c) 时, 三体负性纠缠度 N 为零, 即三体纠缠态消失 (此处及以下在数值计算中, 假定 $N < 10^{-3}$ 时无三体纠缠). 图 1(b) 给出了不同温度下 N 随磁场强度的变化. 当温度较低时, 三体负性纠缠度 N 随磁场强度非单调性变化. 以 $T = 0.1$ K 为例, 没有磁场作用时, $N = 0.5122$, 当沿 z 轴方向 (垂直于三角自旋环

方向) 加入磁场时, 三体负性纠缠度 N 迅速增加至 0.8973, 随着磁场强度的增加, N 逐渐增加至最大值 0.9004. 磁场强度在 $0.5935 \text{ T} \leq H_z \leq 0.6902 \text{ T}$ 区间, 三体负性纠缠度 N 保持在最大值. 当磁场强度超出上述参数区间, N 开始逐渐下降, 但依然维持一个近似平台区. 当磁场强度继续增大, N 迅速下降, 最后缓慢趋于零. 图 1(b) 显示, 随着温度增加, 三体负性纠缠度 N 的最大值逐渐减小, 平台区也逐渐缩小, 而且 N 达到最大值时所对应的磁场强度也相应增加. 例如 $T = 0.5$ 和 1.0 K 时, 三体负性纠缠度 N 的最大值和对应的磁场强度范围分别是 $(0.7591, 2.214 \text{ T} \leq H_z \leq 2.334 \text{ T})$ 和 $(0.5325, 2.381 \text{ T} \leq H_z \leq 2.434 \text{ T})$. 因此, 对于较低温度, 磁场强度 H_z 较小时有利于三体纠缠量子态的产生; 当磁场强度 H_z 较大时, 则抑制三体纠缠. 图 1(b) 也显示出当温度较高 (如 $T = 3.0$ K) 时, 三体负性纠缠度 N 随磁场强度的增加而逐渐减少.

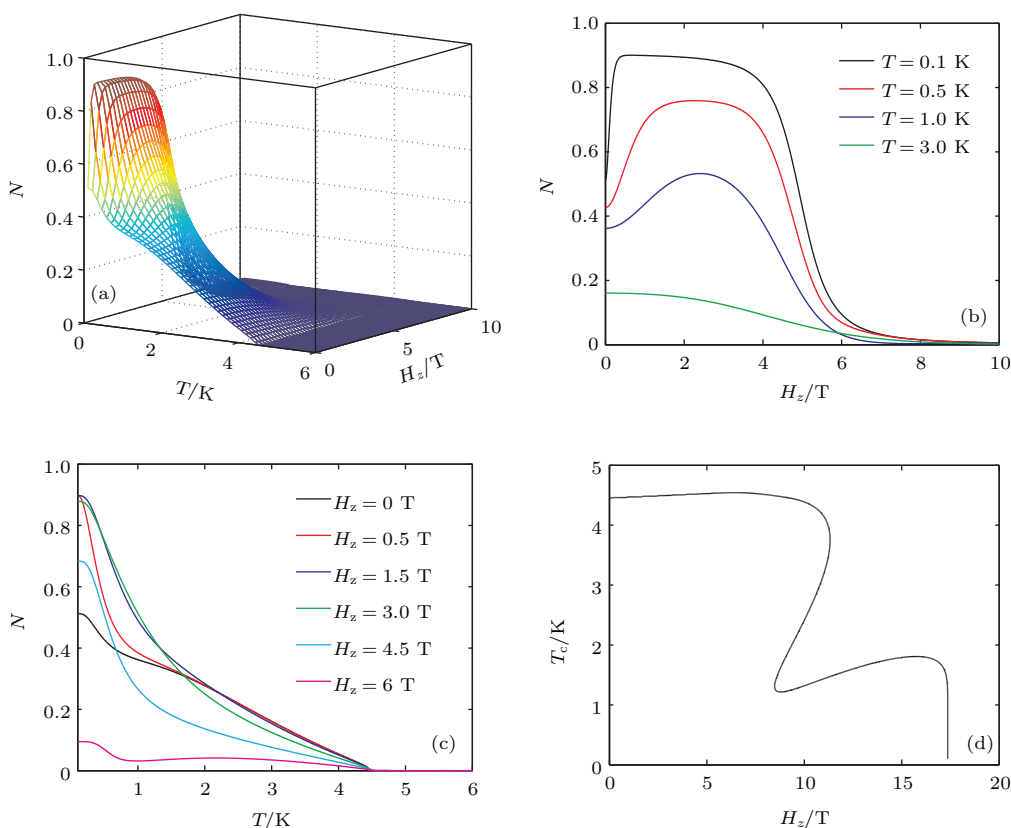


图 1 (网刊彩色) 磁场沿 z 轴方向时, 三体负性纠缠度 N 随磁场强度和温度的变化关系 (a) 三体负性纠缠度 N 随磁场强度和温度变化的三维图; (b) 不同温度下, N 随磁场强度的变化; (c) 不同磁场强度下, N 随温度变化的情形; (d) 临界温度 T_c 随磁场强度的变化

Fig. 1. (color online) Tripartite negativity of $\{\text{Cu}_3\}$ single molecular magnet versus the magnetic field along the z axis and temperature: (a) N versus the magnitude of magnetic field and temperature; (b) N versus the magnitude of magnetic field for the different temperatures; (c) N versus the temperature for the different magnitudes of magnetic field; (d) the critical temperature versus the magnitude of magnetic field.

图 1(c) 给出了不同磁场强度下 N 随温度的变化. 当外加磁场为零时, 三体负性纠缠度 N 随温度的增加而减少, 直至到达临界温度 $T_c = 4.452$ K 三体纠缠消失 ($N = 0$). 随着磁场强度的增加, 三体负性纠缠度 N 依然保持这种随温度单调变化关系, 同时磁场强度与温度对三体负性纠缠度 N 的影响存在着明显的竞争关系. 以 $H_z = 4.5$ T 为例: 当温度 $T \leq 0.6745$ K 时, 沿 z 轴方向加入磁场有利于三体纠缠产生; 而当温度 $T > 0.6745$ K 时, 磁场反而抑制了三体纠缠. 当磁场强度较高时, 三体负性纠缠度 N 随温度呈现出非单调变化关系 (如图 1(c) 中 $H_z = 6$ T 对应的曲线).

图 1(d) 给出了临界温度 T_c 随磁场强度 H_z 的变化情况. $\{Cu_3\}$ 型三角自旋环中三体纠缠态的临界温度 T_c 随外加磁场强度的变化表现出非单调变化行为. 在图 1(d) 中曲线内侧区域对应存在三体纠缠态的情况, 曲线外侧区域则对应三体纠缠态消失的情况. 当外加磁场强度 8.517 T $< H_z < 11.37$ T, 系统存在三个临界温度. 以 $H_z = 10$ T 为例: 相应的三个临界温度分别为 1.3297, 2.4174, 4.392 K, 即温度 $T < 1.3297$ K 时,

系统存在三体纠缠; 在 1.3297 K $< T < 2.4174$ K 时, 三体纠缠消失; 在 2.4174 K $< T < 4.392$ K 时, 三体负性纠缠度 N 不为零, 三体纠缠恢复; 温度超过 4.392 K 时, 三体纠缠被完全抑制. 在另一方面, 实际上图 1(d) 也给出了在一定温度下临界磁场的值. 例如温度为 $T = 1.0$ 和 3.0 K 时, 相应的临界磁场分别为 17.3848 和 10.8216 T. 令人感兴趣的发现是, 在温度处在 1.216 K $< T < 1.806$ K 区间, 系统存在三个临界磁场. 以 $T = 1.5$ K 为例: 相应的三个临界磁场分别为 8.6673, 11.5731, 17.2846 T, 即磁场强度 $H_z < 8.6673$ T 时, 系统存在三体纠缠; 在 8.6673 T $< H_z < 11.5731$ T 时, 三体纠缠消失; 在 11.5731 T $< H_z < 17.2846$ T 时, 三体纠缠恢复; 当磁场强度超过 17.2846 T 时, 三体纠缠再次被完全抑制.

3.2 磁场沿 x 轴方向的情形

现在我们讨论外加平行于三角自旋环方向的磁场对三体负性纠缠度 N 的影响, 首先考虑沿 x 轴方向磁场的情形. 图 2 描绘了磁场沿 x 轴方向时, 三体负性纠缠度 N 随磁场强度和温度的变化关系.

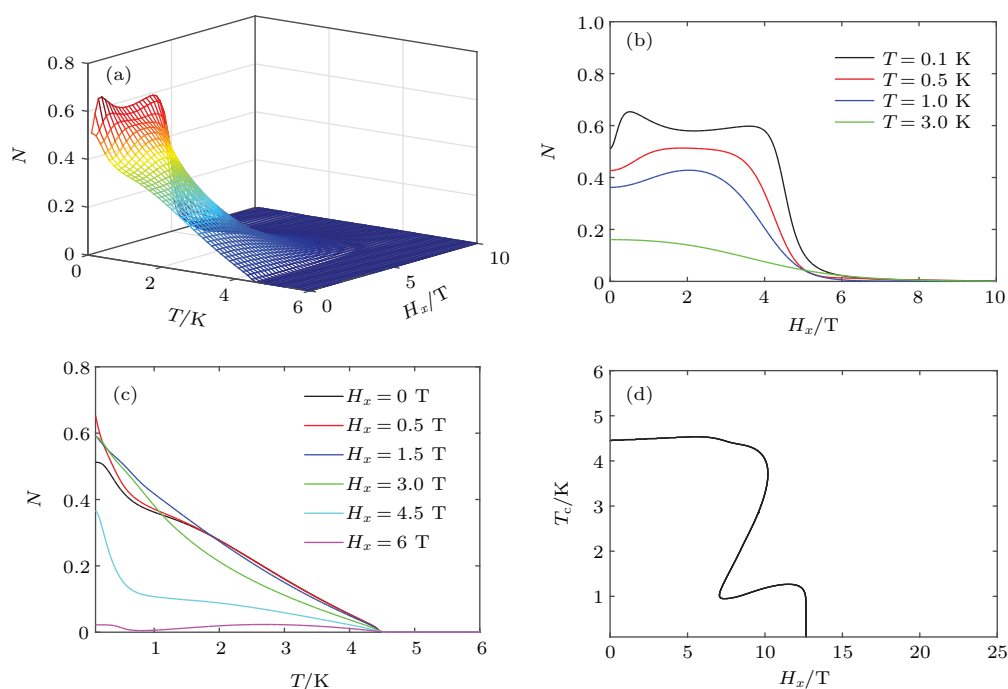


图 2 (网刊彩色) 磁场沿 x 轴方向时, 三体负性纠缠度 N 随磁场强度和温度的变化关系 (a) 三体负性纠缠度 N 随磁场强度和温度变化的三维图; (b) 不同温度下, N 随磁场强度的变化; (c) 不同磁场强度下, N 随温度的变化情形; (d) 临界温度 T_c 随磁场强度的变化

Fig. 2. (color online) Tripartite negativity of $\{Cu_3\}$ single molecular magnet versus the magnetic field along the x axis and temperature: (a) N versus the magnitude of magnetic field and temperature; (b) N versus the magnitude of magnetic field for the different temperatures; (c) N versus the temperature for the different magnitudes of magnetic field; (d) the critical temperature versus the magnitude of magnetic field.

对比前面讨论的垂直磁场 (沿 z 轴方向) 情形 (图 1(a)), 当外加磁场平行于三角自旋环方向时 (图 2(a)) 系统的最大三体负性纠缠度 N 小于前者. 图 2(b) 给出了磁场沿 x 轴方向时不同温度下 N 随磁场强度的变化. 当温度较低时, 类似于垂直磁场的情形, 三体负性纠缠度 N 也是随磁场强度非单调性变化. 但在零温附近, 两者变化趋势上有着明显的不同. 以 $T = 0.1$ K 为例, 图 2(b) 显示出 N 随磁场强度 H_x 的变化曲线存在两个峰值, 磁场从零开始增加时, N 从 0.5122 逐渐达到第一个峰值 0.6532 (相应的磁场范围 $0.5035 \text{ T} \leq H_x \leq 0.5235 \text{ T}$), 当磁场强度继续增大, N 会先下降, 后又逐渐增加至第二个峰值 0.5977 (相应的磁场范围 $3.558 \text{ T} \leq H_x \leq 3.641 \text{ T}$), 之后陡然下降, 最后逐渐趋于零. 对于图 2(b) 给出的 $T = 0.5$ 和 1.0 K 的变化曲线与垂直磁场情形 (如图 1(b) 所示) 相似, 只是这时的三体负性纠缠度 N 的最大值和对应的磁场强度范围分别是 $(0.5133, 1.781 \text{ T} \leq H_x \leq 1.951 \text{ T})$ 和 $(0.4281, 2.027 \text{ T} \leq H_x \leq 2.054 \text{ T})$, 显然小于垂直磁场的情形. 当温度较高 (如 $T = 3.0$ K) 时, 我们发现对于平行磁场和垂直磁场两种情形而言, 三体负性纠缠度 N 随磁场强度的变化曲线几乎一致. 这说明, 在温度较高时, 温度对系统的三体纠缠的影响占了主导地位. 图 2(c) 给出了磁场沿 x 轴方向时不同磁场强度 H_x 下 N 随温度的变化. 类似于垂直磁场的情形, 在低温条件下, 外加一定范围的磁场 (如图 2(c) 中 $H_x = 0.5, 1.5$ 和 3.0 T 的情况) 有利于三体纠缠的产生, 随着温度的增加外加磁场反而抑制了三体纠缠. 同样对于较高的磁场强度而言, 则是完全抑制三体纠缠 (如图 2(c) 中 $H_x = 4.5$ 和 6.0 T 的情况). 图 2(d) 给出了磁场沿 x 轴方向时临界温度 T_c 随磁场强度 H_x 的变化情况. 对比垂直磁场 (如图 1(d) 所示) 情形, 我们发现当磁场沿 x 轴方向时系统存在三体纠缠的参数范围小于前者. 图 2(d) 显示当磁场强度在 $7.061 \text{ T} < H_x < 10.181 \text{ T}$ 区间时, 系统存在三个临界温度; 在另一方面, 当在温度处在 $0.951 \text{ K} < T < 1.267 \text{ K}$ 区间时, 系统存在三个临界磁场. 类似前面的分析, 磁场沿 x 轴方向时系统也存在纠缠恢复现象.

3.3 磁场沿 y 轴方向的情形

接着我们考虑沿 y 轴方向磁场的情形. 图 3 描绘了磁场沿 y 轴方向时, 三体负性纠缠度 N 随磁场

强度和温度的变化关系. 数值计算的结果显示, 磁场沿 y 轴方向对三体负性纠缠度 N 的影响与磁场沿 x 轴方向的结果非常相似. 主要的区别在零温附近, 如图 3(a) 中 $T = 0.1$ K 时, N 随磁场强度 H_y 的变化曲线只存在一个峰值, 即 $N = 0.6543$. 这种差别的主要原因在于 $\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体中 DM 相互作用的各向异性, 张量 \mathbf{D} 沿 x 轴方向和 y 轴方向的分量存在较大差异, 而交换作用参数 J 在两个方向上的差异不大, 由拟合实验参数可知, DM 相互作用参数 \mathbf{D} 比交换作用参数 J 要小一个数量级. 在零温附近, DM 相互作用对系统基态有着重要贡献, 因此对系统的三体纠缠态有较大影响. 磁场强度 H_y 和温度对三体纠缠影响的具体分析, 此处不再赘述. 从图 1 至图 3, 我们发现系统在温度 and 外加磁场强度大小都相同的条件下, 相对于平行于自旋环平面的磁场, 垂直于自旋环平面的磁场可以得到更高的三体负性纠缠度.

3.4 磁场沿倾斜方向的情形

最后, 我们考虑倾斜磁场对系统三体负性纠缠度 N 的影响. 假定磁场方向位于 xz 平面内, 与 z 轴夹角为 ϕ . 图 4(a) 给出了磁场强度大小为 2 T 时, 在不同温度下, 三体负性纠缠度 N 随角度 ϕ 的变化情况. 从图 4(a) 可知, N 随角度 ϕ 的增大而减小, 而且温度越低, 磁场方向对 N 的影响越大; 随着温度的增加, N 随 ϕ 的变化愈加平缓, 当温度较高时 (如图 4(a) 中 $T = 2.0$ K 时的情形), 三体负性纠缠度 N 将与外加磁场方向无关. 图 4(b) 给出了温度为 1.0 K 时, 在不同的磁场强度大小下, 三体负性纠缠度 N 随角度 ϕ 的变化情况. 如图 4(b) 所示, 磁场强度越大, N 受角度 ϕ 的影响越大. 以 $H = 3.0 \text{ T}$ 为例, $\phi = 0$ 时 (磁场沿 z 轴方向), N 达到最大值 0.5135, 随着角度 ϕ 的增大, N 逐渐下降, 至 $\phi = 90^\circ$ 时 (磁场沿 x 轴方向), 得到 N 的值为 0.3815. 而当 $H = 0.5 \text{ T}$ 时, 角度 ϕ 对 N 的影响相对于 $H = 3.0 \text{ T}$ 的情形则小很多. 图 4(c) 给出了临界温度 T_c 随磁场角度 ϕ 的变化情况. 结果显示, 当磁场较低时 (如图 4(c) 中 $H = 2 \text{ T}$ 的情形所示), 临界温度 T_c 与磁场方向近似无关. 但磁场较高时 (如图 4(c) 中 $H = 10 \text{ T}$ 的情形所示), 磁场方向的变化引起了临界温度 T_c 的改变. 注意在 $H = 10 \text{ T}$ 时, 存在三个临界温度. 区域 I 和 III 为存在三体纠缠的参数区, 而区域 II 为三体纠缠消失的参数区, 这与前文讨论结果一致. 图 4(d) 给出了临界磁

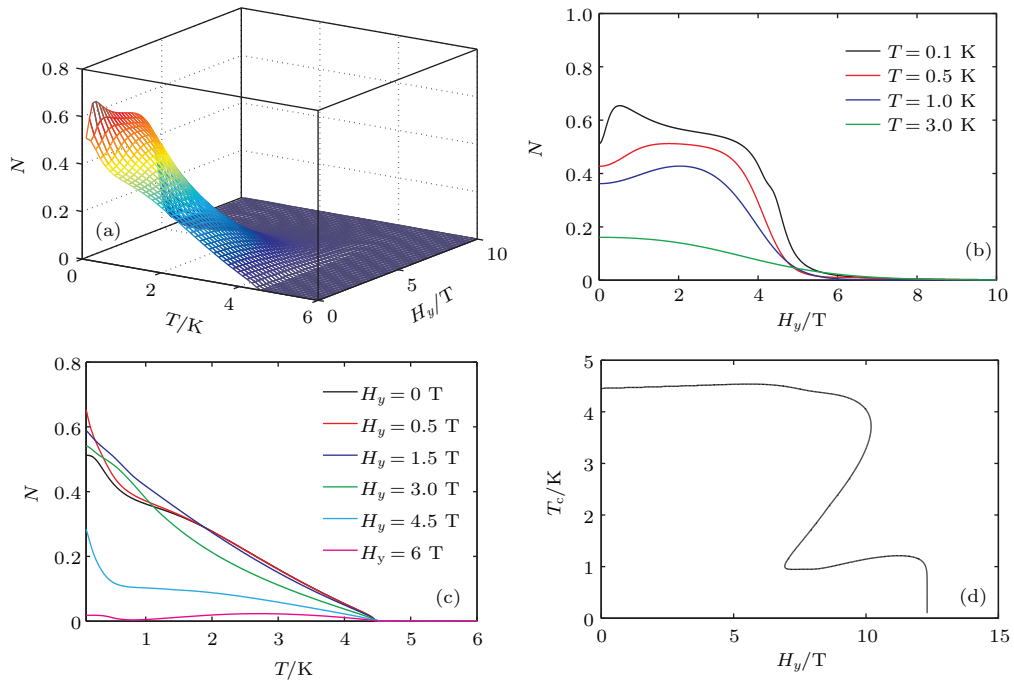


图3 (网刊彩色) 磁场沿 y 轴方向时, 三体负性纠缠度 N 随磁场强度和温度的变化关系 (a) 三体负性纠缠度 N 随磁场强度和温度变化的三维图; (b) 不同温度下, N 随磁场强度的变化; (c) 不同磁场强度下, N 随温度的变化情形; (d) 临界温度 T_c 随磁场强度的变化

Fig. 3. (color online) Tripartite negativity of $\{\text{Cu}_3\}$ single molecular magnet versus the magnetic field along the y axis and temperature: (a) N versus the magnitude of magnetic field and temperature; (b) N versus the magnitude of magnetic field for the different temperatures; (c) N versus the temperature for the different magnitudes of magnetic field; (d) the critical temperature versus the magnitude of magnetic field.

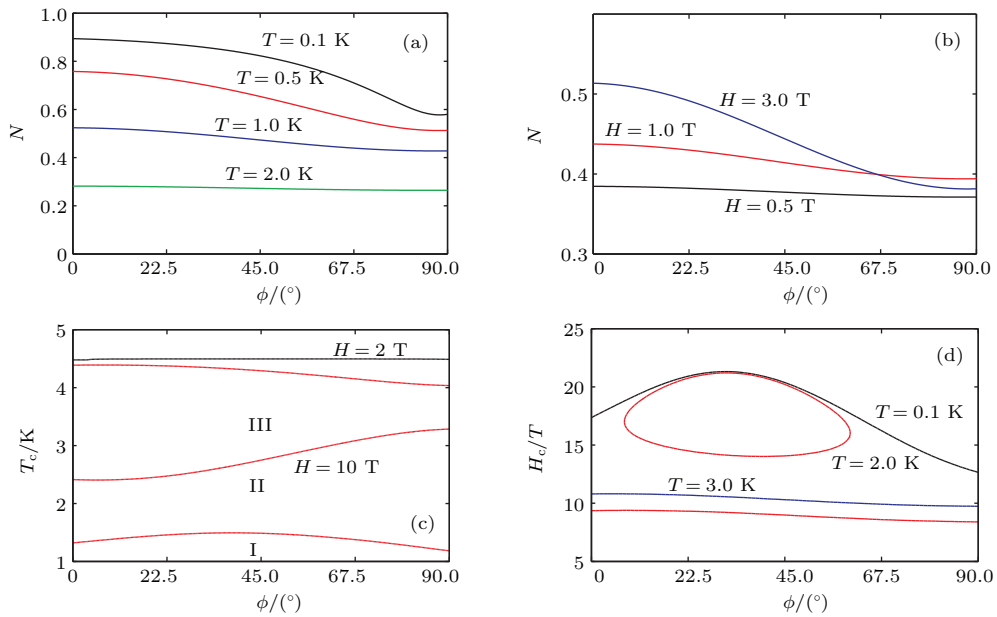


图4 (网刊彩色) 三体负性纠缠度 N 和临界温度(磁场)随磁场角度的变化 (a) 不同温度下, 三体负性纠缠度 N 随磁场角度的变化 ($H = 2$ T); (b) 不同磁场强度下, 三体负性纠缠度 N 随磁场角度的变化 ($T = 1$ K); (c) 不同磁场强度下, 临界温度随磁场角度的变化; (d) 不同温度下, 临界磁场随磁场角度的变化

Fig. 4. (color online) Tripartite negativity of $\{\text{Cu}_3\}$ single molecular magnet and the critical temperature (magnetic field) versus the angles of magnetic field: (a) N versus the angles of magnetic field for the different temperatures ($H = 2$ T); (b) N versus the angles of magnetic field for the different magnitudes of magnetic field ($T = 1$ K); (c) the critical temperature versus the angles of magnetic field for the different magnitudes of magnetic field; (d) the critical magnetic field versus the angles of magnetic field for the different temperatures.

场 H_c 随磁场角度 ϕ 的变化情况. 对比 $T = 0.1$ 和 3.0 K 的情形, 结果显示, 温度越低, 临界磁场 H_c 随磁场角度 ϕ 的变化越明显. 图 4(d) 中 $T = 2.0$ K 的情形, 给出了在磁场角度 ϕ 处在 $8.1819^\circ \leq \phi \leq 60.003^\circ$ 范围内时, 系统将存在三个临界磁场.

4 结 论

我们基于 $\{\text{Cu}_3\}$ 单分子磁体的自旋等效模型和实验拟合参数, 利用数值计算方法求解三体负性纠缠度 N , 研究了温度和外加磁场对 $\{\text{Cu}_3\}$ 型三角自旋环中的三体纠缠性质的影响. 计算结果表明, 对于相对较低的温度, 磁场强度较小时有利于三体纠缠量子态的产生; 当磁场强度较大时, 则抑制三体纠缠. 而当温度相对较高时, 三体负性纠缠度随磁场强度的增加而逐渐减少. 系统在温度和外加磁场强度大小都相同的条件下, 相对于平行于自旋环平面的磁场, 垂直于自旋环平面的磁场可以得到更高的三体负性纠缠度. 分析临界温度随磁场强度的变化图, 发现在特定的参数区域, 该系统存在纠缠恢复现象. 因此适当调节温度、磁场强度大小和磁场方向可以有效调控 $\{\text{Cu}_3\}$ 型三角自旋环中的三体纠缠性质.

参考文献

- [1] Bennett C H, Wiesner S J 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2881
- [2] Schumacher B 1995 *Phys. Rev. A* **51** 2738
- [3] Mattle K, Weinfurter H, Kwiat P G, Zeilinger Z 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 4656
- [4] Bennett C H 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 1895
- [5] Kim Y H, Kulik S P, Shih Y 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 1370
- [6] Ekert A K 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 661
- [7] Deutsch D, Ekert A, Jozsa R, Macchiavello C, Popescu S S 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 2818
- [8] Wang X G 2001 *Phys. Rev. A* **64** 012313
- [9] Wang X G 2001 *Phys. Lett. A* **281** 101
- [10] 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]
- [11] Cao M, Zhu S Q 2005 *Phys. Rev. A* **71** 034311
- [12] Wang X G, Fu H C, Solomon A I 2001 *J. Phys. A* **34** 11307
- [13] Hou J M, Du L, Ding J Y, Zhang W X 2010 *Chin. Phys. B* **19** 110313
- [14] Ma X S, Qiao Y, Cheng M T, Liu X D 2014 *Quantum Inf. Process.* **13** 1879
- [15] Xu S, Song X K, Ye L 2014 *Quantum Inf. Process.* **13** 1013
- [16] Guo K T, Liang M C, Xu H Y, Zhu C B 2010 *J. Phys. A* **43** 505301
- [17] Sun Z, Wang X G, Hu A Z, Li Y Q 2006 *Physica A* **370** 483
- [18] Sabín C, García-Alcaine G 2008 *Eur. Phys. J. D* **48** 435
- [19] Coffman V, Kundu J, Wootters W K 2000 *Phys. Rev. A* **61** 052306
- [20] Yu C S, Song H S 2004 *Phys. Lett. A* **330** 377
- [21] Meyer D, Wallach N R 2002 *J. Math. Phys.* **43** 4273
- [22] Brennen G K 2003 *Quantum Inf. Comput.* **3** 619
- [23] Love P J, van den Brink A M, Smirnov A Y, Amin M H S, Grajcar M, Il'ichev E, Izmailkov A, Zagoskin A M 2007 *Quantum Inf. Process.* **6** 187
- [24] Ma X S, Zhao G X, Zhang J Y, Wang A M 2013 *Quantum Inf. Process.* **12** 321
- [25] Anzà F, Militello B, Messina A 2010 *J. Phys. B* **43** 205501
- [26] Guo Y N, Fang M F, Zhang S Y, Liu X 2015 *Phys. Scr.* **90** 035103
- [27] Feng L J, Zhang Y J, Zhang L, Xia Y J 2015 *Chin. Phys. B* **24** 110305
- [28] Li Y J, Liu J M 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 200302 (in Chinese) [李艳杰, 刘金明 2014 物理学报 **63** 200302]
- [29] Cai J T, Abliz A 2013 *Phys. A* **392** 2607
- [30] Weinstein Y S 2009 *Phys. Rev. A* **79** 012318
- [31] Buscemi F, Bordone P 2011 *Phys. Rev. A* **84** 022303
- [32] Friedman J R, Sarachik M P, Tejada J, Ziolo R 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 3830
- [33] Thomas L, Lioni F, Ballou R, Gatteschi D, Sessoli R, Barbara B 1996 *Nature* **383** 145
- [34] Wernsdorfer W, Sessoli R 1999 *Science* **284** 133
- [35] Ardavan A, Rival O, Morton J J L, Blundell S J, Tyryshkin A M, Timco G A, Winpenny R E P 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 057201
- [36] Kortz U, Nellutla S, Stowe A C, Dalal N S, Rauwald U, Danquah W, Ravot D 2004 *Inorg. Chem.* **43** 2308
- [37] Stowe A C, Nellutla S, Dalal N S, Kortz U 2004 *Eur. J. Inorg. Chem.* **2004** 3792
- [38] 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
- [39] Islam M F, Nossa J F, Canali C M 2010 *Phys. Rev. B* **82** 155446
- [40] Mousolou V A, Canali C M, Sjöqvist E 2015 *arXiv:1512.01636v1[quant-ph]*
- [41] Li J Q, Cheng Z, Zhou B 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 190302 (in Chinese) [李纪强, 成志, 周斌 2013 物理学报 **62** 190302]
- [42] Li J Q, Zhou B 2014 *Chin. Phys. B* **23** 070302
- [43] Vidal G, Werner R F 2002 *Phys. Rev. A* **65** 032314

Tripartite entanglement of $\{\text{Cu}_3\}$ single molecular magnet with magnetic field in thermal equilibrium*

Zheng Yi-Dan Zhou Bin[†]*(Faculty of Physics and Electronic Science, Hubei University, Wuhan 430062, China)*

(Received 21 March 2016; revised manuscript received 14 April 2016)

Abstract

Quantum entanglement is one of the most fundamental properties of quantum mechanics. Because of the nonlocality, quantum entanglement is widely used in quantum computation and quantum information. Considering the fact that thermal fluctuation suppresses quantum effects, the concept of thermal entanglement is introduced to refer to the idea that the effect of temperature should be viewed as external control in the preparation of entangled state. It has been found that nanoscale single molecular magnet has a novel quantum effect at low temperature. Furthermore, single-molecular magnet is viewed as a promising candidate for realizing encoding and manipulation of quantum information. $\text{Na}_9[\text{Cu}_3\text{Na}_3(\text{H}_2\text{O})_9(\alpha\text{-AsW}_9\text{O}_{33})_2]\cdot 26\text{H}_2\text{O}$ (denoted as $\{\text{Cu}_3\}$ for convenience) is one of the typical representatives of nanoscale single molecular magnets. In this paper, we will theoretically analyze the properties of tripartite entanglement in $\{\text{Cu}_3\}$ with an external magnetic field in thermal equilibrium. The tripartite negativity is used to characterize the tripartite entanglement. The tripartite negativity of $\{\text{Cu}_3\}$ single molecular magnet is calculated numerically by using the equivalent spin model and experimental fitting parameters. We consider the magnetic fields along the vertical and the parallel directions of triangular spin ring, respectively, and the case with a tilted magnetic field is also discussed in this paper. It is shown that the magnitude and direction of magnetic field, and temperature have importance effects on the tripartite negativity of the system. It is found that the larger extra strong magnetic field will inhibit the generation of the quantum state of tripartite entanglement at higher temperature. In addition, compared with the magnetic field along the parallel direction of triangular spin ring and the tilted magnetic field, the magnetic field along the vertical direction of triangular spin ring obtains larger values of tripartite negativity under the same temperature and magnetic field. We also plot the variations of the critical temperature with the magnetic field along different directions, and from the critical temperature-magnetic field phase diagrams one can obtain the range of parameters in which the tripartite entanglement of the system exists. We also find that entanglement revival behaviors may occur in the specific range of parameters. Therefore, the properties of the tripartite entanglement in the $\{\text{Cu}_3\}$ triangular spin ring can be controlled and enhanced by choosing appropriate magnitude and direction of the magnetic field and temperature.

Keywords: thermal entanglement, tripartite negativity, single molecular magnet**PACS:** 03.65.Ud**DOI:** 10.7498/aps.65.120301

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11274102), the Program for New Century Excellent Talents in University of Ministry of Education of China (Grant No. NCET-11-0960), and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20134208110001).

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