

ЯМР-ДИНАМИКА КВАНТОВОГО ДИСКОРДА СПИН-НЕСУЩИХ МОЛЕКУЛ ГАЗА В ЗАМКНУТОЙ НАНОПОРЕ

М. А. Юрицев*

*Институт проблем химической физики Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 23 июня 2014 г.

Найдено локальное ортогональное преобразование, приводящее любую centrosymmetric матрицу плотности двухкубитовой системы к X-форме. Для расчета квантового дискорда Q общего X-состояния предложена кусочно-аналитико-численная формула $Q = \min\{Q_{\pi/2}, Q_{\theta}, Q_0\}$, где $Q_{\pi/2}$ и Q_0 — аналитические выражения, а ветвь Q_{θ} может быть получена лишь путем численного поиска оптимального угла измерения $\theta \in (0, \pi/2)$. Развитые подходы применены для количественного описания недавно предсказанных мерцаний (периодического исчезновения и появления вновь) квантово-информационной парной корреляции между ядерными спинами $1/2$ атомов или молекул газа (например, ^{129}Xe), находящегося в ограниченном объеме в присутствии сильного магнитного поля.

DOI: 10.7868/S0044451014110066

1. ВВЕДЕНИЕ

Понятие “quantum discord” (квантовый дискорд, квантовая невязка, квантовый разлад, квантовое рассогласование), призванное описывать величину всех чисто квантовых корреляций в системе, в настоящее время занимает центральное место при обсуждении вопросов радикального повышения производительности компьютеров, создания безопасных сетей передачи данных, осуществления телепортации состояний, регистрации квантовых фазовых переходов в конденсированных средах и т. д. Достигнутые успехи в теории и приложениях квантового дискорда отражены в недавних обзорах [1–3].

Фактическое вычисление дискорда, а значит, и исследование поведения квантовых корреляций в различных физических системах, резко ограничено из-за необходимости выполнения оптимизационной процедуры, входящей в определение этой величины: задача принадлежит к полному NP-классу сложности [4]. Даже для двухкубитовых моделей, когда матрица плотности имеет размеры всего только 4×4 , достижения аналитическими методами исчерпываются частными случаями X-матриц плотности — диагональными состояниями Белла (включают три независимых параметра) [5]. (Термин «X-состояние» был введен в 2007 г. и означает матрицу плотно-

сти четвертого порядка, в которой могут быть отличны от нуля только диагональные и антидиагональные матричные элементы [6, 7]; произвольная X-матрица плотности содержит семь вещественных параметров.) Были также предприняты попытки найти аналитические формулы для расчета квантового дискорда более общих семейств X-матриц плотности [8–11]. Однако в работах [12–14] на конкретных примерах были продемонстрированы случаи, когда аналитические формулы [8–11] неверны, и был сделан вывод: «Для общих двухкубитовых X-состояний квантовый дискорд не может быть вычислен аналитически» [14]. В предлагаемой работе мы покажем, что в действительности общая формула для расчета квантового дискорда X-матриц плотности является кусочно-аналитико-численной, т. е. на одних участках области определения дискорд выражается аналитически, а на других — только в численном виде.

Перейдем теперь к интересующей нас физической проблеме. В работе [15] были проведены исследования методами ядерного магнитного резонанса (ЯМР) поведения газообразного водорода в вытянутых микроскопических пустотах аморфного кремния. Для этого водород под давлением 2 кбар сначала закачивался в пленки кремния толщиной два микрона. Затем полученный образец a-Si:H изучался в ЯМР-спектрометре с магнитным полем 4.7 Тл. Результаты экспериментов оказались во многом

*E-mail: yur@itp.ac.ru

неожиданными. Газ вел себя как квантовая коллективная система, в которой все ядерные спины ортоводорода взаимодействовали друг с другом одинаковым образом — вне зависимости от их положения в пространстве полости и, следовательно, расстояний между ними. Авторы работы [15] (см. также [16]) данные своих наблюдений объясняли, во-первых, наличием быстрого теплового движения молекул в нанополости в сочетании с относительно медленными скоростями переворотов спинов и, во-вторых, асимметрией (несферичностью) пустот. Эти факторы привели в итоге к неполному усреднению секулярной части магнитных диполь-дипольных взаимодействий между спинами частиц. В дальнейшем задача о квантовом поведении спин-несущих частиц в замкнутом объеме пространства при наличии сильного магнитного поля рассматривалась в статьях [17–21].

В своей работе [22] мы предприняли попытку теоретического исследования динамических квантовых корреляций в модели из N движущихся спинов $I = 1/2$, запертых в присутствии сильного магнитного поля B_0 в объеме эллипсоидальной формы. В рамках теории усредненного гамильтониана с универсальной (одинаковой для всех пар частиц) константой взаимодействия D была найдена двухчастичная матрица плотности во вращающейся системе координат. (Квантовые корреляции во вращающейся системе координат представляют интерес также в задачах о поведении атомов в поле оптического резонатора [23].) Как оказалось, матрица плотности для пар частиц в нанопоре имеет не X -форму, а центросимметричный (ЦС) вид. Это позволило нам изучить лишь квантовую запутанность в системе, но не позволило в полном объеме провести исследование квантового дискорда. (Центросимметричная матрица $n \times n$ определяется соотношениями для ее матричных элементов $a_{i,j} = a_{n-i+1,n-j+1}$; свойства ЦС-матриц изложены в работах [24–26].) К счастью, найденная матрица плотности приобретает X -форму трехпараметрического типа в моменты времени $t_l = \pi l/3D$ ($l = 0, 1, 2, \dots$), а также в промежутках между этими моментами, но в термодинамическом пределе $N \rightarrow \infty$. Для этих двух частных случаев нами был вычислен квантовый дискорд. Выяснилось, что в моменты времени t_l дискорд обращается в нуль, а в промежутках между ними имеет конечное значение. Такие периодические исчезновения корреляций до нуля и появления их снова были названы мерцаниями дискорда [22]. При этом полная картина поведения квантового дискорда осталась неизвестной.

В предлагаемой работе мы находим, во-первых, универсальное локальное ортогональное преобразование подобия, которое трансформирует любую ЦС-матрицу четвертого порядка в X -матрицу (и наоборот). Из-за того, что квантовый дискорд инвариантен относительно локальных унитарных преобразований [1–3], эта находка позволяет свести задачу расчета дискорда ЦС-состояния к аналогичной задаче для X -состояния. Во-вторых, вычисление квантового дискорда X -матрицы плотности мы проводим с использованием кусочно-аналитико-численной формулы, что гарантирует правильность расчета функции дискорда во всей ее области определения.

В разд. 2–7 статьи дано общее определение квантового дискорда, описана модель и представлена матрица плотности для пар спин-несущих частиц в нанопоре, найдена связь ЦС- и X -матриц посредством локального ортогонального преобразования, получена кусочно-аналитико-численная формула для расчета дискорда произвольного X -состояния, представлены и обсуждены результаты для квантово-информационной корреляции между парами частиц в нанопоре. В Заключении кратко подведены итоги выполненного исследования.

2. КОРРЕЛЯЦИИ И ИХ МЕРЫ

В теории вероятностей и математической статистике величину взаимосвязи (корреляции) между двумя случайными переменными x и y с функцией распределения вероятностей $p(x, y)$ измеряют с помощью ковариации (центрированного корреляционного момента)

$$\text{cov}(x, y) = \overline{(x - \bar{x})(y - \bar{y})}, \quad (1)$$

где черта означает усреднение по распределению вероятностей. К сожалению, обращение ковариации в нуль еще не гарантирует независимости случайных величин, т. е. что $p(x, y) = p_1(x)p_2(y)$ [27–29].

С другой стороны, в классической теории информации [30–33] большую роль играет так называемая взаимная информация

$$\mathcal{I}(X : Y) = H(X) + H(Y) - H(X, Y), \quad (2)$$

где $H(X)$, $H(Y)$ и $H(X, Y)$ — энтропии Шеннона. Оказалось, что, в отличие от ковариации, обращение в нуль взаимной информации, $\mathcal{I} = 0$, является необходимым и достаточным условием независимости X и Y . Это позволяет использовать величину \mathcal{I} в качестве меры теперь уже информационной корреляции (статистической связи) между системами X и Y [29].

Такая мера отвечает интуитивному ожиданию: два объекта или явления коррелируют (взаимобусловлены), если в одном из них есть доля информации о другом.

Пользуясь известной в теории вероятностей формулой Байеса, правую часть равенства (2) для взаимной информации можно записать в шенноновской несимметричной форме, которую обозначим через \mathcal{J} :

$$\mathcal{J}(X : Y) = H(X) - H(X|Y), \quad (3)$$

где

$$H(X|Y) = H(X, Y) - H(Y) \quad (4)$$

— условная энтропия. В классическом случае, разумеется, $\mathcal{J} \equiv \mathcal{I}$.

В квантовой теории информации [34–36] выражение (2) заменяют новым соотношением

$$\mathcal{I}(A : B) = S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{AB}), \quad (5)$$

которое служит мерой взаимной информации между двумя подсистемами A и B , составляющими вместе объединенную систему $AB = A \cup B$. В равенстве (5) ρ_{AB} является матрицей плотности всей системы AB , ρ_A и ρ_B — редуцированные матрицы плотности соответственно для подсистем A и B , а $S(\rho)$ ($\rho = \{\rho_A, \rho_B, \rho_{AB}\}$) представляет собой энтропию фон Неймана

$$S(\rho) = -\text{Tr } \rho \log \rho. \quad (6)$$

(Выбор основания логарифма фиксирует величину единицы измерения информационной энтропии: наты, биты, диты, хартли, баны и пр.) Важно, что, как и в классическом случае для функции распределения, равенство $\mathcal{I} = 0$ является необходимым и достаточным условием факторизации матрицы плотности полной системы: $\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$, что означает абсолютную независимость (некоррелированность) A и B (см., например, [36], с. 627). В квантовой теории информации величина \mathcal{I} служит мерой всех (и классических C , и квантовых Q) корреляций между двумя (под)системами: $\mathcal{I} = C + Q$.

Оливьер и Зурек [37] обобщили соотношение Шеннона (3) на квантовый случай:

$$\mathcal{J}(A : B) = S(\rho_A) - \sum_i p_i S(\rho_A^i), \quad (7)$$

где второй член в правой части этого равенства представляет собой квантовую условную энтропию. Кроме того,

$$\rho_A^i = \text{Tr}_B(B_i \rho_{AB} B_i^\dagger) / \text{Tr}_{AB}(B_i \rho_{AB} B_i^\dagger) \quad (8)$$

есть состояние подсистемы A , которое возникает после того, как на подсистеме B проведено измерение и зафиксировано, что оно дало i -й результат (классический исход), а

$$p_i = \text{Tr}_{AB}(B_i \rho_{AB} B_i^\dagger) \quad (9)$$

равно вероятности получить после измерения результат i . Минимальная разность $\mathcal{I} - \mathcal{J} \equiv Q$, которая достигается на множестве всех одномерных проективных измерений $\{B_i\}$ (измерений фон Неймана), была отождествлена с величиной меры квантовости корреляций и получила название квантового дискорда — разногласия, расхождения между \mathcal{I} и \mathcal{J} , между классичностью и квантовостью [37]. Итак, квантовый дискорд определяется равенством

$$Q = S(\rho_B) - S(\rho_{AB}) + \min_{\{B_i\}} \sum_i p_i S(\rho_A^i). \quad (10)$$

3. ГАМИЛЬТониан И ДВУХЧАСТИЧНАЯ МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ

Во вращающейся системе координат эффективный гамильтониан для N ядерных спинов $1/2$ молекул газа (или жидкости), подверженных сильным тепловым движениям в аксиально-симметричном эллипсоидальном контейнере, равен ([22] и имеющиеся там ссылки)

$$H_{dz} = \frac{D}{2}(3I_z^2 - \mathbf{I}^2), \quad (11)$$

где D — константа взаимодействия, зависящая от формы полости (отношения осей эллипсоида), ее объема V и ее ориентации (наклона) по отношению к внешнему магнитному полю; I_z — сумма проекций спиновых угловых моментов всех частиц на ось z (направление внешнего магнитного поля); \mathbf{I}^2 — квадрат полного углового момента спинов частиц. Отметим, что $D \propto 1/V$ и поэтому взаимодействие спинов реально проявляется лишь для полостей наноразмеров. Кроме того, в случае сферически-симметричной полости взаимодействия усредняются до нуля: $D = 0$ [15, 17].

Как и в работе [22], здесь будем считать, что сначала образец в ЯМР-установке приведен в состояние полного теплового равновесия. Затем в момент времени $t = 0$ на него подается одиночный короткий резонансный $\pi/2$ -импульс, поворачивающий все спины вокруг оси y на угол $\pi/2$. Матрица плотности системы приобретает неравновесный вид

$$\rho_N(0) = \frac{1}{Z} \exp(\beta I_x). \quad (12)$$

После этого начинается процесс свободной эволюции, описываемый, в соответствии с уравнением Лиувилля, матрицей плотности

$$\rho_N(t) = \exp(-iH_{dz}t)\rho_N(0)\exp(iH_{dz}t) = \frac{1}{Z}\exp(-iatI_z^2)\exp(\beta I_x)\exp(iatI_z^2). \quad (13)$$

В этих равенствах

$$Z = \text{Tr}\{\exp(\beta I_x)\} = 2^N \text{ch}^N \frac{\beta}{2} \quad (14)$$

— статистическая сумма системы, $\beta = \hbar\omega_0/k_B T$ — обратная безразмерная температура, $\omega_0 = \gamma B_0$ (γ — гиромагнитное отношение) является частотой Лармора, T — температура и $\alpha = 3D/2$.

В нашей работе [22] было показано, что для любых двух выбранных спинов (A и B) матрица плотности, получаемая путем редуцирования ρ_N по остальным $N - 2$ спином, имеет вид

$$\rho_{AB} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{2}p-iu & \frac{1}{2}p-iu & q-r \\ \frac{1}{2}p+iu & \frac{1}{4} & q+r & \frac{1}{2}p+iu \\ \frac{1}{2}p+iu & q+r & \frac{1}{4} & \frac{1}{2}p+iu \\ q-r & \frac{1}{2}p-iu & \frac{1}{2}p-iu & \frac{1}{4} \end{pmatrix}, \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} p &= \frac{1}{2} \text{th} \frac{\beta}{2} \cos^{N-1}(\alpha t), \\ q &= \frac{1}{8} \text{th}^2 \frac{\beta}{2} [1 + \cos^{N-2}(2\alpha t)], \\ r &= \frac{1}{8} \text{th}^2 \frac{\beta}{2} [1 - \cos^{N-2}(2\alpha t)], \\ u &= \frac{1}{4} \text{th} \frac{\beta}{2} \cos^{N-2}(\alpha t) \sin(\alpha t). \end{aligned} \quad (16)$$

Разложение оператора плотности (15) в ряд по матрицам Паули σ_i^ν ($\nu = x, y, z$ и $i = 1, 2$) приводит ρ_{AB} к блоховскому виду:

$$\rho_{AB} = \frac{1}{4} [1 + 2p(\sigma_1^x + \sigma_2^x) + 4q\sigma_1^x\sigma_2^x + 4r\sigma_1^y\sigma_2^y + 4u(\sigma_1^y\sigma_2^z + \sigma_1^z\sigma_2^y)]. \quad (17)$$

Состояние (15) не имеет X-формы, и средств для расчета его квантового дискорда, насколько известно автору, в литературе нет. Но в этой работе мы даем метод для такого расчета. Наш подход основан прежде всего на выявлении взаимосвязи ЦС- и X-матриц. К рассмотрению данного вопроса мы сейчас и переходим.

4. СВЯЗЬ ЦС- И X-МАТРИЦ

В наиболее общем виде ЦС-матрица четвертого порядка может быть записана как

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 & a_4 \\ a_5 & a_6 & a_7 & a_8 \\ a_8 & a_7 & a_6 & a_5 \\ a_4 & a_3 & a_2 & a_1 \end{pmatrix}, \quad (18)$$

где a_1, \dots, a_8 — любые вещественные или комплексные величины. Подвергнем эту матрицу преобразованию подобия $H_2 A H_2$, в котором

$$H_2 = H \otimes H = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (19)$$

причем

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (20)$$

есть обычное преобразование Адамара. В результате получаем матрицу

$$H \otimes H A H \otimes H = \begin{pmatrix} b_1 & & & b_2 \\ & b_3 & b_4 & \\ & b_5 & b_6 & \\ b_7 & & & b_8 \end{pmatrix}, \quad (21)$$

имеющую X-структуру (напоминающую букву «X»). В равенстве (21) ненулевые матричные элементы b_1, \dots, b_8 равны

$$\begin{aligned} b_1 &= (a_1 + a_2 + a_3 + a_4 + a_5 + a_6 + a_7 + a_8)/2, \\ b_2 &= (a_1 - a_2 - a_3 + a_4 + a_5 - a_6 - a_7 + a_8)/2, \\ b_3 &= (a_1 - a_2 + a_3 - a_4 - a_5 + a_6 - a_7 + a_8)/2, \\ b_4 &= (a_1 + a_2 - a_3 - a_4 + a_5 + a_6 - a_7 - a_8)/2, \\ b_5 &= (a_1 - a_2 + a_3 - a_4 + a_5 - a_6 + a_7 - a_8)/2, \\ b_6 &= (a_1 + a_2 - a_3 - a_4 + a_5 + a_6 - a_7 - a_8)/2, \\ b_7 &= (a_1 + a_2 + a_3 + a_4 - a_5 - a_6 - a_7 - a_8)/2, \\ b_8 &= (a_1 - a_2 - a_3 + a_4 - a_5 + a_6 + a_7 - a_8)/2. \end{aligned} \quad (22)$$

Нетрудно проверить, что, и наоборот, двойное преобразование Адамара (19) любую X-матрицу приводит к ЦС-форме.

Ключевой момент состоит в том, что преобразование (19) является локальным и ортогональным. Применительно к эрмитовым матрицам способность H_2 трансформировать ЦС ↔ X была впервые установлена в препринте автора [38]. Здесь это свойство распространено на ЦС- и X-матрицы общего вида.

Обнаруженная связь ЦС- и X-матриц открывает принципиальную возможность вычисления квантового дискорда для частиц в нанопоре.

5. ВЕЩЕСТВЕННАЯ X-ФОРМА ДВУХЧАСТИЧНОЙ МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ

В этом разделе мы проведем серию локальных унитарных преобразований, которые приведут ЦС-матрицу (15) к виду, пригодному для фактического выполнения расчета дискорда. Поскольку при таких преобразованиях речь будет идти, в сущности, об одной и той же матрице, но лишь в разных представлениях, мы, чтобы не вводить новые обозначения, будем сохранять для нее символ ρ_{AB} .

Прежде всего, применяя метод, развитый в предыдущем разделе, преобразуем ρ_{AB} к X-виду:

$$H \otimes H \rho_{AB} H \otimes H \rightarrow \rho_{AB} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} + p + q & 0 & 0 & -r + 2iu \\ 0 & \frac{1}{4} - q & r & 0 \\ 0 & r & \frac{1}{4} - q & 0 \\ -r - 2iu & 0 & 0 & \frac{1}{4} - p + q \end{pmatrix}, \quad (23)$$

или в форме Блоха

$$\rho_{AB} = \frac{1}{4} [1 + 2p(\sigma_1^z + \sigma_2^z) + 4r\sigma_1^y\sigma_2^y + 4q\sigma_1^z\sigma_2^z - 4u(\sigma_1^x\sigma_2^y + \sigma_1^y\sigma_2^x)]. \quad (24)$$

Видим, что исходное разложение Блоха (17) переходит в (24) в соответствии с тем, что преобразование Адамара (20) трансформирует σ_x -матрицу Паули в σ_z , у матрицы σ_y меняет знак на противоположный и σ_z переводит в σ_x .

Известно (см., например, [14]), что с помощью локальных вращений вокруг оси z на подходящие углы любую X-матрицу плотности можно привести

к сохранению X-формы к вещественному виду, причем с неотрицательными внедиагональными элементами. В нашем случае комплексные части внедиагональных элементов устраняются поворотом,

$$U = \exp\left(-\frac{i\varphi\sigma_z}{2}\right) \otimes \exp\left(-\frac{i\varphi\sigma_z}{2}\right), \quad (25)$$

обоих спинов на один и тот же угол

$$\varphi = -\frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{2u}{r}. \quad (26)$$

В результате

$$U \rho_{AB} U^+ \rightarrow \rho_{AB} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} + p + q & 0 & 0 & 2u \sin 2\varphi - r \cos 2\varphi \\ 0 & \frac{1}{4} - q & r & 0 \\ 0 & r & \frac{1}{4} - q & 0 \\ 2u \sin 2\varphi - r \cos 2\varphi & 0 & 0 & \frac{1}{4} - p + q \end{pmatrix}, \quad (27)$$

т. е. теперь форма Блоха

$$\rho_{AB} = \frac{1}{4} [1 + 2p(\sigma_1^z + \sigma_2^z) + 4(r \sin^2 \varphi + u \sin 2\varphi)\sigma_1^x \sigma_2^x + 4(r \cos^2 \varphi - u \sin 2\varphi)\sigma_1^y \sigma_2^y + 4q\sigma_1^z \sigma_2^z] \quad (28)$$

приобрела нормальный, канонический вид (без перекрестных членов типа xy).

Согласно (16), величина $r \geq 0$. Если другой внедиагональный элемент матрицы (27) отрицателен, то, как нетрудно проверить, его знак легко изменить на обратный преобразованием

$$U_1 = \exp\left(-i\frac{\pi}{4}\sigma_z\right) \otimes \exp\left(i\frac{\pi}{4}\sigma_z\right) =$$

$$\rho_{AB} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} + p + q & 0 & 0 & |2u \sin 2\varphi - r \cos 2\varphi| \\ 0 & \frac{1}{4} - q & r & 0 \\ 0 & r & \frac{1}{4} - q & 0 \\ |2u \sin 2\varphi - r \cos 2\varphi| & 0 & 0 & \frac{1}{4} - p + q \end{pmatrix}. \quad (30)$$

6. КУСОЧНО-АНАЛИТИКО-ЧИСЛЕННАЯ ФОРМУЛА

Итак, с помощью локальных унитарных преобразований общую X-матрицу плотности

$$\rho_{AB} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & u_1 + iu_2 \\ 0 & b & v_1 + iv_2 & 0 \\ 0 & v_1 - iv_2 & c & 0 \\ u_1 - iu_2 & 0 & 0 & d \end{pmatrix} \quad (31)$$

всегда можно привести к вещественному виду с неотрицательными матричными элементами:

$$\rho_{AB} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & |u| \\ 0 & b & |v| & 0 \\ 0 & |v| & c & 0 \\ |u| & 0 & 0 & d \end{pmatrix}. \quad (32)$$

В этих равенствах $a + b + c + d = 1$,

$$a, b, c, d \geq 0, \quad ad \geq u_1^2 + u_2^2, \quad bc \geq v_1^2 + v_2^2 \quad (33)$$

(следствие требования неотрицательной определенности матрицы плотности) и

$$= \begin{pmatrix} i & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & -i \end{pmatrix}. \quad (29)$$

(Аналогичным преобразованием, $\exp(i\pi\sigma_z/4) \otimes \exp(-i\pi\sigma_z/4)$, при необходимости можно селективно воздействовать на знак второго внедиагонального элемента r .) Иначе говоря, после того, как X-матрица плотности приведена к вещественному виду, ее внедиагональные элементы можно заключить под знаки модуля и от этого величина квантовых корреляций в системе не изменится.

В результате для двухчастичной матрицы плотности имеем

$$u = u_1 \cos\left(\arctg \frac{u_2}{u_1}\right) + u_2 \sin\left(\arctg \frac{u_2}{u_1}\right), \quad (34)$$

$$v = v_1 \cos\left(\arctg \frac{v_2}{v_1}\right) + v_2 \sin\left(\arctg \frac{v_2}{v_1}\right). \quad (35)$$

(В этом разделе мы используем величину u , которую не следует путать с парным коррелятором u из соотношений (16) для нанопоры.) Заметим, что исходная X-матрица плотности (31) содержала семь параметров, а в ее вещественной форме (32) их число сократилось до пяти. Это, разумеется, упрощает решение задачи расчета дискорда.

Для вещественной X-матрицы плотности с неотрицательными внедиагональными элементами (в действительности достаточно лишь условия $uv \geq 0$ [39]) измерения, входящие в определение квантового дискорда (10), сводятся к проектированим спина подсистемы B на ось z , причем результаты оптимальных проектирований являются функцией только полярного угла θ (см. [14] и имеющиеся там ссылки). Вследствие этого квантовый дискорд равен

$$Q = S(\rho_B) - S(\rho_{AB}) + \min_{\theta} S_{cond}(\theta), \quad (36)$$

где $\theta \in [0, \pi/2]$ — угол, который образует проектор с осью z при измерении условной энтропии S_{cond} .

Энтропия (в натах) подсистемы B равна

$$S(\rho_B) = -(a+c) \ln(a+c) - (b+d) \ln(b+d), \quad (37)$$

а энтропия объединенной системы AB есть

$$\begin{aligned} S(\rho_{AB}) \equiv S = & -\frac{a+d+\sqrt{(a-d)^2+4u^2}}{2} \ln \frac{a+d+\sqrt{(a-d)^2+4u^2}}{2} - \\ & -\frac{a+d-\sqrt{(a-d)^2+4u^2}}{2} \ln \frac{a+d-\sqrt{(a-d)^2+4u^2}}{2} - \\ & -\frac{b+c+\sqrt{(b-c)^2+4v^2}}{2} \ln \frac{b+c+\sqrt{(b-c)^2+4v^2}}{2} - \\ & -\frac{b+c-\sqrt{(b-c)^2+4v^2}}{2} \ln \frac{b+c-\sqrt{(b-c)^2+4v^2}}{2}. \quad (38) \end{aligned}$$

Квантовая условная энтропия подсистемы A после выполнения измерения на B равна [14]

$$S_{cond}(\theta) = \Lambda_1 \ln \Lambda_1 + \Lambda_2 \ln \Lambda_2 - \sum_{i=1}^4 \lambda_i \ln \lambda_i, \quad (39)$$

где

$$\Lambda_{1,2} = \frac{1}{2} [1 \pm (a-b+c-d) \cos \theta], \quad (40)$$

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2} = & \frac{1}{4} [1 + (a-b+c-d) \cos \theta \pm \\ & \pm \{ [a+b-c-d + (a-b-c+d) \cos \theta]^2 + \\ & + 4(|u|+|v|)^2 \sin^2 \theta \}^{1/2}], \quad (41) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \lambda_{3,4} = & \frac{1}{4} [1 - (a-b+c-d) \cos \theta \pm \\ & \pm \{ [a+b-c-d - (a-b-c+d) \cos \theta]^2 + \\ & + 4(|u|+|v|)^2 \sin^2 \theta \}^{1/2}]. \quad (42) \end{aligned}$$

Условная энтропия $S_{cond}(\theta)$ является, очевидно, дифференцируемой функцией своего аргумента θ . Кроме того, ее производная $S'_{cond}(\theta)$ в граничных точках $\theta = 0$ и $\theta = \pi/2$, как нетрудно убедиться, равна нулю: $S'_{cond}(0) = S'_{cond}(\pi/2) = 0$.

Выражения (37)–(42) позволяют определить неоптимизированный (зависящий от измерения) дискорд как

$$Q(\theta) = S(\rho_B) - S(\rho_{AB}) + S_{cond}(\theta). \quad (43)$$

Абсолютный минимум этой функции может быть в граничных точках ($\theta = 0$ или $\theta = \pi/2$) либо лежать

между этими точками: $\theta \in (0, \pi/2)$. Всего, таким образом, имеются три альтернативы для выбора квантового дискорда:

$$Q = \min\{Q_0, Q_\theta, Q_{\pi/2}\}. \quad (44)$$

Здесь

$$Q_0 \equiv Q(0) = -S - a \ln a - b \ln b - c \ln c - d \ln d, \quad (45)$$

$$\begin{aligned} Q_{\pi/2} \equiv Q(\pi/2) = & -S - \ln 2 - (a+c) \times \\ & \times \ln(a+c) - (b+d) \ln(b+d) - \\ & - \frac{1 + \sqrt{(a+b-c-d)^2 + 4(|u|+|v|)^2}}{2} \times \\ & \times \ln \frac{1 + \sqrt{(a+b-c-d)^2 + 4(|u|+|v|)^2}}{4} - \\ & - \frac{1 - \sqrt{(a+b-c-d)^2 + 4(|u|+|v|)^2}}{2} \times \\ & \times \ln \frac{1 - \sqrt{(a+b-c-d)^2 + 4(|u|+|v|)^2}}{4}. \quad (46) \end{aligned}$$

Равенство (44) обобщает использовавшееся ранее соотношение [5, 8–11]

$$Q = \min\{Q_0, Q_{\pi/2}\}, \quad (47)$$

которое верно, если оптимальной наблюдаемой является или только σ_z , или только σ_x , а ветвь

$$Q_\theta = \min_{\theta \in (0, \pi/2)} Q(\theta) \quad (48)$$

с промежуточным углом измерения (между 0 и $\pi/2$) отсутствует.

Однако, как отмечено во Введении, в работах [12–14] на примерах матриц плотности было показано, что минимум условной энтропии не обязан находиться только на концах отрезка $[0, \pi/2]$, он может лежать и внутри него. Более того, в недавнем препринте автора [40] была найдена подобласть Q_θ у термального квантового дискорда для вполне реалистичной физической модели — XXZ-димера во внешнем поле. Границы подобласти Q_θ определяются из условия расщепления экстремума (минимума) условной энтропии на каждом из концов отрезка ее области определения на два экстремума — максимум и минимум (явление бифуркации) [40]:

$$S''_{cond}(0) = 0 \quad (49)$$

и

$$S''_{cond}(\pi/2) = 0, \quad (50)$$

где для вторых производных из (39)–(42) имеем

$$S''_{cond}(0) = \frac{1}{4}(a-b+c-d) \left(2 \ln \frac{b+d}{a+c} + \ln \frac{ac}{bd} \right) + \frac{1}{4}(a-b-c+d) \ln \frac{ad}{bc} - \frac{1}{2}(|u|+|v|)^2 \times \left(\frac{1}{a-c} \ln \frac{a}{c} + \frac{1}{b-d} \ln \frac{b}{d} \right) \quad (51)$$

и

$$S''_{cond}(\pi/2) = (a-b+c-d)^2 - \frac{1}{2(1+r)} [a-b+c-d + \frac{1}{r}(a+b-c-d)(a-b-c+d)]^2 - \frac{1}{2(1-r)} [a-b+c-d - \frac{1}{r}(a+b-c-d)(a-b-c+d)]^2 + \frac{1}{2r} \{ (a-b-c+d)^2 [1 - \frac{1}{r^2}(a+b-c-d)^2] - 4(|u|+|v|)^2 \} \times \ln \frac{1-r}{1+r}, \quad (52)$$

причем здесь

$$r = [(a+b-c-d)^2 + 4(|u|+|v|)^2]^{1/2} \quad (53)$$

(это r тоже не надо путать с r из соотношений (16) для нанополости).

Таким образом, при расчете квантового дискорда X-состояния необходимо использовать кусочно-аналитико-численную формулу (44) и, решая уравнения (49)–(53), находить границы подобласти Q_θ . Если обе границы совпадают между собой, то подобласть Q_θ отсутствует (вырождается в точку), и справедлива кусочно-аналитическая формула (47). Могут быть также случаи, когда дискорд определяется одной ветвью Q_0 или $Q_{\pi/2}$. Такая ситуация имеет место, например, для термализованного димера Гейзенберга в отсутствие внешнего магнитного поля [41].

7. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Применяя развитую выше общую схему к задаче о газе в нанопоре, для Q_0 и $Q_{\pi/2}$ находим (теперь в битах, чтобы сохранить преемственность с результатами нашей работы [22]):

$$Q_0 = -S - \left(\frac{1}{4} + p + q \right) \log_2 \left(\frac{1}{4} + p + q \right) - 2 \left(\frac{1}{4} - q \right) \log_2 \left(\frac{1}{4} - q \right) - \left(\frac{1}{4} - p + q \right) \log_2 \left(\frac{1}{4} - p + q \right), \quad (54)$$

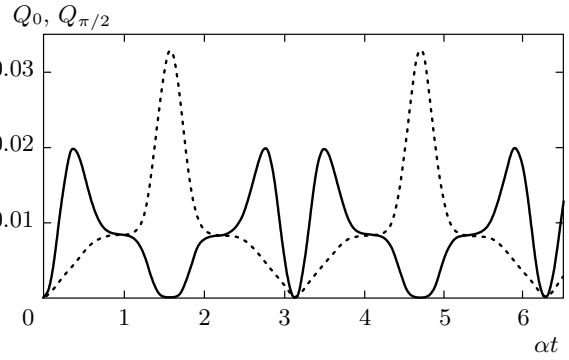


Рис. 1. Зависимости от времени для Q_0 (сплошная кривая) и $Q_{\pi/2}$ (пунктирная) в нанопоре с $N = 10$ и $\beta = 1$

$$Q_{\pi/2} = -S - \left(\frac{1}{2} + p \right) \log_2 \left(\frac{1}{2} + p \right) - \left(\frac{1}{2} - p \right) \times \log_2 \left(\frac{1}{2} - p \right) - D_1 \log_2 D_1 - D_2 \log_2 D_2, \quad (55)$$

где

$$D_{1,2} = \frac{1}{2} \times \left[1 \pm 2[p^2 + (r + |2u \sin 2\varphi - r \cos 2\varphi|)^2]^{1/2} \right]. \quad (56)$$

В выражениях (54) и (55) S — по-прежнему энтропия матрицы плотности ρ_{AB} для пары частиц, но теперь в нанопоре:

$$S = - \left(\frac{1}{4} + q + \sqrt{p^2 + u^2} \right) \log_2 \left(\frac{1}{4} + q + \sqrt{p^2 + u^2} \right) - \left(\frac{1}{4} + q - \sqrt{p^2 + u^2} \right) \log_2 \left(\frac{1}{4} + q - \sqrt{p^2 + u^2} \right) - \left(\frac{1}{4} - q + r \right) \log_2 \left(\frac{1}{4} - q + r \right) - \left(\frac{1}{4} - q - r \right) \log_2 \left(\frac{1}{4} - q - r \right). \quad (57)$$

На рис. 1 показано поведение величин Q_0 и $Q_{\pi/2}$ для нанопоры с $N = 10$ и $\beta = 1$ в зависимости от безразмерного времени at . Обе функции являются периодическими с периодом, равным π . На участке $0 < at < \pi$ кривые пересекаются в точках $at_1 = 0.98486$ и $at_2 = 2.15673$. Решение уравнений (49)–(53) для границ подобласти Q_θ показывает, что в данном случае границы совпадают между собой. Следовательно, для дискорда в нанопоре вблизи пересечения ветвей $Q_0(at)$ и $Q_{\pi/2}(at)$ не возникают окрестности, где бы условная энтропия $S_{cond}(\theta)$ имела минимум внутри промежутка $(0, \pi/2)$. Поведение условной энтропии при приближении и переходе момента времени t_1 представлено на рис. 2. Из

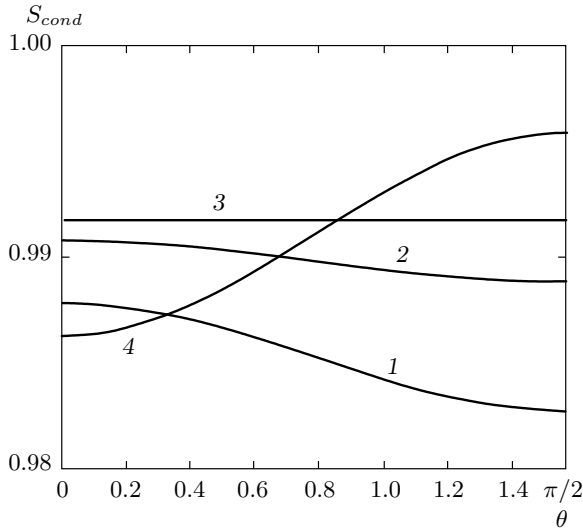


Рис. 2. Изменение формы $S_{cond}(\theta)$ для нанопоры с $N = 10$ и $\beta = 1$ в моменты времени $\alpha t = 0.6$ (1), 0.7 (2), 0.98486 (3), 1.3 (4)

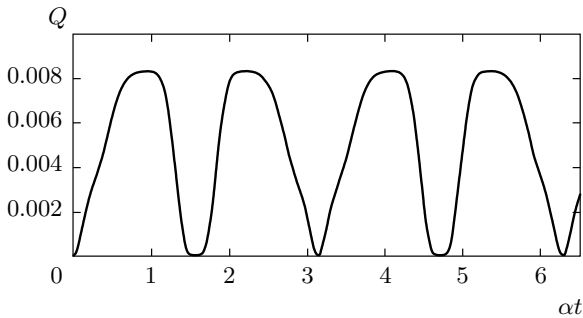


Рис. 3. Процесс эволюции квантового дискорда в нанопоре при $N = 10$ и $\beta = 1$

рисунка видно, что при подходе к точке внезапного перехода (эффект “sudden transition”) дискорда с одной ветви ($Q_{\pi/2}$) на другую (Q_0) кривая $S_{cond}(\theta)$ начинает уплощаться, а в сам момент времени t_1 становится прямой. При этом оптимальный угол измерения θ меняется с $\pi/2$ на произвольный угол $\theta \in [0, \pi/2]$ (полностью изотропное состояние). С дальнейшим сколь угодно небольшим увеличением времени минимум условной энтропии переходит к углу $\theta = 0$ (кривая 4 на рис. 2), и оптимальной наблюдаемой вместо σ_x становится σ_z . В момент времени t_2 происходит обратный переход оптимального угла измерения с $\theta = 0$ на $\theta = \pi/2$. И дальше идет попеременное чередование оптимальных измерений.

На рис. 3 показано поведение квантового дискорда $Q(\alpha t)$ для обсуждаемого случая нанопоры с

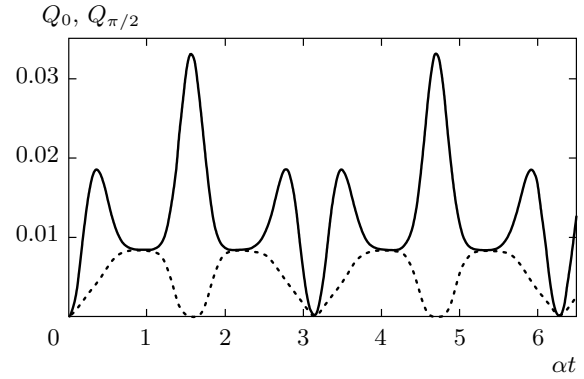


Рис. 4. Поведение Q_0 (сплошная кривая) и $Q_{\pi/2}$ (пунктирная) в нанопоре с $N = 11$ и $\beta = 1$

$N = 10$ и $\beta = 1$. Здесь для нахождения дискорда служит формула (47). Из рисунка видно, что квантовые корреляции после подачи на систему $\pi/2$ -импульса в начальный момент времени $t = 0$ отсутствуют (состояние (12) полностью факторизовано), но сразу же начинают возрастать, достигают максимального значения 0.008342 , а затем гаснут и тут же возрождаются вновь. Процесс повторяется. Как сказано выше, периодические появления и исчезновения до нуля квантового дискорда были названы в работе [22] его мерцаниями. Разложение $Q(\alpha t)$ в ряд Фурье дает спектр мерцаний.

Отметим следующее. Из соотношений (16) и представленных в этом разделе выражений для Q_0 и $Q_{\pi/2}$ следует, что в моменты времени, когда $Q \neq 0$, величина квантового дискорда в термодинамическом пределе $N \rightarrow \infty$ равна (см. также [22])

$$Q = \frac{1}{4} \{ (1+8q) \log_2(1+8q) + (1-8q) \log_2(1-8q) \} - \frac{1+4q}{2} \log_2(1+4q) - \frac{1-4q}{2} \log_2(1-4q), \quad (58)$$

причем теперь

$$q = \frac{1}{8} \operatorname{th}^2 \frac{\beta}{2}. \quad (59)$$

Как видим, здесь дискорд зависит лишь от приведенной температуры. Положим $\beta = 1$. Тогда из (58) и (59) получаем $Q = 0.0083358 \dots$. Возвращаясь снова к рис. 3, замечаем, что величина дискорда в максимуме близка к этому значению, несколько превышая его.

Изучим теперь особенности квантового дискорда в спиновых парах при нечетном числе частиц в нанопоре. Пусть $N = 11$, а обратная температура пусть по-прежнему остается равной $\beta = 1$. На рис. 4

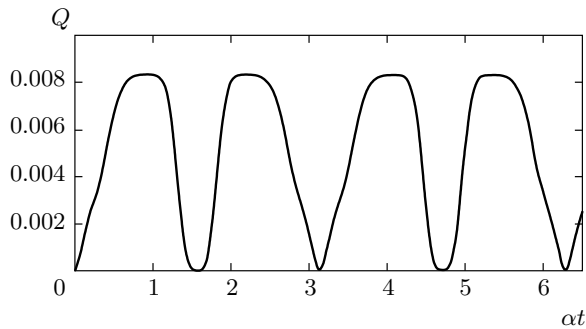


Рис. 5. Эволюция квантового дискорда в нанопоре при $N = 11$ и $\beta = 1$

проиллюстрировано изменение во времени величин Q_0 и $Q_{\pi/2}$ — кандидатов на квантовый дискорд. При $\alpha t = \pi l$ ($l = 0, 1, 2, \dots$) как Q_0 , так и $Q_{\pi/2}$ обращаются в нуль. С другой стороны, кривые $Q_0(\alpha t)$ и $Q_{\pi/2}(\alpha t)$ теперь уже не только не пересекаются, но даже не касаются друг друга в точках, где $Q_{\pi/2}(\alpha t)$ достигает своих наибольших значений. Это показывает дополнительный анализ с более высоким разрешением, чем то, которое обеспечивает рис. 4. Подобласти Q_θ здесь снова нет. В результате при нечетном N квантовый дискорд равен $Q = Q_{\pi/2}$, т. е. так же, как и при четном N , выражается в замкнутом аналитическом виде.

Рисунок 5 показывает динамику дискорда при нечетном числе частиц в нанопоре. Любопытно, что, хотя схемы измерений дискорда при четном и нечетном N принципиально отличаются друг от друга (при четном количестве частиц в системе углы измерений нужно попеременно чередовать между собой, тогда как при нечетном N угол оптимального измерения все время остается одним и тем же), величины квантовых дискордов при N и $N+1$ практически совпадают. В этом легко убедиться, сравнивая рис. 3 и 5.

Обсудим поведение квантового дискорда при большом числе молекул в нанопоре. На рис. 6 и 7 показан временной ход дискорда при $N = 20$ и $N = 10^3$. Видим, что с ростом N максимумы кривых становятся плоскими и их величины приближаются к термодинамическому пределу (58). При этом относительные протяженности горизонтальных плато (областей насыщения) увеличиваются, а промежутки времени между ними, когда происходит спад корреляций до нуля, сокращаются. В пределе $N \rightarrow \infty$ будем, очевидно, иметь постоянный квантовый дискорд (58), который, однако, периодически на мгновение полностью исчезает (меркнет). Заметим, что

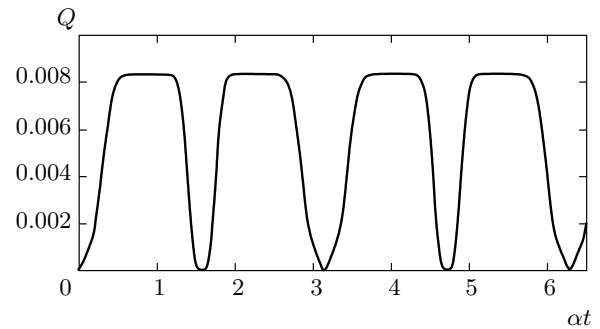


Рис. 6. Квантовый дискорд в зависимости от времени в нанопоре с $N = 20$ и $\beta = 1$

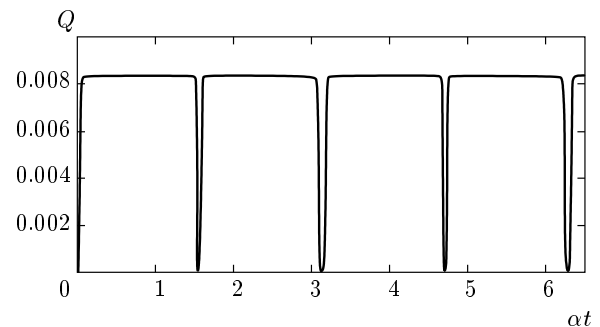


Рис. 7. Поведение квантового дискорда в нанопоре с $N = 1000$ и $\beta = 1$

период функции $Q(\alpha t)$ в таком пределе уменьшается в два раза: с π до $\pi/2$.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе изучена динамика квантово-информационной корреляции (дискорда) для пар ядерных спинов $1/2$ частиц газа или жидкости в замкнутой нанопоре в присутствии сильного магнитного поля. Динамика инициируется подачей на образец, находящийся в ЯМР-спектрометре, резонансного $\pi/2$ -импульса. Показано, что после этого в системе возникают колебания корреляции, происходящие между нулем и максимальным значением, которое при большом числе N частиц в нанопоре определяется температурой, нормированной на величину внешнего магнитного поля. При $N \rightarrow \infty$ колебания носят характер пульсаций (мерцаний) с полным исчезновением корреляции на короткое время и быстрым ее возвратом на стационарный уровень. Период мерцаний дискорда определяется эффективной константой взаимодействия спинов, которая, в свою очередь, зависит от размера, формы и ориента-

ции нанопор в образце. Величина дискорда на стационарных участках целиком контролируется нормированной температурой. Наконец, отношение протяженности стационарного участка к периоду колебаний дискорда зависит от N . Таким образом, исследование поведения квантового дискорда позволяет делать выводы об основных параметрах системы.

Физическая задача о частицах в нанопоре стимулировала развитие в представленной работе методов расчета квантового дискорда ЦС- и Х-состояний. Эти методы могут найти приложения и в других областях, например, в квантовой теории информации.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 13-03-12418, 13-03-00017), программы № 8 Президиума РАН и программы № 14-042 ОХНМ РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. L. C. Céleri, J. Maziero, and R. M. Serra, *Int. J. Quant. Inf.* **9**, 1837 (2011).
2. K. Modi, A. Brodutch, H. Cable et al., *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1655 (2012).
3. С. М. Алдошин, Э. Б. Фельдман, М. А. Юрищев, *ФНТ* **40**, 5 (2014); S. M. Aldoshin, E. B. Fel'dman, and M. A. Yurishchev, *Low Temp. Phys.* **40**, 3 (2014).
4. Y. Huang, *New J. Phys.* **16**, 033027 (2014).
5. S. Luo, *Phys. Rev. A* **77**, 042303 (2008).
6. T. Yu and J. H. Eberly, *Quant. Inf. Comput.* **7**, 459 (2007).
7. A. R. P. Rau, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 0412002 (2009).
8. M. Ali, A. R. P. Rau, and G. Alber, *Phys. Rev. A* **81**, 042105 (2010); Erratum in *Phys. Rev. A* **82**, 069902(E) (2010).
9. F. F. Fanchini, T. Werlang, C. A. Brasil et al., *Phys. Rev. A* **81**, 052107 (2010).
10. B. Li, Z.-X. Wang, and S.-M. Fei, *Phys. Rev. A* **83**, 022321 (2011).
11. B.-F. Ding, X.-Y. Wang, and H.-P. Zhao, *Chin. Phys. B* **20**, 100302 (2011).
12. X.-M. Lu, J. Ma, Z. Xi, and X. Wang, *Phys. Rev. A* **83**, 012327 (2011).
13. Q. Chen, C. Zhang, S. Yu et al., *Phys. Rev. A* **84**, 042313 (2011).
14. Y. Huang, *Phys. Rev. A* **88**, 014302 (2013).
15. J. Baugh, A. Kleinhammes, D. Han et al., *Science* **294**, 1505 (2001).
16. W. S. Warren, *Science* **294**, 1475 (2001).
17. E. B. Fel'dman and M. G. Rudavets, *ЖЭТФ* **125**, 233 (2004).
18. A. V. Fedorova, E. B. Fel'dman, and D. E. Polianczyk, *Appl. Magn. Reson.* **35**, 511 (2009).
19. J. Jeener, *J. Chem. Phys.* **134**, 114519 (2011).
20. E. B. Fel'dman, G. B. Furman, and S. D. Goren, *Soft Matter* **8**, 9200 (2012).
21. M. G. Rudavets, *J. Magn. Reson.* **230**, 10 (2013).
22. E. B. Fel'dman, E. I. Kuznetsova, and M. A. Yurishchev, *J. Phys. A: Math. Theor.* **45**, 475304 (2012).
23. D. Z. Rossatto, T. Werlang, E. I. Duzzioni, and C. J. Villas-Boas, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 153601 (2011).
24. J. R. Weaver, *Amer. Math. Mon.* **92**, 711 (1985).
25. Х. Д. Икрамов, *Ж. вычислит. матем. и матем. физ.* **33**, 620 (1993).
26. A. Andrew, *SIAM Rev.* **40**, 697 (1998).
27. Е. С. Вентцель, *Теория вероятностей*, Наука, Москва (1964).
28. В. П. Чистяков, *Курс теории вероятностей*, Наука, Москва (1982).
29. Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике для научных работников и инженеров*, Наука, Москва (1984).
30. К. Шеннон, *Работы по теории информации и кибернетике*, Изд-во иностр. лит., Москва (1963).
31. Р. Л. Стратонович, *Теория информации*, Советское радио, Москва (1975).
32. В. В. Панин, *Основы теории информации*, БИНОМ. Лаборатория знаний, Москва (2007).
33. Э. М. Габидулин, Н. И. Пилипчук, *Лекции по теории информации*, МИФИ, Москва (2007).
34. А. С. Холево, *Введение в квантовую теорию информации*, МЦНМО, Москва (2003).
35. А. С. Холево, *Квантовые системы, каналы, информация*, МЦНМО, Москва (2010).
36. М. Нильсен, И. Чанг, *Квантовые вычисления и квантовая информация*, Мир, Москва (2006).
37. H. Ollivier and W. H. Zurek, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 017901 (2002).
38. M. A. Yurishchev, arXiv:1302.5239 [quant-ph].
39. L. Ciliberti, R. Rossignoli, and N. Canosa, *Phys. Rev. A* **82**, 042316 (2010).
40. M. A. Yurischev, arXiv:1404.5735 [quant-ph].
41. M. A. Yurishchev, *Phys. Rev. B* **84**, 024418 (2011).