

**ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ**

На правах рукописи

Абгарян  
Ваагн Саркисович

**КВАНТОВАЯ ЗАПУТАННОСТЬ  
В СПИН-1 МАЛОЧАСТИЧНЫХ КЛАСТЕРАХ  
И ОДНОМЕРНЫХ ЦЕПОЧКАХ**

Специальность: 01.04.02  
“Теоретическая физика”

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
доктор физико-математических наук  
Ананикян Н.С.

Дубна 2016

# Оглавление

Введение	4
<b>1 Квантовая запутанность двух- и трехчастичных кластеров</b>	<b>14</b>
1.1 Квантовая запутанность: определения и количественные характеристики . . . . .	15
1.2 Магнитные свойства и квантовая отрицательность двух- и трех- частичных кластеров . . . . .	18
1.2.1 Изотропная модель Гейзенберга для малочастичных кла- стеров . . . . .	18
1.2.2 Запутанность и магнитные свойства спин-1 изотропной модели Гейзенберга на малочастичных кластерах . . . . .	19
1.2.3 Запутанность и магнитные свойства спин-1 анизотроп- ной модели Гейзенберга . . . . .	33
1.3 Выводы . . . . .	39
<b>2 Спин-1/2-1 модель Изинга-Гейзенберга на даймонд- цепочке</b>	<b>42</b>
2.1 Определение смешанной модели на даймонд-цепочке . . . . .	43
2.1.1 Точное решение смешанной модели . . . . .	44
2.2 Магнитные свойства смешанной модели . . . . .	46
2.3 Запутанность смешанной спин- $\frac{1}{2}$ -1 даймонд-цепочки . . . . .	49
2.4 Выводы . . . . .	55
<b>3 Модель Изинга-Гейзенберга со спином-1 на даймонд- цепочке</b>	<b>57</b>
3.1 Определение модели со спином-1 на даймонд- цепочке . . . . .	58

3.2	Точное решение модели со спином-1 на даймонд- цепочке . . . .	59
3.3	Квантовая запутанность в трансфер- матричном подходе . . . .	61
3.4	Основные состояния модели Изинга- Гейзенберга со спином-1 . . . .	63
3.5	Магнитные плато модели Изинга-Гейзенберга со спином-1 . . . .	68
3.6	Качественное описание процесса намагничивания $[Ni_3(fum)_2 - (\mu_3 - OH)_2(H_2O)_4]_n \cdot (2H_2O)_n$ . . . . .	70
3.7	Квантовая запутанность в зависимости от температуры и маг- нитного поля . . . . .	72
3.8	Выводы . . . . .	75
	<b>Заключение</b>	<b>77</b>
	<b>Список литературы</b>	<b>80</b>

# Введение

В 1935 году вышла в свет работа Эйнштейна, Подольского и Розена (ЭПР) [1], в которой, опираясь на здравомысленный с точки зрения классической физики принцип о невозможности воздействия измерения над одной подсистемой на определение состояния второй подсистемы, не взаимодействующей с первой, оспаривалась полнота квантовой механики. Действительно, одним из постулатов квантовой механики является утверждение о том, что волновая функция даёт максимально полное описание физической реальности. С другой стороны, если рассмотреть двухкомпонентную систему, чьи части находились во взаимодействии в некоем интервале времени, то, зная начальные состояния компонент, исходя из уравнения Шредингера, можно предсказать состояние системы после завершения взаимодействия, в то время, как состояния самих компонент вычислить невозможно. Однако состояние системы можно разложить по базису собственных функций оператора, соответствующего некоей физической величине, относящейся к первой подсистеме, в этом случае коэффициенты разложения будут зависеть лишь от степеней свободы второй подсистемы. Проведя измерение физической величины, по базису которой было проведено разложение, происходит редукция волнового пакета и первая подсистема после измерения находится в состоянии, соответствующем полученному собственному значению. В то время, как вторая подсистема находится в состоянии, описываемом волновой функцией, равной коэффициенту состояния первой подсистемы в разложении состояния полной системы. Однако выше указанное разложение не является единственно возможным, можно выбрать другую физическую величину, соответствующую первой компоненте, и в этом случае как функции разложения, так и коэффи-

циенты могут поменяться. В частности, если два оператора, соответствующие физическим величинам, не коммутируют, то после измерения (редукции волнового пакета) вторая система будет находиться в разных (несовместимых) состояниях. Получается, что после редукции можно получить состояния, описываемые несовместимыми волновыми функциями, которые по вышеуказанному постулату дают максимальную информацию. Это, в свою очередь, означает мгновенное распространение влияния измерения над первой подсистемой на вторую, несмотря на их пространственную разделённость и отсутствие между ними взаимодействия. Действительно, вторая подсистема не может «знать», измерение какой физической величины собирается выполнить наблюдатель над первой подсистемой, в то время, как уже сделанное над первой подсистемой измерение мгновенно распространится на вторую через редукцию волнового пакета. Из этого, кажется, парадоксального результата и аргументов ЭПР следовала бы неполнота квантовой механики. Одним из решений вышеуказанных «парадоксальных» результатов являлась бы теория скрытых переменных, которая подразумевала бы присутствие добавочных степеней свободы, через которые предопределяется и выполняется скоррелированность степеней свободы, что, в свою очередь, решило бы проблему как мгновенной редукции, так и неполноту описания через волновые функции. Через несколько месяцев после выхода в свет работы ЭПР была опубликована статья Шредингера [2], в которой впервые вышеописанные неклассические корреляции получили название «запутанность» (entanglement в английском оригинале).

Какой точки зрения придерживаться - Эйнштейновской о неполноте квантовой механики и необходимости введения скрытых переменных или о полноте квантовой механики, в которой квантовая запутанность выступает как некое отражение действующих в микромире законов - долгое время оставалось делом мировоззрения каждого отдельного физика из-за отсутствия экспериментально проверяемых расхождений в предсказаниях этих двух точек зрения. Однако в 1964-ом году Беллом было показано [3], что ни одна локальная теория скрытых переменных не может повторить (в пределе пре-

небрежения скрытых переменных) статистические предсказания квантовой механики. Таким образом, было показано, что невозможно преодолеть нелокальности квантовой механики путём построения теории скрытых переменных, для которой квантовая механика выступала бы предельным случаем с редуцированной классической информацией. С другой стороны, полученные в [3] ограничения на вероятности исходов измерений (для обзора см. [4]) дали возможность для экспериментальной проверки проявлений существования или скрытых переменных, или неклассических корреляций (квантовой запутанности). В частности, в 1982 году группой Аспекта было экспериментально показано [5] нарушение белловских неравенств, что с достаточно большой достоверностью опровергает существование скрытых переменных.

Наряду с фундаментальным интересом, новым прикладным стимулом для изучения квантовой запутанности явилось развитие таких направлений, как теория квантовой информации [6], квантовая телепортация [9, 10], плотное кодирование [7, 8], квантовая криптография [11, 12]. Также, будучи характеристикой чисто квантовых корреляций, не имеющих классических аналогов, предполагается, что квантовая запутанность играет ключевую роль в понимании поведения сильно коррелированных квантовых систем и коллективных квантовых явлений в отдельных многочастичных спиновых и фермионных решеточных моделях [13–15]. Изучение критических явлений является одной из основных задач статистической физики. Неотъемлемой частью данного направления современной физики является теория квантовых фазовых переходов (КФП) [16]. Недавние исследования указывают на связь между запутанностью в многочастичных системах и присутствием квантовых фазовых переходов и фазовых сепараций [16–21].

Двухчастичная запутанность в системе нескольких спинов часто может демонстрировать общие свойства запутанности спинов в больших термодинамических системах. Более того, такая связь может быть использована для раскрытия основополагающих свойств основных состояний и термодинамики молекулярных магнитов, спариваний электронов и возможной сверхпроводимости в конечно-размерных кластерах и в больших макроскопических

системах [13, 22, 23].

В то время, как запутанность в системах со спином  $\frac{1}{2}$  является хорошо изученной, понимание общих свойств запутанности и её связи с квантовыми переходами в спин-1 системах до настоящего момента нельзя считать удовлетворительной. Последнее обусловлено как сложностью таких систем, так и отсутствием технически легко изучаемых количественных характеристик запутанности для систем с высокими спинами.

Следует так же отметить, что возможность реализации кутритных (трехуровневых) элементов не исчерпывается спин-1 частицами (можно отметить, к примеру, бифотонную кутритную систему [24–26]).

Основной задачей данной диссертации является проведение изучения квантовой запутанности в точно решаемых спин-1 моделях для дальнейшего сравнения эволюции последнего с изменениями параметров порядка при переходах, индуцированных внешними параметрами (магнитного поля, одноионной анизотропии и так далее). Мы также заинтересованы в тепловом поведении квантовой запутанности, поскольку оно даёт представление о распространении чисто квантовых корреляций на конечно температурную область.

*В первой главе* данной диссертации ставятся две основные задачи. Первая - изучение квантовой запутанности в двух- и трехчастичных кластерах частиц со спином 1, взаимодействующих гейзенбергоподобным гамильтонианом с билинейным и биквадратным членами в присутствии однородного магнитного и внутрикристаллического продольного полей (иными словами, одноионной анизотропии), в основном состоянии и при конечных температурах [27, 28]. В качестве количественной характеристики квантовой запутанности была выбрана отрицательность [29]. Вторая - изучение поведения квантовой запутанности при различного рода переходах между качественно отличающимися состояниями с различными параметрами порядка в кластерах минимальных размеров [30]. Такого рода переходы, не являясь квантовыми фазовыми переходами (в силу конечности системы), тем не менее перерастают в КФП с увеличением системы. В этом отношении к ним можно относиться как к неким «зародышам» КФП. Изучение изменений квантовой запутанно-

сти при таких переходах даёт грубое описание бесконечных систем при КФП.

Классический аналог изучаемой в первой главе модели - модель спин-1 Блюма-Эмери-Грифитса (БЭГ) с дипольным и квадрупольным обменными взаимодействиями - является успешной упрощённой моделью для описания фазовых сепараций, трикритических и  $\lambda$ -точек в смеси  ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$  [31]. Точные выражения для  $\lambda$ -линий (геометрических наборов  $\lambda$ -точек) в различных двумерных БЭГ-моделях были получены в работах [32, 33], в то время, как трикритическое поведение на рекурсивных решетках было изучено в [34–39]. В дополнение к вышесказанному, нули статистической суммы Янга-Ли для системы частиц со спином 1 в комплексной плоскости магнитного поля [40, 41] указывают на присутствие тройной точки [42, 43]. С другой стороны, в литературе проведены исследования также квантовых критических и трикритических точек для тяжёлых фермионов и органических проводников, используя феноменологию, разложение Гинзбурга-Ландау-Вильсона и метод Монте-Карло [44, 45].

Решение одномерной модели Гейзенберга методом анзаца Бете [46], распространённое на высокие спины [47–49], применимое лишь для отдельного полиномиального вида гамильтониана, указывает на характеристическую спиновую щель и богатую термодинамическую фазовую диаграмму. Тем не менее, общее решение методом анзаца Бете для одномерной модели, применимое для специфичного набора параметров, входящих в интегрируемый гамильтониан, трудно анализируем без прибегания к различного рода приближениям, в особенности, при конечных температурах. В противопоставление этому, точные расчёты запутанности в конечных кластерах дают перспективную альтернативу для понимания общих особенностей двухчастичных и фрустрированных систем при конечных температурах [50]. Квантовые и термодинамические фазовые диаграммы, а также склонность к запутыванию для малочастичных кластеров могут давать достаточно хорошее описание фазовых переходов, происходящих в некоторых макроскопических системах. Так, димеры и четверёхчастичные кластеры являются элементарными сборочными блоками или прототипами двухчастичных решёток, в то время, как



трёхчастичные кластеры выступают в качестве элементарных блоков для типичных фрустрированных (треугольных) решёток. Тем не менее, в связи с отсутствием хорошо поддающейся расчёту количественной характеристики запутанности для высоких спинов, изучение квантовой запутанности даже для конечных кластеров до сих пор в основном было ограничено изучением спин- $\frac{1}{2}$  гейзенберговской и фермионной хаббардовской моделями [51, 52]. В то же время эксперименты с холодными бозонными атомами в оптической решётке с одним атомом в каждой яме открывают новое направление изучения КФП и сильно коррелированных атомных газов на оптической решётке посредством спин-1 модели Гейзенберга и модели Бозе-Хаббарда на малочисленных кластерах [53, 54].

Количественная характеристика запутанности - отрицательность - была использована для изучения поведения запутанности в модели Гейзенберга с открытыми граничными условиями в [55], некоторые аналитические и численные результаты для фазовых диаграмм и запутанности с билинейным и биквадратным взаимодействиями для спин-1 модели Гейзенберга были представлены в работах [56, 57]. Тепловая запутанность спинов в терминах отрицательности для анизотропной  $XX$  модели Гейзенберга для двухчастичных и димеризованных систем была изучена в работах [58–60] как в ферромагнитном, так и антиферромагнитном обменном взаимодействиях. Квантовая запутанность двух спинов, взаимодействующих билинейно-биквадратным образом, в магнитном поле без одноионной анизотропии была изучена в [61].

В первой главе диссертации, используя отрицательность (как количественную характеристику запутанности), проводятся аналитические изучения запутанности спин-1 модели Гейзенберга с билинейным и биквадратным взаимодействиями и с одноионной анизотропией. Точное решение модели позволяет также провести желаемое сравнение плато и скачков запутанности с качественными изменениями в параметрах порядка системы. Спин-1 бозонная модель Хаббарда при определённых условиях может быть отображена в спин-1 модель Гейзенберга, в связи с чем наши результаты могут быть полезны также для анализа классических и квантовых фазовых переходов

из состояния диэлектрика Мотта в сверхтекучее состояние в спин-1 Бозе-Хаббардоподобных моделях при половинном заполнении [53].

*Во второй главе* диссертации мы ставим задачу изучения магнитных свойств и изменения квантовой запутанности при различных магнитных и квадрупольных переходах в квазиодномерной спин- $\frac{1}{2}$ -1 смешанной модели Изинга-Гейзенберга на даймонд-цепочке [62]. Несмотря на определённую упрощённость моделей на даймонд-цепочках, асимметричная версия спин- $\frac{1}{2}$  модели Изинга-Гейзенберга на даймонд-решётке в приближении взаимодействия частиц, следующих за ближайшими соседями [63], количественным образом описывает некоторые магнитные особенности естественного минерала азурита [64–70].

Даймонд-цепочки (в особенности цепочки со смешанными целыми и полуцелыми спинами) имеют богатую фазовую диаграмму основного состояния, проявляя, в частности, состояния Халдейна и кластеризованные состояния нескольких спинов, в которых состояние цепочки выступает как прямое умножение локальных кластерных состояний [71, 72]. За последние несколько лет проводились интенсивные изучения моделей на даймонд-цепочках, например, в [73] была проанализирована возможность проявления локализованных магнетонных возбуждений, в [74, 75] были проведены изучения магнитных плато, влияние многоспиновых обменных взаимодействий было изучено в [76], в [77] изучается влияние анизотропии Дзялошинского-Мории на намагничивание цепочки. В работе [78] было проведено изучение основного состояния, магнитных плато и теплоёмкости, изучаемой во второй главе модели. В связи с треугольным расположением узлов в даймонд-блоке для даймонд-декорированных решёток важными также становятся эффекты фрустрации, в особенности при антиферромагнитном взаимодействии спинов. Различные фрустрированные рекуррентные решётки с даймонд-декорацией изучались в [79, 80]. К сожалению, в случае общего гейзенберговского вида гамильтониана взаимодействия спинов на даймонд-решётке модель не решается, тем не менее можно рассматривать различные точно решаемые упрощения модели [81–83].

Среди прочих особенностей, проявляемых точно решаемыми моделями

на даймонд-решетках, в случае модели со спином  $\frac{1}{2}$  можно отметить существование низкотемпературного магнитного плато на одной-трети значения насыщения (отражающее поведение азурита) [82], сильно не монотонное поведение корреляционных функций в зависимости от температуры [89], увеличенную скорость магнитного охлаждения [90], интересное распределение нулей статистической суммы [91], плато экспонент Ляпунова [92], не тривиальное поведение зависимости запутанности от магнитного поля [93,94]. Ожидается, что ещё более разнообразными могут оказаться магнитные свойства моделей Изинга-Гейзенберга на даймонд-цепочке, учитывающие асимметрию взаимодействия [84, 85], четырёхспиновое обменное взаимодействие [86, 87] или взаимодействия между следующими за ближайшими соседями [63].

Согласно критерию Ошикавы-Яманаки-Афлека [95, 96], промежуточные плато намагниченности квантовых спиновых цепочек необходимым образом должны удовлетворять условию  $p(S - m) = \text{целое число}$ , где  $p$  - период основного состояния,  $S$ -полный спин, а  $m$ -намагниченность на элементарную ячейку цепочки. Вследствие этого ограничения, симметричная версия модели Изинга-Гейзенберга со спином  $\frac{1}{2}$  может проявлять промежуточные плато намагниченности лишь на одной-трети значения насыщения, в то время, как модель, изучаемая во второй главе данной диссертации, - на одной- и трех-пятых значения насыщения. Однако обобщённые модели Изинга-Гейзенберга, учитывающие многоспиновые обменные взаимодействия, асимметрию во взаимодействии или дуальные взаимодействия, могут привести к изменению трансляционной симметрии, удвоению периода основного состояния и, следовательно, к появлению ещё более разнообразных плато. Так, в работе [97] было показано, что включение гексомерного взаимодействия приводит для спин- $\frac{1}{2}$  модели к появлению промежуточных плато на одной- и двух-третях значения насыщения, асимметрия взаимодействий вдоль даймонд-цепочки - к возможности формирования плато на нуле [85], в то время, как включение четырёх-спинового обмена - к появлению как плато на нуле, так и к промежуточному плато на двух-третях значения насыщения [63, 86, 87].

Наша заинтересованность в изучении смешанной спин- $\frac{1}{2}$ -1 модели Изинга-

Гейзенберга обусловлена следующими факторами. Первое - возможность точного решения и постройки точного основного состояния, второе - происходящая кластеризация основного состояния, что даёт возможность точно рассчитать запутанность через меру отрицательности, существование (при определённой параметризации биквадратного взаимодействия гейзенберговских спинов) двух параметров порядка: намагниченности и квадрупольного момента и, наконец, изобилие разнообразных квантовых фаз, что даёт возможность для подробного изучения эволюции запутанности при переходах между ними.

*В третьей главе* диссертации проводится изучение спин-1 симметричной модели Изинга-Гейзенберга на даймонд-решётке при билинейном взаимодействии и одноионной анизотропии как изинговских, так и гейзенберговских спинов [88]. В главе приводится точное решение модели. Здесь анализируются все доступные основные состояния, формирования магнитных плато и плато квадрупольного момента изинговской подрешетки, дополняя результаты [98]. В третьей главе также анализируется процесс намагничивания отдельной цепочки гомометаллического соединения  $[Ni_3(fum)_2 - (\mu_3 - OH)_2(H_2O)_4]_n \cdot (2H_2O)_n$  [116]. Указанная структура является трёхмерным набором квазиодномерных взаимодействующих ферромагнитных даймонд-цепочек, в которых узлы взаимодействуют с димерами антиферромагнитным образом, в то время, как взаимодействие в самом димере осуществляется ферромагнитным образом. Введение одноионной анизотропии изинговских спинов позволяет качественно воспроизвести все наблюдаемые низкотемпературные состояния цепочки. В отличие от второй главы, для расчёта запутанности в третьей главе вводится формализм запутанности в трансфер-матричном подходе (смотреть подробнее в главе 3). Несмотря на совпадения в предсказаниях для отрицательности в основном состоянии в кластерном и трансфер-матричном подходах, последний даёт более точные предсказания для запутанности при конечных температурах [93, 94]. Точное решение и применение трансфер-матричного метода позволяет привести аналитические результаты для отрицательности во всех основных состояниях и проанализировать эволюцию

запутанности при переходах между существующими фазами. Так, анализируется конечно температурная запутанность. В заключении кратко представляются основные результаты и выносимые на защиту пункты.

# Глава 1

## Квантовая запутанность двух- и трехчастичных кластеров

В данной главе после короткого введения в формализм квантовой запутанности отрицательность представлена как количественная характеристика запутанности. Для двух- и трехчастичных спин-1 моделей Гейзенберга с биквадратным взаимодействием и внутрикристаллическим полем представлены собственные функции, которые позволяют делать расчёты квантовой запутанности как в основном состоянии, так и при тепловом смешении состояний. Зарождающиеся квантовые фазовые переходы изучены посредством представления изменения квантовой запутанности при них. Было показано, что в квантовых критических точках, при пересечении которых в системе происходят качественные изменения, также происходят изменения в квантовой запутанности. Плато и пики восприимчивостей функций отклика определяют условия скачков квантовой запутанности что опубликовано в статьях [27, 28].

# 1.1 Квантовая запутанность: определения и количественные характери- стики

Перед тем, как перейти к изложению результатов настоящей главы, дадим определения основных понятий и величин, используемых далее.

Предположим, что задана двухкомпонентная квантовая система, состоящая из частей  $A$  и  $B$  и находящаяся в чистом состоянии  $|\Phi\rangle$ . В этом случае гильбертово пространство  $\mathfrak{H}$  всех состояний составной системы можно представить как прямое произведение пространств соответствующих подсистем  $\mathfrak{H}_A$  и  $\mathfrak{H}_B$ :  $\mathfrak{H} = \mathfrak{H}_A \otimes \mathfrak{H}_B$ , если при этом чистое состояние системы  $|\Phi\rangle$  не представимо как прямое произведение однокомпонентных состояний  $|\Phi\rangle_A$  и  $|\Phi\rangle_B$ :  $|\Phi\rangle \neq |\Phi\rangle_A \otimes |\Phi\rangle_B$ , то говорят, что чистое состояние запутанно, в противном же случае оно называется незапутанным (в литературе такие состояния принято ещё называть факторизуемыми по очевидным причинам). Смешанное состояние системы называют запутанным, если оно не может быть разложено по базису незапутанных чистых состояний (см. например [99]).

В литературе предпринималось множество попыток физически оправданного определения количественной характеристики квантовой запутанности [10, 29, 51, 99–102]. Представим кратко из них запутанность формации [51] и отрицательность [29]. Первая из упомянутых, на взгляд автора, является самым наглядным в силу явной физической интерпретации, а вторая, собственно, использовалась при расчётах, представленных в диссертации.

## Запутанность формации

Если задана двухкомпонентная система в смешанном состоянии  $\rho$ , то рассматриваются её всевозможные разложения по базисам чистых состояний  $\{|\psi_i\rangle\}$  с нормированными весами  $p_i$

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|. \quad (1.1)$$

На первом шаге определения запутанности формации определяется количественная характеристика квантовой запутанности  $\mathcal{E}(|\psi_i\rangle)$  чистого состояния как фон Неймановской энтропии от  $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$  с точки зрения наблюдателя над первой подсистемой. Предполагается, что наблюдатель удалён от второй подсистемы (либо, очевидно, наоборот). Иными словами, если  $\rho_1$  ( $\rho_2$ ) - матрица плотности после взятия следа по степеням свободы второй (первой) подсистемы, то

$$\mathcal{E}(|\psi_i\rangle) = S(\rho_1) = S(\rho_2), \quad (1.2)$$

где  $S(\rho) = -Tr(\rho \log_2 \rho)$ . Таким образом, определённая величина принимает значения от нуля (для сепарабельных состояний) до  $\log_2 n$  для максимально запутанных состояний двух подсистем, каждая из которых является  $n$ -уровневой. Зная запутанность базисных состояний, можно определить запутанность смешанного состояния как минимизированную по ансамблю всевозможных разложений по чистым состояниям  $\rho$  среднюю запутанность чистых состояний разложения

$$\mathcal{E}(\rho) = \min \sum_i p_i \mathcal{E}(|\psi_i\rangle). \quad (1.3)$$

Несмотря на явно энтропийное определение, вообще говоря, процедура минимизации в (1.3) не является тривиальной (вообще говоря, все меры запутанности в той или иной степени включают процедуру экстремизации). Тем не менее, в [103,104] для пары бинарно-квантовых частиц (кубитов) было показано, что для запутанности можно получить явную формулу, выражающую её через конкуренцию (в литературе также встречается как "согласованность")  $C$ :

$$\mathcal{E}(\rho) = s\left(\frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2}\right), \quad (1.4)$$

где  $s(x) = -x \log_2 x - (1 - x) \log_2(1 - x)$  - функция Шенонской энтропии.  $C$  (конкуренция) определяется следующим образом. Сначала определяется состояние спин-флип, которое переводит  $\rho$  в  $\tilde{\rho}$

$$\tilde{\rho} = (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho^* (\sigma_y \otimes \sigma_y), \quad (1.5)$$



после чего  $C = \max\{\lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4, 0\}$ , где  $\lambda_i$  ( $i = 1 \dots 4$ ) - собственные значения оператора  $\sqrt{\sqrt{\rho} \tilde{\rho} \sqrt{\rho}}$  в порядке убывания. Конкуренция, пробегая значения от нуля (для сепарабельных состояний) до единицы для стандартного синглета, сама превращается в меру запутанности.

Запутанность формации является удобным инструментом для изучения квантовых корреляций в системах частиц со спином  $1/2$ , однако отсутствие явно аналитической формулы для системы небинарных частиц (кутрит и так далее), а также трудность процедуры минимизации по ансамблю всевозможных разложений делают её непригодной для практического использования в расчётах для систем спина 1. Для таких систем удобнее пользоваться отрицательностью.

## Отрицательность

Отрицательность смешанного двухкомпонентного состояния  $\rho$  определяется как сумма абсолютных значений отрицательных собственных значений  $\mu_i$  транспонированной по отношению к одной подсистеме матрицы плотности  $\rho^{T_1}$  [29]:

$$Ne = \sum_i |\mu_i|. \quad (1.6)$$

Как показывается в [29], отрицательность является мерой отклонения от критерия Переса о сепарабельности [105]. Более того, там же доказывается, что отрицательность - монотонная функция от запутанности (которая, естественно, обнуляется для сепарабельных состояний). Формулу 1.6 можно переписать через норму  $\|\rho^{T_1}\|_1 = Tr \sqrt{\rho^\dagger \rho}$  как

$$Ne(\rho) = \frac{\|\rho^{T_1}\|_1 - 1}{2}. \quad (1.7)$$

## 1.2 Магнитные свойства и квантовая отрицательность двух- и трехчастичных кластеров

### 1.2.1 Изотропная модель Гейзенберга для малочастичных кластеров

Мы рассматриваем изотропную модель Гейзенберга в присутствии магнитного поля  $B < 0$

$$H = \sum_{i=1}^N [J(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1}) + K(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1})^2] + D \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2 + B \sum_{i=1}^N S_i^z. \quad (1.8)$$

Здесь  $J$  и  $K$  описывают интенсивности билинейного и биквадратного взаимодействий соответственно. Модель включает также одноосное кристаллическое поле  $D$ , которое описывает одноосную одноионную анизотропию (uniaxial single ion anisotropy). Последнее должно значительно влиять на запутанность. Необходимо заметить, что гамильтониан (1.8) может быть выведен из модели Бозе-Хаббарда в приближении сильной связи.

Выше оператор спина на узле  $i$   $\mathbf{S}_i$  имеет компоненты спин-1 операторов

$$S_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, S_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

Предполагается, что на взаимодействия наложены циклические граничные условия  $\mathbf{S}_{N+1} = \mathbf{S}_1$ , где  $N$  - полное число узлов на цепочке. Суммирование вдоль цепочки членов вида  $(S_i^z)^2$  может быть приведено к спиновой концентрации (число частиц)  $P$ :

$$\sum_{i=1}^N (S_i^z)^2 = P - P_0, \quad (1.10)$$

где  $P_0$  - количество узлов с  $S_i^z = 0$ , в то время, как  $P$  есть количество узлов с  $S_i^z \neq 0$ . Можно заметить, что в этом отношении одноосная анизотропия эквивалентна химическому потенциалу  $D = -\mu$ . Уже в классическом пределе рассматриваемого гамильтониана становится важным влияние членов  $K$  и  $D$  на термодинамические свойства [31, 33–38, 106–111]. Так, в рамках модели Блюма-Эмери-Грифитса [31] (БЭГ), описывающей  $\lambda$ -переход и фазовую сепарацию в смеси  ${}^3\text{He} - {}^4\text{He}$  и, по сути, являющейся классическим аналогом описанной в этом параграфе модели,  $P_0$  есть количество атомов  ${}^3\text{He}$ , в то время, как  $P$  соответствует количеству атомов  ${}^4\text{He}$ . Именно возможность введения нового параметра порядка только для одного типа частиц (наряду с «намагниченностью», следует учитывать, что два знака последней играют роль параметра порядка сверхтекучести, которая в рамках БЭГ модели принимает два значения), но не для другого, позволяет получать трикритические эффекты.

### 1.2.2 Запутанность и магнитные свойства спин-1 изотропной модели Гейзенберга на малочастичных кластерах

В этом разделе рассматривается гамильтониан (1.8) при  $N = 2$ . Диагонализация гамильтониана приводит к системе собственных значений пары спинов:

$$\begin{aligned}
 E_1 &= -2(B - J - K - D), & E_2 &= -2(J - K - D), \\
 E_3 &= 2(B + J + K + D), & E_4 &= -B - 2J + 2K + D, \\
 E_5 &= B - 2J + 2K + D, & E_6 &= -B + 2J + 2K + D, \\
 E_7 &= B + 2J + 2K + D, & E_8 &= -J + 5K + D - \lambda_0, \\
 E_9 &= -J + 5K + D + \lambda_0
 \end{aligned} \tag{1.11}$$

с соответствующими собственными функциями:

$$\begin{aligned}
|\psi_1\rangle &= |-1, -1\rangle, & |\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1, 1\rangle - |1, -1\rangle), \\
|\psi_3\rangle &= |1, 1\rangle, & |\psi_4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1, 0\rangle - |0, -1\rangle), \\
|\psi_5\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 1\rangle - |1, 0\rangle), \\
|\psi_6\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1, 0\rangle + |0, -1\rangle), \\
|\psi_7\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 1\rangle + |1, 0\rangle), \\
|\psi_8\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2 + \lambda_1^2}}(|1, -1\rangle + \lambda_1|0, 0\rangle + |-1, 1\rangle), \\
|\psi_9\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2 + \lambda_2^2}}(|1, -1\rangle + \lambda_2|0, 0\rangle + |-1, 1\rangle),
\end{aligned} \tag{1.12}$$

где  $\lambda_0 = \sqrt{9(J - K)^2 - 2(J - K)D + D^2}$ ,  $\lambda_1 = \frac{J - K - D - \lambda_0}{2(J - K)}$ ,  $\lambda_2 = \frac{J - K - D + \lambda_0}{2(J - K)}$ , а  $|i, j\rangle$  ( $i = -1, 0, 1$  и  $j = -1, 0, 1$ ) являются собственными векторами оператора  $S_i^z S_{i+1}^z$ . По теореме Шмидта чистые состояния  $|\psi_5\rangle$  and  $|\psi_7\rangle$  не запутанны, а максимально запутанными могут оказаться лишь  $|\psi_8\rangle$  или  $|\psi_9\rangle$ .

Предполагая, что система находится в состоянии теплового равновесия и используя собственные энергии и состояния, после некоторых упрощений можно представить частично транспонированную по отношению к первой подсистеме матрицу плотности  $\rho^{T_1}$  тепловым образом смешанного состояния представления в виде:

$$\rho^{T_1} = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \omega^- & 0 & 0 & 0 & \chi^- & 0 & 0 & 0 & \Xi^- \\ 0 & \chi^+ & 0 & 0 & 0 & \Omega & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Xi^+ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \chi^+ & 0 & 0 & 0 & \Omega & 0 \\ \chi^- & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & \zeta^- \\ 0 & \Omega & 0 & 0 & 0 & \zeta^+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Xi^+ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Omega & 0 & 0 & 0 & \zeta^+ & 0 \\ \Xi^- & 0 & 0 & 0 & \zeta^- & 0 & 0 & 0 & \omega^+ \end{pmatrix}, \tag{1.13}$$

где

$$\begin{aligned}
\omega^\pm &= e^{\frac{2(\pm B - D - J - K)}{T}}, \quad \chi^\pm = \frac{1}{2} e^{-\frac{B + 2(J + K) + D}{T}} \left( 1 \pm e^{\frac{4J}{T}} \right), \\
\zeta^\pm &= \frac{1}{2} e^{\frac{B - 2(J + K) - D}{T}} \left( 1 \pm e^{\frac{4J}{T}} \right), \\
\Xi^\pm &= \pm \frac{1}{2} e^{\frac{2(J - D - K)}{T}} + \\
&\quad \frac{e^{\frac{J - 5K - D}{T}} (\lambda_0 \cosh \frac{\lambda_0}{T} + (J - K - D) \sinh \frac{\lambda_0}{T})}{2\lambda_0}, \\
\Omega &= \frac{2e^{\frac{J - 5K - D}{T}} (K - J) \sinh \frac{\lambda_0}{T}}{\lambda_0}, \\
\Lambda &= \frac{e^{\frac{J - 5K - D}{T}} (\lambda_0 \cosh \frac{\lambda_0}{T} - (J - K - D) \sinh \frac{\lambda_0}{T})}{\lambda_0}
\end{aligned}$$

со статистической суммой

$$\begin{aligned}
Z &= e^{-\frac{2(D + J) + 5K}{T}} \left( 2e^{\frac{D + 3K}{T}} (1 + e^{\frac{4J}{T}}) \cosh\left(\frac{B}{T}\right) + \right. \\
&\quad \left. e^{\frac{4J + 3K}{T}} + 2e^{\frac{3K}{T}} \cosh\left(\frac{2B}{T}\right) + 2e^{\frac{D + 3J}{T}} \cosh\left(\frac{\lambda_0}{T}\right) \right).
\end{aligned}$$

### Система в отсутствие магнитного поля

Рассмотрим сначала влияние кристаллического поля на запутанность основного состояния в отсутствие магнитного поля. Спиновая концентрация  $P$  и отрицательность на рис. 1.1 (а) и (б) соответственно являются асимметричными функциями от  $D$  как при ферромагнитном ( $J < 0$ ), так и антиферромагнитом знаках ( $J < 0$ ) билинейного взаимодействия. Монотонное поведение  $P$  в зависимости от  $D$  в рис. 1.1 (а) сигнализирует о гладком характере зарождающегося перехода. Здесь уместно заметить отличие гладкого бозонного поведения спиновой концентрации от резких ступенчатых переходов числа электронов как функции от химического потенциала в [112]. При  $T \rightarrow 0$  зависимость отрицательности от  $D$  при антиферромагнитном знаке билинейного взаимодействия на рис. 1.1 (б) не монотонна. Так, при  $D = 0$  запутанность максимальна и система находится в состоянии  $\psi_8$ . Для  $J < 0$  система проявляет две отличные друг от друга фазы: запутанную и сепарабельную. В области с неотрицательными  $D$  отрицательность в случае  $J > 0$  всегда больше,

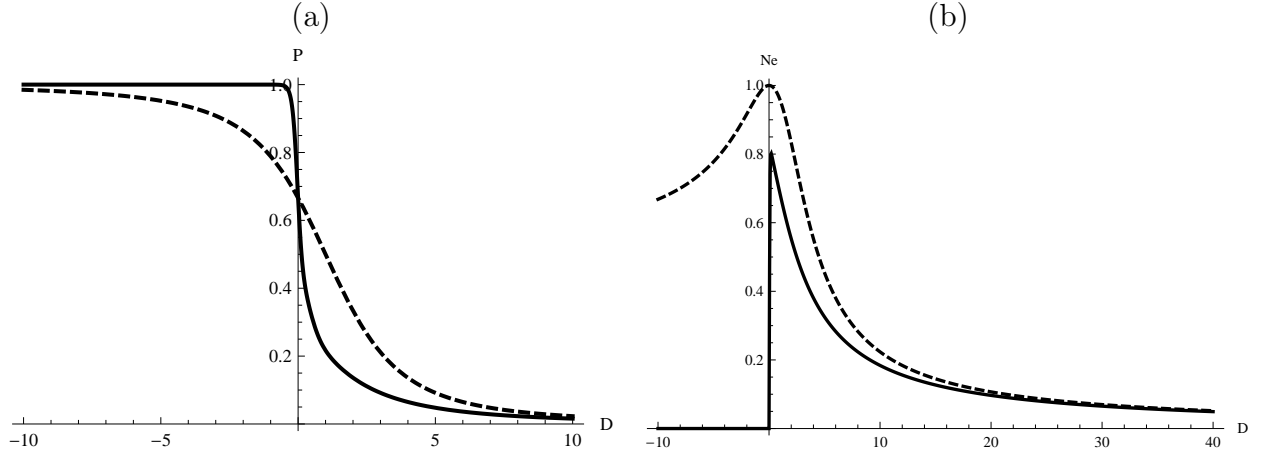


Рис. 1.1: Зависимость (а) числа частиц  $P$  и (б) запутанности  $Ne$  от  $D$  для антиферромагнитного,  $J = 1$  (пунктирная кривая) и ферромагнитного  $J = -1$  (сплошная кривая) знаков билинейного взаимодействия

чем для  $J < 0$ . При этом в случае  $J < 0$  и  $D = 0$  основное состояние системы есть незапутанная смесь состояний  $\psi_1, \psi_3, \psi_6, \psi_7, \psi_8$ , несмотря на присутствие в смеси как полностью, так и частично запутанных состояний. При  $D \rightarrow +0$  система запутанна и находится в основном состоянии  $\psi_8$  ( $\lim_{D \rightarrow +0} = 5/6$  вне зависимости от значения  $J$ , если только оно отрицательное). Для  $D < 0$  состояние системы - это смесь состояний  $\psi_1$  and  $\psi_3$ . Очевидно, что эти состояния могут быть факторизованы и по определению не запутанны. Таким образом, запутанность в области с  $D < 0$  в атиферромагнитном случае может быть использована для обнаружения квантовых корреляций, которые отсутствуют для "классического" ферромагнетика. Отрицательность - немонотонная функция от  $D$  с одним максимумом в точке  $D = 0$  при  $J > 0$  и в непосредственной близости от той же самой точки справа для  $J < 0$ . Магнитная и квадрупольная восприимчивости  $\chi_B \chi_D$  позволяют различать упорядоченные и неупорядоченные фазы в случае нарушенной симметрии в квантовых критических точках. Рис. 1.2 показывает чистые и смешанные квантовые состояния. Незапутанная, раскрашенная тёмным на рис. 1.3 (а) при  $J < 0$  область в ферромагнитном случае соответствует платообразному поведению магнитной восприимчивости  $\chi_0 = \frac{\partial \langle s^z \rangle}{\partial h} |_{B \rightarrow 0}$  на нулевом уровне в плоскости  $J - D$ . Большие значения магнитной восприимчивости в окрашенной белым

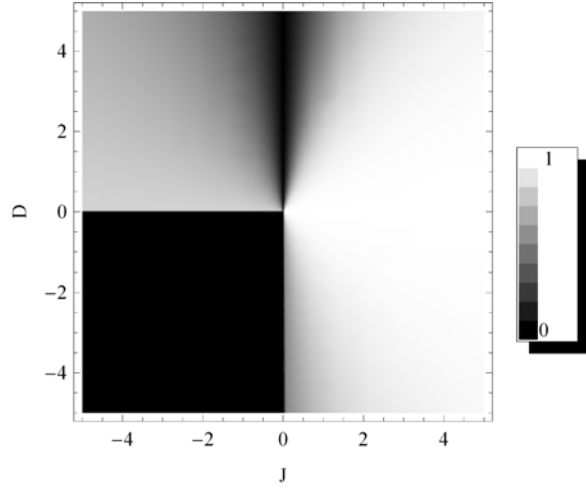


Рис. 1.2: Плотностной график отрицательности в зависимости от  $J$  и  $D$ . Кристаллическое поле увеличивает запутанность при  $J < 0$ .

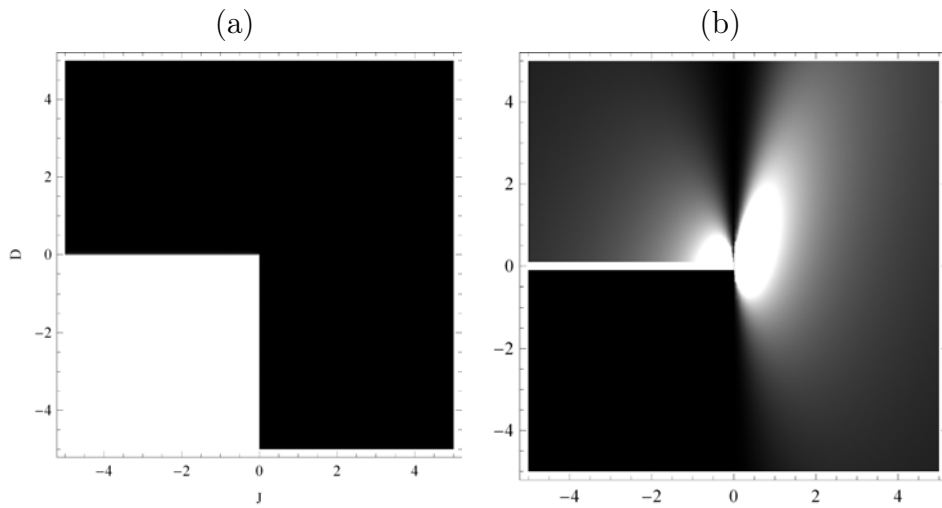


Рис. 1.3: Плотностная зависимость (а) магнитной восприимчивости и (б) восприимчивости концентрации  $P$  в зависимости от  $J$  и  $D$ .

на рис. 1.2 области соответствуют малым значениям отрицательности, в то время, как резкому увеличению отрицательности вдоль линии  $D = 0$  соответствует наблюдаемый на рис. 1.3 (а) пик  $\chi_D = \frac{\partial \langle (S^z)^2 \rangle}{\partial D}$ . Различные области запутанности на рис. 1.2 также выражены в графике зависимости восприимчивости концентрации частиц на рис. 1.3(b). Тем же самым образом фазовая диаграмма в плоскости  $K - J$  в отсутствие полей  $B$  и  $D$  показывает степень запутанности и, соответственно, качественно различающиеся фазы, вызванные нелинейностью собственных значений и собственных векторов в (1.12). К примеру, линия  $J = K$  разделяет максимально запутанную и факторизуемую фазы.

Необходимо заметить, что при такой параметризации в системе происходят качественные изменения, в гамильтониане (1.8) слагаемое  $(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1}) + (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1})^2$  выражается через пермутационный оператор  $P_{12}$ . С другой стороны, на этой линии  $[H, (S_1^z)^2 + (S_2^z)^2] = 0$ , что означает сохранение квадрупольного момента, что, в свою очередь, подразумевает включение нового параметра порядка.

Линия  $J = 3K$  в свою очередь является граничной между двумя запутанными фазами с различной отрицательностью при антиферромагнитных знаках билинейного взаимодействия. Также было получено, что при  $K > 0$  линия  $J = 0$ , как и прежде, разделяет незапутанную и максимально запутанную фазы. Наибольшая запутанность, которая присутствует при  $J < 0$  и  $K < J$  либо  $J > 0$  и  $J > 3K$ , соответствует наблюдаемому условию Бозе-конденсации неполяризованных атомов  $Na$  в оптической решётке [113].

## Влияние магнитного поля

Очевидно, что магнитное поле  $B$  частично убирает вырожденность основного состояния, вследствие чего на рис. 1.4 можно заметить появление новых фазовых границ. Свойства же запутанности возбуждённых состояний не зависят от запутанности основного состояния. Было также установлено, что парная запутанность уменьшается от основного к возбуждённым состояниям,



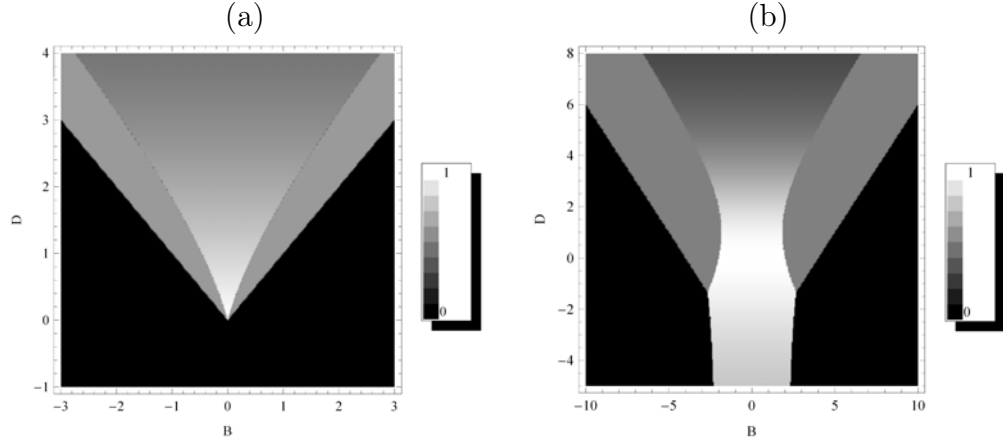


Рис. 1.4: Плотностной график отрицательности в плоскости  $D-B$  в нулевой температуре для (a)  $J = -1$  и (b)  $J = 1$ . Как в первом, так и во втором случае существует возможность сосуществования трёх фаз, что в термодинамическом пределе может означать присутствие тройной или же трикритической точки.

то есть чем выше энергия возбуждения состояния, тем меньше запутанность. При ферромагнитном знаке обменного взаимодействия в точке  $D = B = 0$  запутанность имеет максимум (рис. 1.4 (a)). Когда  $D < |B|$ , система находится в состоянии  $\psi_1$  или  $\psi_3$ . Для фиксированного магнитного поля наблюдаются два последовательных квантовых перехода: первый при значении кристаллического поля  $D = |B|$  и второй при  $D = \sqrt{1 + 6|B| + B^2} - 1$  в  $\psi_6$  и  $\psi_8$  соответственно. При антиферромагнитном  $J$  фазовая диаграмма более содержательна: отрицательность имеет тройную точку при  $|B| = \frac{8}{3}$  и  $D = -\frac{4}{3}$ , что подразумевает присутствие разных фаз, возможное сосуществование или фазовую сепарацию в спин-1 системе. Когда  $D < -\frac{4}{3}$ , линия  $|D| = -\frac{2}{-2+|B|} - 1$  разделяет основные состояния  $\psi_8$  и  $\psi_{1,4}$ , а именно максимально запутанную фазу от сепарабельной. Для  $D > -\frac{4}{3}$  существуют три фазы основного состояния: сепарабельная при  $D < |B| - 4$ , максимально запутанная между  $1 + \sqrt{B^2 + 2|B|} - 7$  и  $1 - \sqrt{B^2 + 2|B|} - 7$  и частично запутанная фаза с собственным вектором  $\psi_{4,5}$ . С другой стороны, в 1.4 для каждого фиксированного значения кристаллического поля существует некое критическое значение магнитного поля, при котором система становится незапутанной. Следует также заметить, что с ростом кристаллического поля в положительной об-

ласти  $B_c$  быстро возрастет. В отрицательной же области  $D \leq 0$  критическое значение магнитного поля при возрастании абсолютного значения  $|D|$  сходится к одной точке, ниже которой система не запутанна. Диаграммы основных состояний на рис. 1.2 и 1.4 проявляют квантовое критическое поведение на границах между разными состояниями с непрерывной линией квантовых критических точек, разделяющих антиферромагнитно упорядоченные фазы от незапутанных состояний. Эти критические линии, аналогично квантовым критическим точкам, могут быть использованы для классификации основных состояний системы взаимодействующих спинов в многомерном пространстве параметров. Динамические взаимодействия сильно преобразуют различные параметры в эффективном гамильтониане, вследствие чего намагниченность (и квадрупольный момент в случае его сохранения) имеют свойства, отличающиеся от квазичастичного описания. Как и в [16], здесь также различные состояния вдоль квантовых критических линий разделены переходами, которые в термодинамическом пределе стали бы фазовыми переходами второго рода. Квантовые критические линии (границы) оказываются полезными для понимания формирования различных фаз основного состояния. Эти непрерывные критические линии в «термодинамических» фазовых диаграммах при достаточно малых температурах совпадают с соответствующими квантовыми критическими точками, полученными из пиков восприимчивостей намагниченности (и спиновой концентрации) [22,23]. Разграничительные линии также оказываются полезными для понимания поведения отрицательности при конечных температурах.

Расстояния между различными фазами вдоль магнитного поля на рис. 1.4 определяют стабильные магнитные фазы с выделенными конфигурациями со спиновыми щелями, характеризуемыми различными спиновыми концентрациями и с расходящимися в термодинамическом пределе восприимчивостями вдоль разграничительных линий. Такие плотностные графики могут быть использованы для определения квантовых критических точек и границ для различного рода квантовых фазовых переходов. Такого рода результаты для конечных кластеров могут иметь значительные следствия в физике кванто-

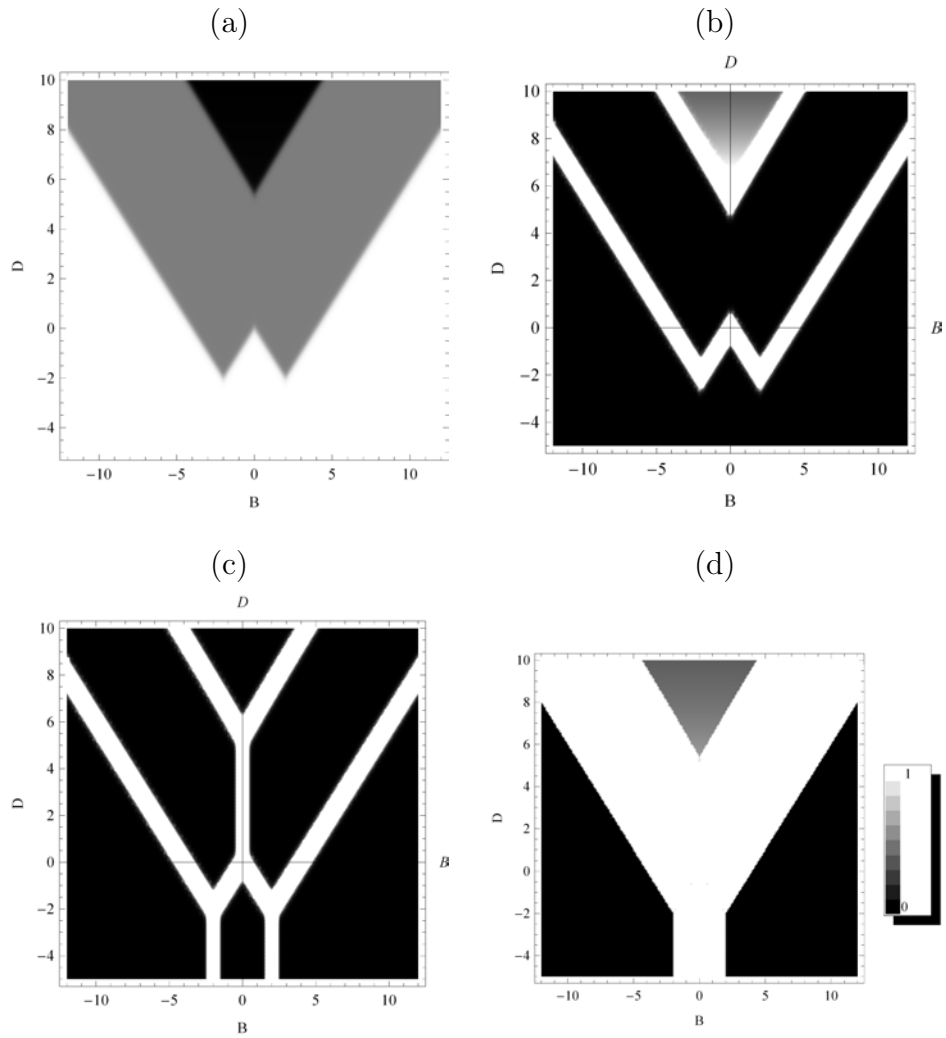


Рис. 1.5: Плотностные графики (а) числа частиц  $P$  (б) квадрупольной восприимчивости (с) магнитной восприимчивости и (д) отрицательности в плоскости  $B$  и  $D$ , когда  $K = 2$  в антиферромагнитном случае  $J = 1$ .

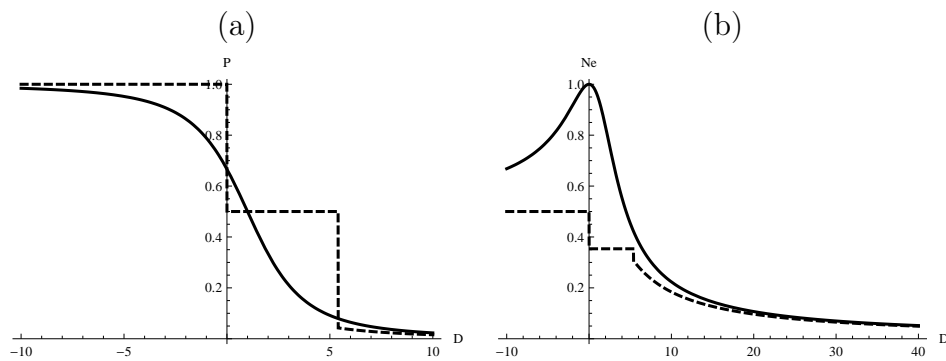


Рис. 1.6: (а) число частиц  $P$  и (б) отрицательность  $Ne$  в зависимости от  $D$  для  $K = 0$  (сплошная кривая) и  $K = 2$  (пунктирная кривая) в антиферромагнитном случае ( $J = 1$ ), когда  $B = 0$ .

вых фазовых переходов [16], где до настоящего времени обычным способом обнаружения фазового перехода является рассмотрение скейлинга в термодинамических системах. Смешивание различных состояний может привести к сложному поведению с двумя тройными точками. И здесь отрицательность становится эффективным индикатором квантовых фазовых переходов. На рис. 1.5(а) обнаруживаются новые «фазовые» границы с прыжком отрицательности из чёрной области в серую с шагом  $\frac{1}{2}$  и из серой в белую с тем же самым шагом. Белая средняя линия  $B = 0$  на рис. 1.5(с) соответствует «классическому» эффекту при  $J < 0$  (классическому в смысле отсутствия изменений в запутанности). С другой стороны, непрерывные линии, заметные на том же самом графике, соответствующие случаю  $J > 0$ , соответствуют «истинному» квантовому переходу (переход сопровождается изменением квантовых корреляций в терминах запутанности).

### **Влияние биквадратного взаимодействия**

Зависимость  $P$  от  $D$  при двух различных значениях биквадратного взаимодействия в антиферромагнитном случае показана на рис. 1.6. В случае  $K = 2$  видно появления щели на  $P = 1/2$ , связанное со спариванием противонаправленных спинов. Это плато напоминает поведение плато Мотта-Хаббарда в зависимости числа частиц от химического потенциала. Это является индикатором возможной нестабильности спаривания противонаправленных спинов [112]. Вследствие этого, кластер при больших значениях  $K$  ведет себя как диэлектрик Мотта, в отличие от поведения спиновой жидкости с нулевой щелью при  $K = 0$  на рис. 1.6(а) (пунктирная кривая). Как это понятно из упомянутого рисунка, биквадратное взаимодействие обогащает фазовую структуру. Также было установлено, что отрицательность в плоскости  $D - K$  в ферромагнитном случае всегда меньше того же в антикоррозионном случае.

### **Трехчастичный кластер**

Рассмотрим запутанность той же самой модели, но уже для трехчастичного случая. Поскольку величина, которую мы рассматриваем, является двухчастичной, то есть вовлечены должны быть эффективно две степени свободы, и если мы в качестве степеней свобод рассматриваем отдельно взятые спины, то это приводит к необходимости редукции полной матрицы плотности посредством взятия следа вдоль «лишнего» спина. Если эти спины эквивалентны, то результат не будет зависеть от выбора редуцируемого спина. Решение модели (1.8) в случае  $N = 3$  позволяет получить полную систему состояний с соответствующими энергиями, которые для справки мы представляем ниже:

$$E_1 = -3(B - D - K), \quad |\psi_1\rangle = |-1, -1, -1\rangle,$$

$$E_2 = 2D - 2J + 3K,$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|1, -1, 0\rangle + |0, 1, -1\rangle + |-1, 0, 1\rangle - |1, 0, -1\rangle - |0, -1, 1\rangle - |-1, 1, 0\rangle),$$

$$E_3 = 2D + J + 3K, \quad |\psi_3\rangle = \frac{1}{2}(|0, -1, 1\rangle + |-1, 0, 1\rangle - |1, 0, -1\rangle - |0, 1, -1\rangle),$$

$$E_4 = 2D + J + 3K, \quad |\psi_4\rangle = \frac{1}{2}(|0, 1, -1\rangle + |-1, 1, 0\rangle - |1, -1, 0\rangle - |0, -1, 1\rangle),$$

$$E_5 = 2D - J + 5K, \quad |\psi_5\rangle = \frac{1}{2}(|1, 0, -1\rangle + |-1, 0, 1\rangle - |0, 1, -1\rangle - |0, -1, 1\rangle),$$

$$E_6 = 2D - J + 5K, \quad |\psi_6\rangle = \frac{1}{2}(|1, -1, 0\rangle + |-1, 1, 0\rangle - |0, 1, -1\rangle - |0, -1, 1\rangle),$$

$$E_7 = 3(B + D + K), \quad |\psi_7\rangle = |1, 1, 1\rangle,$$

$$E_8 = -2B + 2D - J + 3K, \quad |\psi_8\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1, -1, 0\rangle - |0, -1, -1\rangle),$$

$$E_9 = -2B + 2D - J + 3K, \quad |\psi_9\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1, 0, -1\rangle - |0, -1, -1\rangle),$$

$$E_{10} = 2B + 2D - J + 3K, \quad |\psi_{10}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 1, 1\rangle - |1, 1, 0\rangle),$$

$$E_{11} = 2B + 2D - J + 3K, \quad |\psi_{11}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0, 1\rangle - |1, 1, 0\rangle),$$

$$E_{12} = -2B + 2D + 2J + 3K, \quad |\psi_{12}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|0, -1, -1\rangle + |-1, 0, -1\rangle + |-1, -1, 0\rangle),$$

$$E_{13} = 2B + 2D + 2J + 3K, \quad |\psi_{13}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1, 1, 0\rangle + |1, 0, 1\rangle + |0, 1, 1\rangle),$$

$$E_{14} = \frac{1}{2}(-2B + 4D - J + 8K - \mu_0),$$

$$|\psi_{14}\rangle = \frac{\mu_1}{\sqrt{2(4 + \mu_1^2)}} \left( |0, 0, -1\rangle - |0, -1, 0\rangle + \frac{2}{\mu_1} |-1, -1, 1\rangle - \frac{2}{\mu_1} |-1, 1, -1\rangle \right),$$

$$E_{15} = \frac{1}{2}(-2B + 4D - J + 8K - \mu_0),$$

$$|\psi_{15}\rangle = \frac{\mu_2}{\sqrt{2(4 + \mu_2^2)}} \left( |-1, 1, -1\rangle - |1, -1, -1\rangle + \frac{2}{\mu_2} |-1, 0, 0\rangle - \frac{2}{\mu_2} |0, -1, 0\rangle \right),$$

$$E_{16} = \frac{1}{2}(2B + 4D - J + 8K - \mu_0),$$

$$|\psi_{16}\rangle = \frac{\mu_1}{\sqrt{2(4 + \mu_1^2)}} \left( |1, 0, 0\rangle - |0, 1, 0\rangle + \frac{2}{\mu_1} |-1, 1, 1\rangle - \frac{2}{\mu_1} |1, -1, 1\rangle \right),$$

$$E_{17} = \frac{1}{2}(2B + 4D - J + 8K - \mu_0),$$

$$|\psi_{17}\rangle = \frac{\mu_2}{\sqrt{2(4 + \mu_2^2)}} \left( |1, -1, 1\rangle - |1, 1, -1\rangle + \frac{2}{\mu_2} |0, 0, 1\rangle - \frac{2}{\mu_2} |0, 1, 0\rangle \right),$$

$$E_{18} = \frac{1}{2}(-2B + 4D - J + 8K + \mu_0),$$

$$|\psi_{18}\rangle = \frac{\mu_2}{\sqrt{2(4 + \mu_2^2)}} \left( |0, 0, -1\rangle - |0, -1, 0\rangle + \frac{2}{\mu_2} |-1, -1, 1\rangle - \frac{2}{\mu_2} |-1, 1, -1\rangle \right),$$

$$E_{19} = \frac{1}{2}(-2B + 4D - J + 8K + \mu_0),$$

$$|\psi_{19}\rangle = \frac{\mu_1}{\sqrt{2(4 + \mu_1^2)}} \left( |-1, 1, -1\rangle - |1, -1, -1\rangle + \frac{2}{\mu_1} |-1, 0, 0\rangle - \frac{2}{\mu_1} |0, -1, 0\rangle \right),$$

$$E_{20} = \frac{1}{2}(2B + 4D - J + 8K + \mu_0),$$

$$|\psi_{20}\rangle = \frac{\mu_2}{\sqrt{2(4 + \mu_2^2)}} \left( |1, 0, 0\rangle - |0, 1, 0\rangle + \frac{2}{\mu_2} |-1, 1, 1\rangle - \frac{2}{\mu_2} |1, -1, 1\rangle \right),$$

$$\begin{aligned}
E_{21} &= \frac{1}{2}(2B + 4D - J + 8K + \mu_0), \\
|\psi_{21}\rangle &= \frac{\mu_1}{\sqrt{2(4 + \mu_1^2)}} \left( |1, -1, 1\rangle - |1, 1, -1\rangle + \frac{2}{\mu_1}|0, 0, 1\rangle - \frac{2}{\mu_1}|0, 1, 0\rangle \right), \\
E_{22} &= \frac{1}{2}(-2B + 4D + 2J + 11K - \nu_0), \\
|\psi_{22}\rangle &= \frac{\nu_1}{\sqrt{3(16 + \nu_1^2)}} \left( \frac{4}{\nu_1}|1, -1, -1\rangle + \frac{4}{\nu_1}|-1, -1, 1\rangle + \frac{4}{\nu_1}|-1, 1, -1\rangle \right. \\
&\quad \left. - |0, 0, -1\rangle - |0, -1, -1\rangle - |-1, 0, 0\rangle \right), \\
E_{23} &= \frac{1}{2}(2B + 4D + 2J + 11K - \nu_0), \\
|\psi_{23}\rangle &= \frac{\nu_1}{\sqrt{3(16 + \nu_1^2)}} \left( \frac{4}{\nu_1}|1, 1, -1\rangle + \frac{4}{\nu_1}|1, -1, 1\rangle + \frac{4}{\nu_1}|-1, 1, 1\rangle \right. \\
&\quad \left. - |1, 0, 0\rangle - |0, 1, 0\rangle - |0, 0, 1\rangle \right), \\
E_{24} &= \frac{1}{2}(-2B + 4D + 2J + 11K + \nu_0), \\
|\psi_{24}\rangle &= \frac{\nu_2}{\sqrt{3(16 + \nu_2^2)}} \left( \frac{4}{\nu_2}|1, -1, -1\rangle + \frac{4}{\nu_2}|-1, -1, 1\rangle + \frac{4}{\nu_2}|-1, 1, -1\rangle \right. \\
&\quad \left. - |0, 0, -1\rangle - |0, -1, 0\rangle - |-1, 0, 0\rangle \right), \\
E_{25} &= \frac{1}{2}(2B + 4D + 2J + 11K + \nu_0), \\
|\psi_{25}\rangle &= \frac{4}{\sqrt{3(16 + \nu_2^2)}} \left( \frac{4}{\nu_2}|1, 1, -1\rangle + \frac{4}{\nu_2}|1, -1, 1\rangle + \frac{4}{\nu_2}|-1, 1, 1\rangle \right. \\
&\quad \left. - |1, 0, 0\rangle - |0, 1, 0\rangle - |0, 0, 1\rangle \right) \quad (1.14) \\
E_{26} &= \frac{1}{2}(2D + 2J + 11K - \xi_0), \\
|\psi_{26}\rangle &= \frac{2}{\sqrt{24 + \xi_1^2}} \left( |1, 0, -1\rangle + |1, -1, 0\rangle + |0, 1, -1\rangle + |0, -1, 1\rangle \right. \\
&\quad \left. + |-1, 1, 0\rangle + |-1, 0, 1\rangle - \frac{\xi_1}{2}|0, 0, 0\rangle \right), \\
E_{27} &= \frac{1}{2}(2D + 2J + 11K + \xi_0), \\
|\psi_{27}\rangle &= \frac{2}{\sqrt{24 + \xi_2^2}} \left( |1, 0, -1\rangle + |1, -1, 0\rangle + |0, 1, -1\rangle + |0, -1, 1\rangle \right. \\
&\quad \left. + |-1, 1, 0\rangle + |-1, 0, 1\rangle - \frac{\xi_2}{2}|0, 0, 0\rangle \right).
\end{aligned}$$

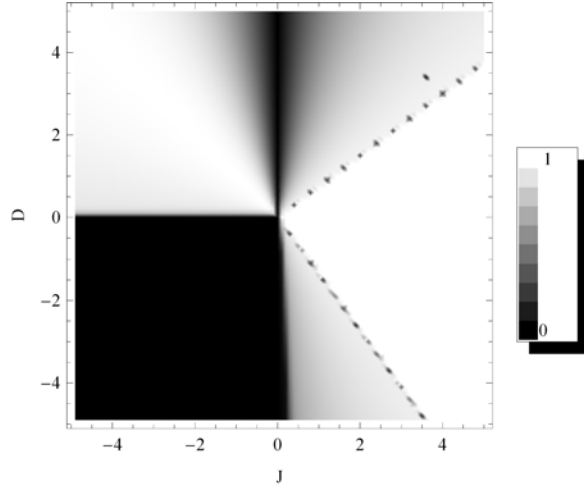


Рис. 1.7: Плотностная зависимость отрицательности от  $J$  и  $D$  при  $K = B = 0$  для трехчастичного кластера.

Где

$$\mu_0 = \sqrt{4J^2 - 8KJ + 4(D^2 + K^2)}, \quad \mu_1 = \frac{2D + \mu_0}{J - K}, \quad \mu_2 = \frac{2D - \mu_0}{J - K},$$

$$\nu_0 = \sqrt{4D^2 + 12(K - J)D + 25(J - K)^2}, \quad \nu_1 = \frac{2D - 3J + 3K + \nu_0}{J - K},$$

$$\nu_2 = \frac{2D - 3J + 3K - \nu_0}{J - K}, \quad \xi_0 = \sqrt{4D^2 + 4(J - K)D + 25(J - K)^2},$$

$$\xi_1 = \frac{2D + J - K + \xi_0}{J - K}, \quad \xi_2 = \frac{2D + J - K - \xi_0}{J - K} :$$

Транспонированная по одной подсистеме матрица плотности имеет ту же структуру, что и (1.13), где отличаются только матричные элементы (во избежание представления излишне громоздких выражений эти матричные элементы не представлены). На рис. 1.7 представлена зависимость отрицательности от  $D$  и  $J$  для фрустрированного трёхчастичного кластера при экстремально низких температурах. Ситуация для ферромагнитного взаимодействия напоминает аналогичную картину для двухчастичной системы (см. рис. 1.2). Однако в антиферромагнитной области  $J > 0$  появляются новые разграничительные линии, соответствующие переходам между частично и полностью запутанными состояниями.



### 1.2.3 Запутанность и магнитные свойства спин-1 анизотропной модели Гейзенберга

В данном разделе рассматривается модель с модифицированным гамильтониана (1.8) с анизотропией билинейного взаимодействия в направлении  $z$  ( $XXZ$  модель). Взаимодействие уже представляется в виде:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{i=1}^N [J(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \gamma S_i^z S_{i+1}^z) \\
 & + K(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1})^2] + D \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2 + B \sum_{i=1}^N S_i^z.
 \end{aligned} \tag{1.15}$$

Безразмерная величина  $\gamma$  обеспечивает изученную анизотропию в направлении  $Z$ . Рассмотрим сперва случай димера, для которого представлены результаты влияния параметра анизотропии на квантовые переходы и изменения квантовой запутанности при них, а также тепловое поведение самой запутанности. Точное решение позволяет найти собственные значения и собственные функции, которые в случае  $N = 2$  представлены ниже:

$$\begin{aligned}
 E_1 &= -B + D - 2J, & |\psi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1, 0\rangle - |0, -1\rangle), \\
 E_2 &= B + D - 2J, & |\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 1\rangle - |1, 0\rangle), \\
 E_3 &= -B + D + 2J, & |\psi_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1, 0\rangle + |0, -1\rangle), \\
 E_4 &= B + D + 2J, & |\psi_4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 1\rangle + |1, 0\rangle) \\
 E_5 &= -2(B - D - J\gamma), & |\psi_5\rangle &= |-1, -1\rangle, \\
 E_6 &= 2(D - J\gamma), & |\psi_6\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1, 1\rangle - |1, -1\rangle), \\
 E_7 &= 2(B + D + J\gamma), & |\psi_7\rangle &= |1, 1\rangle \\
 E_8 &= D + 3K - J\gamma - \lambda_0, & |\psi_8\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2 + \lambda_1^2}}(|1, -1\rangle + \lambda_1|0, 0\rangle + |-1, 1\rangle), \\
 E_9 &= D + 3K - J\gamma + \lambda_0, & |\psi_9\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2 + \lambda_2^2}}(|1, -1\rangle + \lambda_2|0, 0\rangle + |-1, 1\rangle),
 \end{aligned} \tag{1.16}$$

где

$$\begin{aligned}\lambda_0 &= \sqrt{D^2 + 2(K - J\gamma)D + 9K^2 - 2JK(\gamma + 8) + J^2(\gamma^2 + 8)}, \\ \lambda_1 &= \frac{(J - K)(-D + 3K + J\gamma - \lambda_0)}{2J^2 - K(\gamma + 4)J + K(D + 3K - \lambda_0)}, \\ \lambda_2 &= \frac{(J - K)(-D + 3K + J\gamma + \lambda_0)}{2J^2 - 4KJ - K\gamma J + 3K^2 + DK + K\lambda_0}.\end{aligned}$$

А статистическая сумма системы имеет вид:

$$\begin{aligned}Z &= \\ &e^{-\frac{2D}{T}} \left( e^{\frac{-B+D-2J}{T}} + e^{\frac{B+D-2J}{T}} + e^{\frac{-B+D+2J}{T}} + e^{\frac{B+D+2J}{T}} + \right. \\ &\left. e^{\frac{2J\gamma}{T}} + e^{\frac{2(B-J\gamma)}{T}} + e^{-\frac{2(B+J\gamma)}{T}} + e^{\frac{D-3K+J\gamma-\lambda_0}{T}} + e^{\frac{D-3K+J\gamma+\lambda_0}{T}} \right).\end{aligned}\quad (1.17)$$

Сначала представим влияние параметра анизотропии на структуру основного состояния и эволюцию запутанности при квантовых ( $T \rightarrow 0$ ) переходах.

1. Когда  $J > 0$ ,  $K = 0$  и  $-2\frac{D+J}{D+2J} \geq \gamma > -\frac{D+\sqrt{D^2+4J^2}}{2J}$ , при фиксированном знаке поля  $B$  существуют две принципиально отличающиеся "фазы": при  $B = 0$  основным является состояние  $\psi_8$ , которое максимально запутанно, что следует как из теоремы Шмидта, так и из наших прямых расчётов. С ростом абсолютного значения поля основное состояние остаётся прежним до момента достижения критического значения  $|B| = \frac{1}{2}(D + 3J\gamma + \lambda_0)$ . При критическом значении магнитного поля система находится в смеси состояний  $\psi_1, \psi_5, \psi_8$  для  $B > 0$ , либо  $\psi_2, \psi_7, \psi_8$  для  $B < 0$ . Если продолжить увеличивать поле, то система осуществит квантовый переход в состояние  $\psi_5$  либо  $\psi_7$  соответственно при положительных и отрицательных значениях поля. Эти состояния уже факторизуемы.
2. Когда  $J > 0$ ,  $K = 0$ , но уже  $\gamma > -2\frac{D+J}{D+2J}$ , для фиксированного значения поля появляется ещё одно основное состояние. При  $B = 0$  основным вновь является полностью запутанное состояние  $\psi_8$ . С увеличением величины поля после достижения критического значения  $|B| = -2J + J\gamma + \lambda_0$  осуществляется переход к состоянию  $\psi_1$  ( $B > 0$ ) или

- $\psi_2$  ( $B < 0$ ). Эти состояния запутаны, но не полностью (само значение запутанности зависит от фиксированных значений параметров). Если продолжить увеличивать абсолютное значение поля, то при значении  $|B| = D + 2J(1 + \gamma)$  система осуществит переход от состояния  $\psi_1$  к незапутанному состоянию  $\psi_5$ , а от состояния  $\psi_2$  к  $\psi_7$ .
3. Если  $J > 0$ ,  $K = 0$  и  $\gamma < \frac{2(D-J)}{D-2J}$ , то в отсутствие магнитного поля основным является суперпозиция незапутанных состояний  $\psi_5$  и  $\psi_7$ . С появлением поля основным становится состояние  $\psi_5$  (при  $B > 0$ ) либо  $\psi_7$  (при  $B < 0$ ).
  4. При значениях параметров  $J < 0$ ,  $K = 0$  и  $\frac{-D-\sqrt{D^2+4J^2}}{2J} > \gamma > \frac{2(D-J)}{D-2J}$  происходит то же самое, что было описано в пункте 1, но лишь с тем отличием, что основными состояниями, соответствующие критическим значениям поля, являются смеси  $\psi_3, \psi_5, \psi_8$  при  $B > 0$  и  $\psi_4, \psi_7, \psi_8$  при  $B < 0$ .
  5. Когда  $J < 0$ ,  $K = 0$  и  $\gamma < \frac{2(D-J)}{D-2J}$ , ситуация аналогична описанному в случае 2, однако в этом случае при первом квантовом переходе критическое значение поля  $|B| = \gamma J + 2J + \sqrt{(D - J\gamma)^2 + 8J^2}$  и переход происходит к  $\psi_3$ , если  $B > 0$ , и к  $\psi_4$ , если  $B < 0$ . Пересечение второго критического значения поля  $|B| = D - 2J + 2J\gamma$  приведет к переходам от  $\psi_3$  к  $\psi_5$  и от  $\psi_4$  к  $\psi_7$ .
  6. При  $J < 0$ ,  $K = 0$ ,  $\gamma < \frac{-D-\sqrt{D^2+4J^2}}{2J}$  полностью повторяется происходящее в пункте 3.
  7. Если  $\gamma = \frac{-D-\sqrt{D^2+4J^2}}{2J}$ , то вне зависимости от знака связи  $J$  имеет место следующее. Когда  $B = 0$ , основным является суперпозиция состояний  $\psi_6, \psi_7, \psi_8$ . С увеличением поля происходит переход к незапутанному состоянию к  $\psi_5$  при  $B > 0$ , а при  $B < 0$  к  $\psi_7$ .

На рис. 1.8(а) изображен плотностной график квантовой запутанности в плоскости  $\gamma-D$  при ( $T \rightarrow 0$ ), когда квадрупольный момент является сохраня-

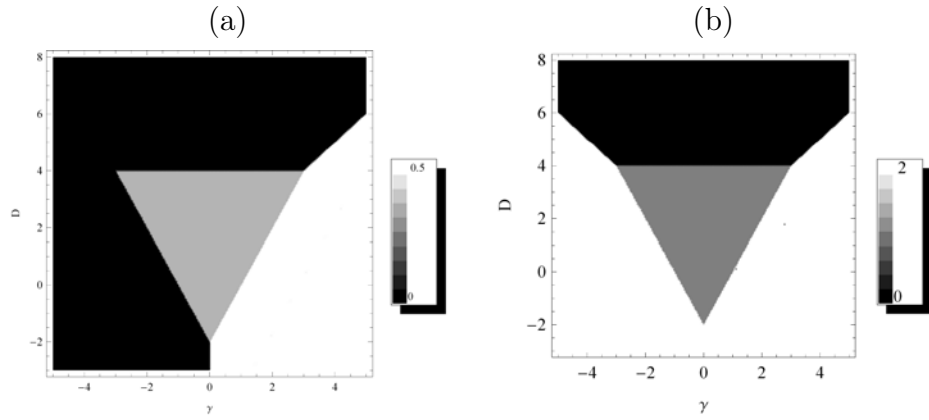


Рис. 1.8: (a) Плотностной график отрицательности в зависимости от параметра анизотропии и кристаллического поля, когда сохраняется квадрупольный момент ( $J = K = 1$ ) в отсутствие магнитного поля при близких к нулю температурах. (b) Квадрупольный момент в зависимости от тех же величин при тех же условиях.

ющейся величиной ( $J = K = 1$ ), а внешнее магнитное поле отсутствует (чем светлее график в данной области, тем выше квантовая запутанность). Как видно из графика, существуют принципиально отличающиеся области совмещения параметров  $\gamma$  и  $D$ . С другой стороны, если при тех же условиях и в той же плоскости посмотреть на квадрупольный момент ( $P = \langle (S^z)^2 \rangle = \frac{\partial F}{\partial D}$ , где  $F$  свободная энергия)- рис. 1.8(b), то будет очевидно, что между двумя графиками в определённых областях существует довольно строгое совпадение, между тем в других областях разграничительные линии областей не повторены для запутанности. По сути тут происходит следующее. При пересечении каждой разграничительной линии на рис. 1.8(b) происходит некий аналог квантового фазового перехода для конечных систем. Однако не каждый переход влечёт за собой изменение квантовой запутанности. Поскольку запутанность в свою очередь является характеристикой чисто квантовых корреляций, то такое соответствие между квантовыми переходами и переходами в "фазовой" диаграмме запутанности наталкивает на предположение о возможности классификации квантовых фазовых переходов по квантовой запутанности. С другой стороны, поскольку квантовая запутанность есть в сущности энтропия, то её обнаружение на экспериментах может происходить

лишь косвенным образом через другие проявления. Фактически получается, что в определённых областях квадрупольный момент становится именно таким свидетельством запутанности системы.

Перейдем к описанию теплового поведения квантовой запутанности. На рис. 1.9(a) представлен частный случай зависимости квантовой запутанности от параметра изотропии и температуры. В основном поведение отрицательности в зависимости от температуры монотонно убывающее, однако можно заметить, что для не очень больших по величине отрицательных значений параметра анизотропии (приблизительно  $-2.8 < \gamma < -1$ ) существует область увеличения запутанности. Сказанное объясняется следующими соображениями. При  $\gamma < -1$  основным является незапутанная смесь состояний  $\psi_5$  и  $\psi_7$ , которые в отдельности, по существу, эквивалентны классическим состояниям. Первые возбуждённые состояния, сразу следующие за основным состоянием, в отсутствие магнитного и кристаллического полей есть смесь уже запутанных состояний  $\psi_1$  и  $\psi_2$ . Если параметр анизотропии отрицателен и достаточно большой по величине, то теплового возбуждения при совместимых с термальной запутанностью температурах не хватает для того, чтобы система заняла этот уровень. Однако существует промежуточная область значений  $\gamma$ , при которых из-за постепенного сближения основного уровня с первым возбуждённым, с одной стороны, система успевает занять первый возбуждённый уровень, а с другой - запутанность не разрушается. При последующем повышении температуры запутанность монотонно и постепенно исчезает. То есть включение температурного режима усиливает в определённой области квантовые эффекты (см. также [50]) из-за досягаемости чисто квантовых состояний. Если посмотреть на тот же самый график, но уже в плоскости  $T = 0$ , то видно, что на нём присутствуют две точки ( $\gamma = -1$  и  $\gamma = 1$ ) резкого скачкообразного изменения отрицательности. Это следствие того, что основное состояние - смесь незапутанных состояний  $\psi_5$  и  $\psi_7$  при  $\gamma < -1$  в точке  $\gamma = -1$  - превратилось в смесь  $\psi_1, \psi_2, \psi_5, \psi_7$ , которая уже запутана (первый скачок). В интервале значений  $-1 < \gamma < 1$  основное состояние есть смесь запутанных состояний  $\psi_1$  и  $\psi_2$ , на которую

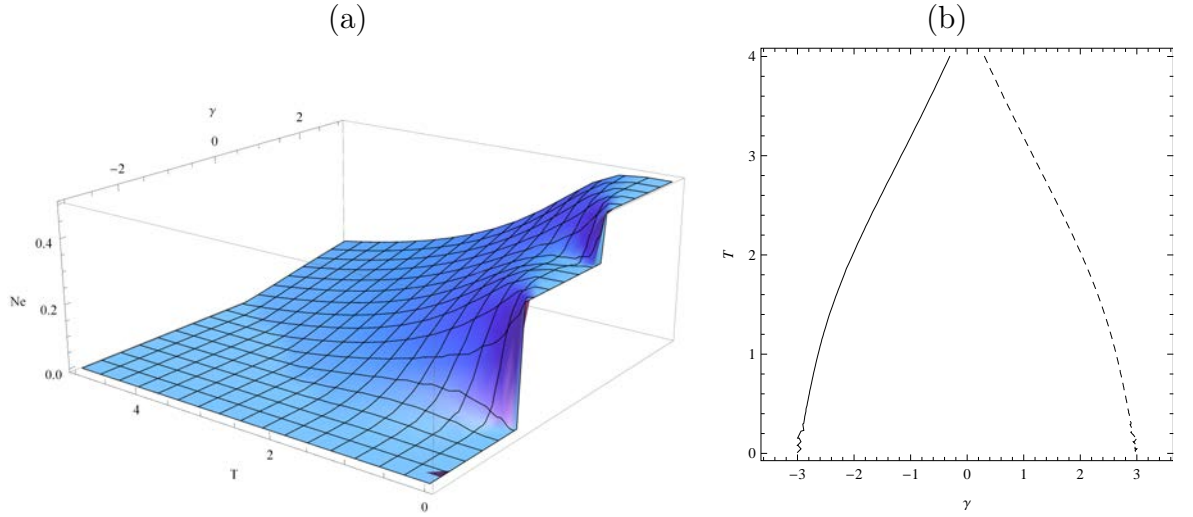


Рис. 1.9: (a) Зависимость отрицательности от параметра анизотропии и температуры (в энергетических единицах) при сохраняющемся квадрупольном моменте ( $J = K = 1$ ) в отсутствие магнитного и продольного кристаллического полей. (b) Критические линии исчезновения запутанности в плоскости  $\gamma - T$ , сплошная линия соответствует антиферромагнитному случаю, ( $J = K = 1$ ) пунктирная - ферромагнитному ( $J = K = -1$ ), поля отсутствуют.

в точке  $\gamma = 1$  налагается ещё одно состояние  $\psi_6$  (второй скачок). После этого значения параметра анизотропии основным является состояние  $\psi_6$ . С увеличением температуры, как и следовало ожидать, такое скачкообразное поведение сглаживается. Более того, на какой-то критической линии в плоскости  $\gamma - T$  запутанность полностью разрушается, на рис. 1.9(b) изображена именно эта критическая линия для случаев  $J = K = 1$  (сплошная линия) и  $J = K = -1$  (пунктирная линия). Эти кривые можно найти из условия обнуления последнего отрицательного собственного значения транспонированной по отношению к одной подсистеме матрицы плотности. Они задаются условием  $(x^2 - 1)(x^3 - x + 2y) - x\sqrt{(x^4 - 1)(x^4 - 4x^2 + 7)} = 0$ , где  $x = e^{\frac{2}{T}}$  и  $y = e^{\frac{2J\gamma}{T}}$ . В областях под этими линиями запутанность отлична от нуля, а по пересечении линий она исчезает. Можно заметить, что она отсутствует и при значениях параметра анизотропии  $\gamma < -2.8$  и  $\gamma > 2.8$  для любых температур, объяснение чего уже давалось.

Рассмотрим теперь трехчастичный случай. После решения проблемы на

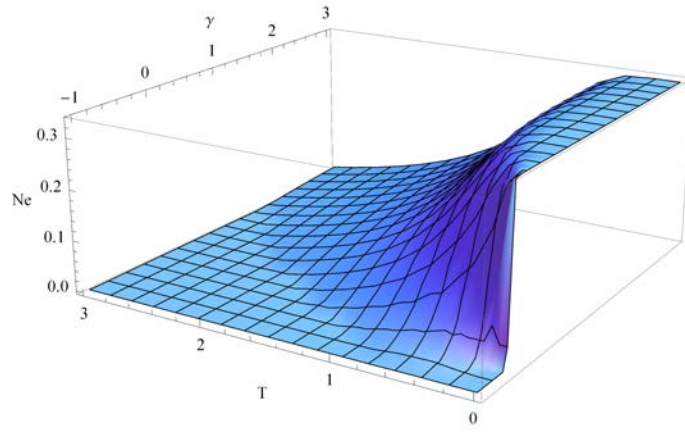


Рис. 1.10: Запутанность в зависимости от параметра анизотропии и температуры при сохраняющемся квадрупольном моменте ( $J=K=1$ ) в отсутствие магнитного и кристаллического полей для трехчастичного кластера.

собственную систему гамильтониана и редукции матрицы плотности были выполнены расчёты квантовой запутанности для выше указанной модели. На рис. 1.10 представлена зависимость квантовой запутанности от параметра анизотропии и температуры при  $J = K = 1$  в отсутствие магнитного и кристаллического полей. Как видно из рисунка, как и в предыдущем случае, существуют области значений параметра анизотропии, где наблюдаются усиления квантовых эффектов при повышении температуры. В конечном итоге было установлено, что в трехчастичном случае (хотя задача в результате эффективно редуцируется к двухчастичной) при одинаковых значениях внешних параметров запутанность падает по сравнению с запутанностью в двухчастичном случае. С другой стороны, также было установлено, что критические температуры исчезновения понижаются в трехчастичном случае. Эти эффекты являются следствием фрустрированности системы.

### 1.3 Выводы

В этой главе, опираясь на концепцию запутанности как характеристики чисто квантовых корреляций, мы изучили поведение спин-1 малоразмерных кластеров Гейзенберга. Привлекая отрицательность как мерилу квантовой

запутанности, были представлены расчёты запутанности с одной стороны и функций отклика (восприимчивостей) с другой. В особо интересных случаях были представлены также критические значения встроенных параметров и полей, запутанность для которых исчезает, и критические температуры угасания. Были найдены области, где запутанность может быть резко увеличена посредством взаимосвязанного увеличения билинейного взаимодействия и внутрикристаллического поля, несмотря на то, что максимально запутанное состояние при отсутствии биквадратного взаимодействия достигается в отсутствие кристаллического поля. Проведённые расчёты запутанности при конечных температурах указали на существование режимов анизотропии билинейного взаимодействия, при которых с ростом температуры происходит увеличение квантовых корреляций.

Отрицательность может определять границы между упорядоченными (сильно коррелированными в смысле запутанности) и, по существу, классическими (сепарабельными) состояниями. Наблюдаемые плато намагниченности (квадрупольного момента) и пики восприимчивостей могут быть использованы одновременно для выявления как классических (в выше указанном смысле), так и квантовых фазовых переходов. Плотностные (цвето-градиентные) графики проявляют себя в этом отношении как удобный топографический инструмент для выявления квантовых фаз и переходов между ними. Состояния с угасающими классическими (тепловыми), но возрастающими квантовыми корреляциями открывают возможности для изучения фазовых переходов, обнаруживаемых лишь одновременным рассмотрением квантовой запутанности и термодинамических свойств. С другой стороны, функции отклика (иногда необходимо одновременное рассмотрение откликов по всем параметрам порядка), учитывая связь между ними и запутанностью, могут быть использованы как экспериментально проверяемые свидетельства запутанности. Наши изучения квантовых критических точек кажутся распространяемыми и на большие термодинамические системы. Несмотря на то, что точные изучения для достаточно общего полиномиального вида гамильтониана имеют практические ограничения (расчётные времена растут экспоненциально с ро-



стом числа частиц в кластере), мы не нашли минимальной критической длины цепочки, для которой запутанность исчезает. Модель Бозе-Хаббарда со спином-1 при некоторой параметризации может быть отображена на модель Гейзенберга со спином-1. В этом случае изучения такого рода моделей могут быть полезными для понимания спонтанных фазовых сепараций (spontaneous phase separation) и переходов между диэлектриком Мотта и сверхтекучестью в спин-1 Бозе-Хаббардовых моделях на оптических решетках.

Рассмотренные в этой главе результаты опубликованы в работах [27, 28].

## Глава 2

# Спин-1/2-1 модель

# Изинга-Гейзенберга на даймонд-цепочке

В данной главе представляются результаты [62] для точно решаемой смешанной спин- $\frac{1}{2}$ -1 модели Изинга-Гейзенберга на даймонд-решётке. После краткого описания модели представлено его точное решение, которое позволяет получить термодинамические функции отклика (намагниченность и квадрупольный момент). Далее изучаются возможности формирования промежуточных плато намагниченности при постепенном увеличении магнитного поля при различных значениях параметров, входящих в гамильтониан. Запутанность модели здесь изучается в кластерном подходе [62, 93, 94, 114]. Изучение отрицательности указывает на возможность существования промежуточного плато отрицательности в отсутствие внутри-кристаллического поля и квадрупольного взаимодействия. Сравниваются поведения квадрупольного момента и квантовой запутанности. Устанавливается, что при сохранении квадрупольного момента модель не может быть максимально запутанной.

## 2.1 Определение смешанной модели на даймонд-цепочке

Здесь мы рассматриваем модель Изинга-Гейзенберга на даймонд-цепочке со спинами  $\frac{1}{2}$  и 1 с квадрупольной связью и одноионной анизотропией в присутствии магнитного поля.

Даймонд-цепочка (рис. 2.1) является квазиодномерной системой, которая состоит из узловых и попеременно за ними следующих вертикальных димеров. Гамильтониан системы может быть записан в следующей форме:

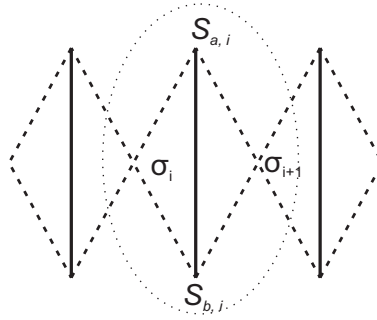


Рис. 2.1: Схематическое представление даймонд-решётки со смешанными спинами. Пунктирные (сплошные) линии соответствуют изинговским (гейзенберговским) взаимодействиям.

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{i=1}^N H_i, \\
 H_i &= J_0 (\mathbf{S}_{a,i} \mathbf{S}_{b,i}) + J_1 (\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z) (S_{a,i}^z + S_{b,i}^z) + K (\mathbf{S}_{a,i} \mathbf{S}_{b,i})^2 \\
 &\quad + D \left( (S_{a,i}^z)^2 + (S_{b,i}^z)^2 \right) - h \left( \frac{\sigma_i^z}{2} + S_{a,i}^z + \frac{\sigma_{i+1}^z}{2} + S_{b,i}^z \right). \quad (2.1)
 \end{aligned}$$

В гамильтониане  $\sigma_i^z$  есть  $z$ -компонента оператора спин- $\frac{1}{2}$  (иными словами, одна-вторая  $z$  матрицы Паули), а  $S_{a,i}^\alpha$  и  $S_{b,i}^\alpha$  ( $\alpha = x, y, z$ ) - компоненты спин-1 операторов (1.9) соответственно на  $a$ -ом и  $b$ -ом узле  $i$ -ого димера. Циклические граничные условия применены таким образом, что последний изинговский спин совпадает первым:  $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ .  $J_0$  и  $K$ , как и прежде, - коэффициенты билинейного и биквадратного взаимодействий в каждом отдельно

взятом димере, в то время как  $J_1$  есть интенсивность спаривания узловых изинговских спинов с гейзенберговскими вершинами. Здесь  $h$  есть однородное и одинаково действующее на изинговские и гейзенберговские подрешетки магнитное поле в направлении  $z$ .  $D$ , как и прежде, есть одноионная анизотропия (внутри-кристаллическое поле) в направлении  $z$ . Как уже указывалось выше, в специальной точке  $J_0 = K$  в системе происходят качественные изменения, приводящие к коммутации оператора  $\sum_{i=1}^N ((S_{a,i}^z)^2 + (S_{b,i}^z)^2)$  с гамильтонианом, в таком случае для полного описания состояний системы становится необходимым рассмотрение ещё и квадрупольного момента (или иначе спиновой концентрации (1.10)).

### 2.1.1 Точное решение смешанной модели

Перейдем к представлению точного решения модели. Важнейшим наблюдением на этом пути является соотношение коммутации  $[\mathcal{H}_i, \mathcal{H}_j] = 0$  между отдельными блок-гамильтонианами. В итоге это приводит к возможности, на данном этапе, сведения задачи к рассмотрению одного блочного гамильтониана. Очевидно, что в рамках каждого отдельно взятого блока изинговская часть коммутирует с гейзенберговской частью. Последнее позволяет взять след по изинговским степеням свободы отдельного блока, что формально означает, что операторы  $\sigma_i^z$  могут быть заменены на числа  $\sigma_i = \pm 1/2$ . Следовательно, девять собственных значений  $(\lambda_n(\sigma_i, \sigma_{i+1}), n = 1, \dots, 9)$  могут быть найдены аналитически:

$$\begin{aligned}
\lambda_{1,2} &= J_0 + 2D + K - \left( \frac{h}{2} \pm 2J_1 \right) (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \pm 2h, \\
\lambda_{3,4} &= J_0 + D + K - \left( \frac{h}{2} \pm J_1 \right) (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \pm h, \\
\lambda_{5,6} &= -J_0 + D + K - \left( \frac{h}{2} \pm J_1 \right) (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \pm h, \\
\lambda_7 &= -J_0 + 2D + K - \frac{1}{2}h (\sigma_i + \sigma_{i+1}),
\end{aligned} \tag{2.2}$$

$$\lambda_{8,9} = \frac{1}{2}(-J_0 + 2D + 5K - h (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \pm v),$$

где посредством  $v$  мы обозначили

$$v = \sqrt{(-2D + J_0 - K)^2 + 8(J_0 - K)^2}. \quad (2.3)$$

С другой стороны, полный набор волновых векторов представлен в (1.13).

Мы собираемся решать модель прямым трансфер-матричным методом. Для этого запишем статистическую сумму модели в следующем виде:

$$Z = \sum_{\sigma_i} \prod_{i=1}^N \text{Tr}_i e^{-\beta \mathcal{H}_i}, \quad (2.4)$$

Где  $\beta = (k_B T)^{-1}$ ,  $k_B$  постоянная Больцмана,  $T$  - абсолютная температура (все последующие расчёты данной главы проводятся в энергетических единицах температуры). Суммирование проводится по всем возможным конфигурациям изинговских спинов. После взятия следа вдоль спин-1 гейзенберговских спинов, с учётом циклических граничных условий, статистическую сумму можно переписать в следующем виде:

$$Z = \sum_{\sigma_i} \prod_{i=1}^N T_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} = \text{Tr} T^N, \quad (2.5)$$

Здесь,  $T_{\sigma_i, \sigma_{i+1}}$  стандартная  $2 \times 2$  трансфер-матрица:

$$T_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} = \begin{pmatrix} T_{+,+} & T_{+,-} \\ T_{-,+} & T_{-,-} \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

индексы  $\pm$  обозначают два состояния изинговских спинов  $\sigma_i = \pm \frac{1}{2}$ . Элементы трансфер-матрицы определяются через собственные значения (2.2) следующим образом:

$$T_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} = \text{Tr}_i e^{-\beta \mathcal{H}_i} = \sum_{n=1}^9 e^{-\beta \lambda_n(\sigma_i, \sigma_{i+1})}. \quad (2.7)$$

После чего полная статистическая сумма принимает вид, схожий с видом статистической суммы одномерной цепочки с двузначными переменными на каждом узле:

$$Z = \Lambda_1^N + \Lambda_2^N, \quad (2.8)$$

где  $\Lambda_{1,2}$  - собственные значения трансфер-матрицы (2.6). Учитывая, что в термодинамическом пределе достаточно рассмотреть лишь наибольшее из собственных значений, можно рассчитать свободную энергию, приходящую на один блок.

$$f = -\frac{1}{\beta} \ln \frac{1}{2} \left( T_{+,+} + T_{-,-} + \sqrt{(T_{+,+} - T_{-,-})^2 + 4T_{+,-}^2} \right). \quad (2.9)$$

Основным параметром порядка рассматриваемой модели является намагниченность на один блок, определённая как

$$m = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \left( \frac{\sigma_i^z}{2} + S_{a,i}^z + \frac{\sigma_{i+1}^z}{2} + S_{b,i}^z \right) \right\rangle = - \left( \frac{\partial f}{\partial h} \right)_{T,D}. \quad (2.10)$$

В уже указанной точке  $J_0 = K$  мы также прибегаем к использованию квадрупольного момента

$$q = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \left( (S_{a,i}^z)^2 + (S_{b,i}^z)^2 \right) \right\rangle = \left( \frac{\partial f}{\partial D} \right)_{J_0=K,T,h}. \quad (2.11)$$

## 2.2 Магнитные свойства смешанной модели

Общие свойства намагниченности и квадрупольного момента (при его сохранении) представлены на рис. 2.2. Рассмотрим сначала намагниченность. Рис. 2.2 (а) показывает зависимость намагниченности от магнитного поля при низких температурах при различных значениях параметров спаривания  $J_0$  и  $J_1$  ( $J_0 = 1, J_1 = 1$  сплошная линия,  $J_0 = 1, J_1 = -1$  пунктирно-точечная кривая,  $J_0 = -1, J_1 = 1$  пунктирная линия). Все расчёты здесь проведены в случае отсутствия как биквадратного взаимодействия, так и кристаллического поля. Фазовая диаграмма оказалась здесь достаточно богатой и представляющей большое разнообразие основных состояний [82].

Наиболее богатый сценарий намагничивания имеет место при антиферромагнитных знаках как изинговского, так и гейзенберговского билинейного

спаривания (сплошная кривая). В этом случае до насыщения проявляются два промежуточных плато при  $1/5$ -ой и  $3/5$ -ой значения насыщения. Плато при  $1/5$ -ой при ненулевом магнитном поле соответствует состоянию с димерной намагниченностью  $\langle S^z \rangle = 0$  (соответствующие собственные значения блочного гамильтониана  $\lambda_8$  с сонаправленными с полем изинговскими спинами) либо состоянию с димерной намагниченностью  $\langle S^z \rangle = 1$  (соответствует собственному значению блочного гамильтониана  $\lambda_6$  с противоположенными к магнитному полю изинговскими спинами) в зависимости от направления изинговского спина. Таким образом, в присутствии магнитного поля  $0 < h \leq 1$  при нулевых температурах, вся цепочка находится в суперпозиции состояний

$$\begin{cases} \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{2+\kappa_1}} |-\frac{1}{2}\rangle_i \otimes (|1, -1\rangle - \kappa_1 |0, 0\rangle + |-1, 1\rangle)_{a_i, b_i} \\ \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}} |\frac{1}{2}\rangle_i \otimes (|1, 0\rangle - |0, 1\rangle)_{a_i, b_i} \end{cases} \quad (2.12)$$

с

$$\kappa_1 = \frac{(J_0 - K)(J_0 + 3K - 2D - \nu)}{-2J_0^2 + 5J_0K + (\nu - 2D - 3K)K}. \quad (2.13)$$

Здесь посредством первого «кэт»-вектора в прямом произведении мы обозначили состояние изинговского спина в  $i$ -ой элементарной ячейке, а посредством второго - состояние димера в той же ячейке. Следует отметить, что в отсутствие магнитного поля, несмотря на то, что эти состояния имеют вклад, тем не менее, в суперпозицию добавляются еще и другие состояния, в частности, ко второму из указанных состояний добавляется похожее на неё состояние, но с перевернутым изинговским спином (происходит фрустрация).

Плато намагниченности на  $3/5$  соответствует димерной намагниченности  $\langle S^z \rangle = 2$  (с собственным значением блок-гамильтониана  $\lambda_1$ ) и противоположенным к гейзенберговским спинам изинговскими спинами. Система насыщается после  $h > 4$ , когда изинговские спины ориентируются в направлении уже давно упорядоченных по магнитному полю гейзенберговских спинов. Если билинейные взаимодействия имеют различные знаки (пунктирно-точечная и пунктирная кривые на рис. 2.2(а)), то наблюдается лишь одно промежуточное

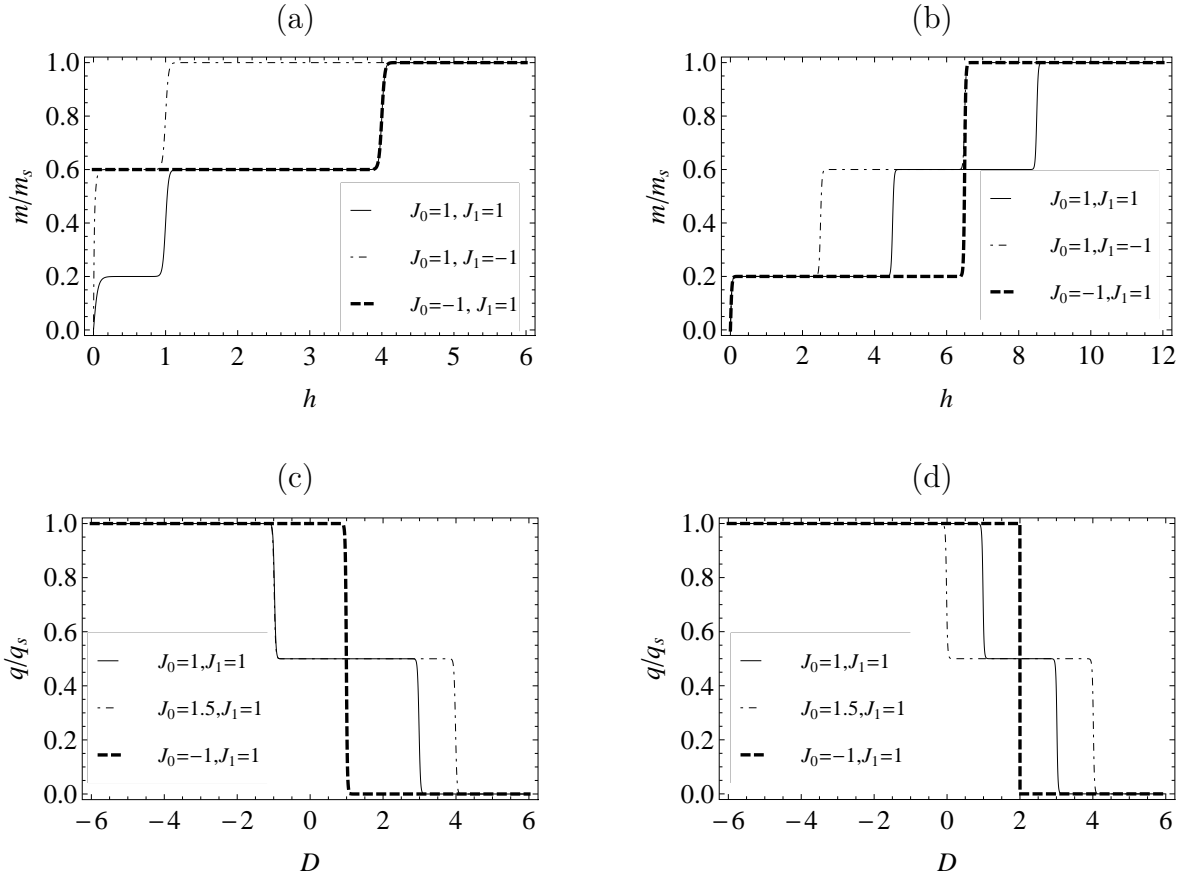


Рис. 2.2: Зависимость полной намагниченности (в единицах значения насыщения) от магнитного поля при низких температурах ( $T = 0.02$ ) для разных значений параметров спаривания (a)  $K = D = 0$ , (b)  $J_0 = K$  и  $D = 5.5$ . Зависимость квадрупольного момента для различных значений параметров спаривания и магнитного поля (c)  $h = 0$ , (d)  $h = 2$ .

плато на  $3/5$  значения насыщения с различными значениями намагниченности димера. В случае, когда билинейное взаимодействие внутри димера имеет ферромагнитный знак (пунктирно-точечная кривая), димерная намагниченность достигает своего максимального значения и остаётся такой для всех положительных значений магнитного поля. Появление в этом случае плато на  $3/5$  является следствием перехода от одного набора классических переменных к другому (под классическими здесь подразумеваются изинговские степени свободы). И, наконец, когда гейзенбергово взаимодействие имеет антиферромагнитный знак (пунктирная кривая) переход от плато к насыщению



происходит между состояниями димера (из состояния с намагниченностью димера  $\langle S^z \rangle = 1$  к состоянию с  $\langle S^z \rangle = 2$ ). Очевидно, что переходы между состояниями с различными наборами классических степеней свободы не будут приводить к изменению квантовой запутанности.

Когда  $K = J_0$ , существует два параметра порядка (магнитный и квадрупольный моменты). Рис. 2.2(b) показывает полевою зависимостью намагниченности при сохраняющемся квадрупольном моменте в присутствии внутрикристаллического поля. Во всех случаях можно заметить присутствие плато при  $1/5$ -ой при низких значениях магнитного поля. В случаях, когда гейзенбергово взаимодействие имеет антиферромагнитный знак, появляется ещё и плато на  $3/5$  значения насыщения с димерной намагниченностью  $\langle S^z \rangle = 1$ .

## 2.3 Запутанность смешанной спин- $\frac{1}{2}$ -1 даймонд-цепочки

Рассматривая квантовую запутанность двух гейзенберговских спинов одного димера в цепочке, мы прибегаем к так называемому кластерному подходу [62, 93, 94, 114], в рамках которого задача запутанности димера в цепочке сводится к рассмотрению отдельно взятого даймонд-блока. Такой подход, вследствие коммутации отдельных блок-гамильтонианов и сепарабельности основных состояний по отношению к димерам, совпадает с трансферматричным подходом, изложенным в [88, 93] (а также в следующей главе), при рассмотрении критического поведения в основном состоянии, однако количественно отличается от предсказаний запутанности трансферматричного подхода при конечных температурах из-за разности усредняющих ансамблей. При таком рассмотрении надо учесть трансляционную симметрию, наложенную на всю цепочку, которая здесь сводится к (анти-)симметрии по отношению к пермутации  $\sigma_r \leftrightarrow \sigma_{r+1}$  изинговских спинов в рассматриваемом  $r$ -ом блоке.

После точного решения блочной задачи можно построить

$$\rho(T) = \frac{1}{Z_{block}} \sum_{j=1}^{36} e^{-\frac{E_j}{k_B T}} |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \quad (2.14)$$

с блочной статистической суммой

$$Z_{block} = \sum_{\sigma_{r,r+1}=\pm 1/2} \sum_{i=1}^9 e^{-\frac{E_j(\sigma_r, \sigma_{r+1})}{k_B T}}. \quad (2.15)$$

Взятие следа по изинговским степеням свободы приводит к транспонированной по отношению к одному из гейзенберговских спинов матрице плотности димера.

$$\rho^{T_1} = \frac{1}{Z_{block}} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^- & 0 & 0 & 0 & \mathbf{b}_1 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{c}^- \\ 0 & \mathbf{b}_2 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{f} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{c}^+ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{b}_2 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{f} & 0 \\ \mathbf{b}_1 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{e} & 0 & 0 & 0 & \mathbf{m}_1 \\ 0 & \mathbf{f} & 0 & 0 & 0 & \mathbf{m}_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{c}^+ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{f} & 0 & 0 & 0 & \mathbf{m}_2 & 0 \\ \mathbf{c}^- & 0 & 0 & 0 & \mathbf{m}_1 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{a}^+ \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Где,

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^\pm &= 4 \cosh^2 \left( \frac{h \pm 4J_1}{4T} \right) e^{-\frac{(2D \pm 2h) + J_0 + K}{T}}, \\ \mathbf{b}_1 &= -4 \sinh \left( \frac{J_0}{T} \right) e^{-\frac{D-h+K}{T}} \cosh^2 \left( \frac{h - 2J_1}{4T} \right), \\ \mathbf{b}_2 &= 4 \cosh \left( \frac{J_0}{T} \right) e^{-\frac{D-h+K}{T}} \cosh^2 \left( \frac{h - 2J_1}{4T} \right), \\ \mathbf{c}^\pm &= \cosh^2 \left( \frac{h}{4T} \right) \left( \frac{4(\kappa_1^2 + (\kappa_2^2 + 2)e^{\frac{\nu}{T}} + 2)e^{-\frac{2D-J_0+5K+\nu}{2T}}}{(\kappa_1^2 + 2)(\kappa_2^2 + 2)} \pm 2e^{\frac{-2D+J_0-K}{T}} \right) \\ \mathbf{f} &= -\frac{\left( e^{\frac{h}{2T}} + 1 \right)^2 \left( (-\kappa_1^2 - 2)\kappa_2 + \kappa_1(\kappa_2^2 + 2)e^{\frac{\nu}{T}} \right) e^{-\frac{2D+h-J_0+5K+\nu}{2T}}}{(\kappa_1^2 + 2)(\kappa_2^2 + 2)}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} \epsilon &= \frac{\left(e^{\frac{h}{2T}} + 1\right)^2 \left((\kappa_1^2 + 2) \kappa_2^2 + \kappa_1^2 (\kappa_2^2 + 2) e^{\frac{\nu}{T}}\right) e^{-\frac{2D+h-J_0+5K+\nu}{2T}}}{(\kappa_1^2 + 2) (\kappa_2^2 + 2)}, \\ \mathbf{m}_1 &= -4 \sinh\left(\frac{J_0}{T}\right) e^{-\frac{D+h+K}{T}} \cosh^2\left(\frac{h+2J_1}{4T}\right), \\ \mathbf{m}_2 &= 4 \cosh\left(\frac{J_0}{T}\right) e^{-\frac{D+h+K}{T}} \cosh^2\left(\frac{h+2J_1}{4T}\right) \\ \kappa_2 &= \frac{(J_0 - K) (-2D + J_0 + 3K + \nu)}{2J_0^2 - 5J_0K + K(\nu + 2D + 3K)}. \end{aligned}$$

Двух-кутритное состояние редуцированного даймонд-блока, описываемое матрицей (2.16), совпадает с видом транспонированной матрицы плотности отдельно взятой пары частиц со спином 1, описанной в первой главе (формула (1.13)). Характеристическое уравнение на собственные значения  $\mu$  транспонированной матрицы плотности (2.16) после некоторых упрощений можно представить в виде:

$$\begin{aligned} &(\mathbf{f}^2 + (\mathbf{b}_2 - \mu) (\mu - \mathbf{m}_2))^2 (\mathbf{c}^+ - \mu)^2 \times \\ &\times (\mu^3 - \mu^2 (\mathbf{a}^+ + \mathbf{a}^- + \epsilon) + \mu (\mathbf{a}^+ \mathbf{a}^- + \epsilon (\mathbf{a}^+ + \mathbf{a}^-) - \mathbf{b}_1^2 - \mathbf{m}_1^2 - (\mathbf{c}^-)^2) \\ &+ \mathbf{a}^+ \mathbf{b}_1^2 + \mathbf{a}^- \mathbf{m}_1^2 + \epsilon (\mathbf{c}^-)^2 - 2\mathbf{b}_1 \mathbf{c}^- \mathbf{m}_1) = 0. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Как видно, первые два множителя в уравнении предполагают три пары достаточно простых вырожденных решений

$$\begin{aligned} \mu_{1,2} &= \mathbf{c}^+ \\ \mu_{3,4} &= \frac{1}{2} \left( \sqrt{-2\mathbf{b}_2 \mathbf{m}_2 + \mathbf{b}_2^2 + 4\mathbf{f}^2 + \mathbf{m}_2^2} + \mathbf{b}_2 + \mathbf{m}_2 \right) \\ \mu_{5,6} &= \frac{1}{2} \left( -\sqrt{-2\mathbf{b}_2 \mathbf{m}_2 + \mathbf{b}_2^2 + 4\mathbf{f}^2 + \mathbf{m}_2^2} + \mathbf{b}_2 + \mathbf{m}_2 \right) \end{aligned}$$

Остальные же три корня можно найти, решив кубическое уравнение, соответствующее последнему множителю в (2.18). Приводя последнее к каноническому виду и решая подстановкой Виета (см., к примеру, [115]), получаем:

$$\mu_i = w_i - \frac{p_1}{3w_i} - \frac{1}{3}A_2, \quad i = 7 \dots 9$$

где

$$\begin{aligned}
w_7 &= \left( R + \sqrt{R^2 + Q^3} \right)^{\frac{1}{3}}, \\
w_8 &= e^{\frac{2i\pi}{3}} \left( R + \sqrt{R^2 + Q^3} \right)^{\frac{1}{3}}, \\
w_9 &= e^{\frac{4i\pi}{3}} \left( R + \sqrt{R^2 + Q^3} \right)^{\frac{1}{3}}, \\
R &= \frac{p_0}{2}, \quad Q = \frac{p_1}{3}, \\
p_1 &= \frac{1}{3} (3A_1 - A_2^2), \quad p_0 = \frac{1}{27} (9A_1A_2 - 27A_0 - 2A_2^3),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_0 &= \mathbf{a}^- \mathbf{m}_1^2 + \mathbf{a}^+ (\mathbf{b}_1^2 - \mathbf{a}^- \mathbf{e}) - 2\mathbf{b}_1 \mathbf{c}^- \mathbf{m}_1 + (\mathbf{c}^-)^2 \mathbf{e} \\
A_1 &= \mathbf{a}^- \mathbf{e} + \mathbf{a}^+ \mathbf{e} + \mathbf{a}^- \mathbf{a}^+ - \mathbf{b}_1^2 - (\mathbf{c}^-)^2 - \mathbf{m}_1^2 \\
A_2 &= -\mathbf{a}^- - \mathbf{a}^+ - \mathbf{e}.
\end{aligned}$$

Теперь же нахождение запутанных состояний сводится к параметрическому поиску отрицательных решений уравнения (2.18).

Перейдем к изложению основных результатов для квантовой запутанности модели.

### Запутанность при $K = 0$ в отсутствие кристаллического поля

Для понимания особенностей запутанности и квантовых фазовых переходов на рис. 2.3 построено типичное поведение отрицательности, где квадрупольное спаривание и кристаллическое поле  $D$  отсутствуют. Рис. 2.3 (а) показывает зависимость запутанности от однородного магнитного поля и параметра спаривания при антиферромагнитном изинговском взаимодействии ( $J_1 = 1$ ). Как можно увидеть при  $0.5 < J_0 < 1$ , возможен лишь переход между незапутанным состоянием с  $\langle S^z \rangle = 2$  и частично-запутанным состоянием с  $\langle S^z \rangle = 1$  при пересечении линии  $|h| = 2J_0 - 1$ . Этот переход соответствует скачку намагниченности с плато на  $3/5$  значения насыщения к плато на  $1/5$ -ой. Увеличивая гейзенберговское взаимодействие ( $1 < J_0 < 1.5$ ), происходит переход между незапутанным и полностью запутанным состояниями ( $\langle S^z \rangle = 0$ ) при пересечении значения поля  $|h| = 3J_0 - 2$ . Что касается теплового поведения

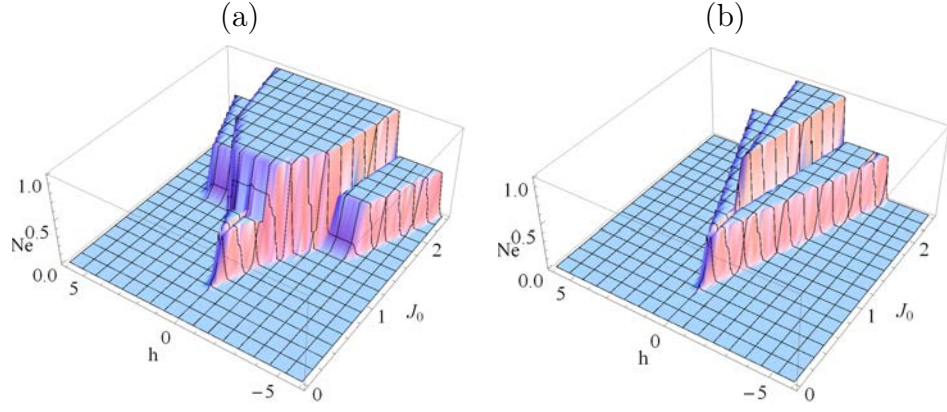


Рис. 2.3: Отрицательность в зависимости от параметра билинейного взаимодействия гейзеберговских спинов  $J_0$  и магнитного поля для (а) антиферромагнитного изинговского взаимодействия  $J_1 = 1$  и (б) ферромагнитного изинговского взаимодействия  $J_1 = -1$  при низких температурах, когда  $K = 0$ ,  $D = 0$ .

запутанности, необходимо заметить, что, вследствие эффектов декогеренции, отрицательность с ростом температуры есть монотонно спадающая функция. В частности, для  $J_0 = \pm J_1$  и  $h = 0$  критическая температура исчезновения запутанности  $T_c = \frac{J_0}{\ln 2.98} \approx 0.915J_0$ , в то время, как для  $J_0 \neq \pm J_1$  и  $h = 0$ ,  $T_c = \frac{J_0 - J_1}{\ln 2.96} \approx 0.921(J_0 - J_1)$ .

### Отрицательность в специальном случае $K = J_0$

Обратим теперь наше внимание на свойства отрицательности в случае присутствия квадрупольного взаимодействия и кристаллического поля. Типичная зависимость отрицательности от магнитного поля и параметра квадрупольного взаимодействия для двух качественно отличающихся случаев значения одноионной анизотропии представлен на рисунке 2.4. Можно заметить, что условие  $K = J_0$  приводит к исчезновению полностью запутанных состояний, здесь максимально возможное значение отрицательности  $Ne = \frac{1}{2}$ . Действительно, как видно из формулы (2.12), в этой точке  $\kappa_1 = 0$ , более того, аналогично этому, во всех волновых функциях, вследствие сохранения квадрупольного момента, вклад членов вида  $|0, 0\rangle$  в запутанность исчезает.

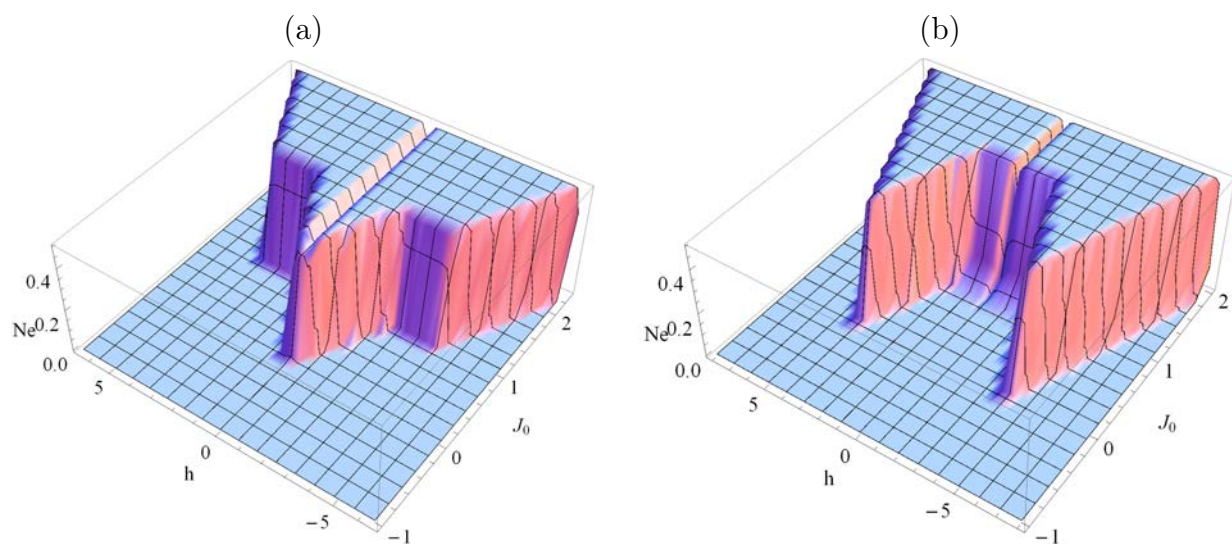


Рис. 2.4: Зависимость отрицательности от параметра  $J_0 = K$  и магнитного поля при фиксированном значении параметра изинговского взаимодействия  $J_1 = 1$  и температуре  $T = 0.1$  и при различных значениях одноионной анизотропии (a)  $D = 1$ , (b)  $D = 3$ .

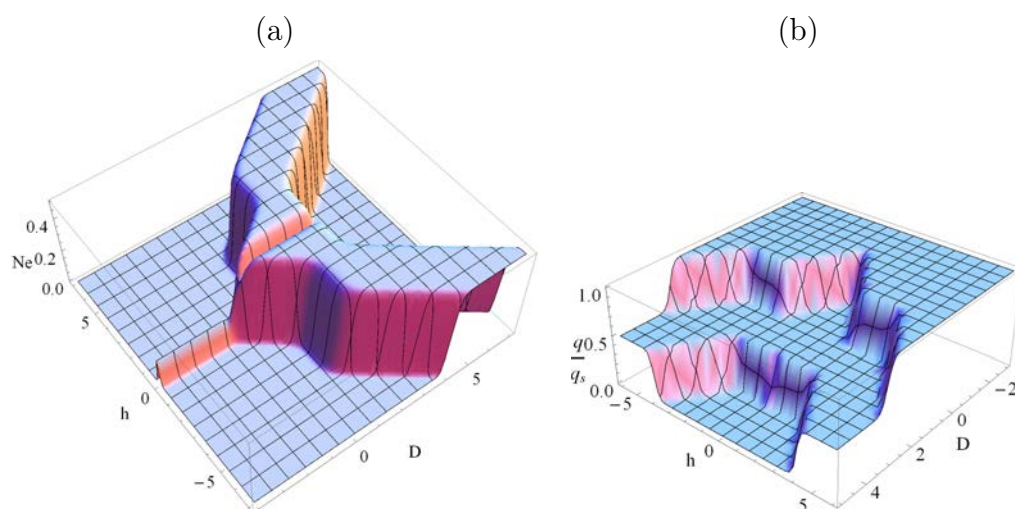


Рис. 2.5: (a) Отрицательность в зависимости от магнитного поля  $h$  и одноионной анизотропии  $D$  и (b) Квадрупольный момент (число частиц) в единицах значения насыщения для тех же значений параметров.

Сравним, наконец, свойства запутанности и квадрупольного момента системы. Рисунок 2.5 (a) показывает зависимость отрицательности от магнитного поля и параметра анизотропии  $D$  при фиксированных значениях пара-

метров обменного взаимодействия  $J_0 = J_1 = K = 1$  и температуре  $T = 0.1$ . Как можно увидеть, существуют лишь два различающихся режима запутанности. Плато на нуле соответствует незапутанному режиму, в то время, как плато на  $Ne = \frac{1}{2}$  соответствует частично запутанному. График на рис. 2.5 (b) показывает зависимость квадрупольного момента от магнитного поля и анизотропии  $D$  при тех же значениях параметров взаимодействия. Здесь можно различать три области отличающихся значений квадрупольного момента. Первая область с нулевым квадрупольным моментом - это область с нулевой запутанностью и димерной намагниченностью  $\langle S^z \rangle = 0$ . Далее область с промежуточным плато квадрупольного момента на  $\frac{1}{2}$ -ой значения насыщения. Здесь система частично запутана с отрицательностью  $Ne = \frac{1}{2}$ . После этого идет область с максимальным (насыщенным) значением квадрупольного момента, где система сепарабельна, и следовательно, незапутанна (за исключением линии  $h = 0$ ).

## 2.4 Выводы

В этой главе было представлено точное решение смешанной спин-1/2 и спин-1 модели Изинга-Гейзенберга на даймонд-цепочке трансфер-матричным методом. Мы изучили свойства магнитного и квадрупольного моментов системы в присутствии и отсутствие квадрупольного взаимодействия и внутрикристаллического поля. Изучения магнитных свойств модели указали на возможность проявления промежуточных плато намагниченности на  $\frac{1}{5}$ -ой и  $\frac{3}{5}$ -ой значения насыщения при определённых значениях входящих в гамильтониан внешних параметров. Можно также подчеркнуть существование промежуточного плато квадрупольного момента на одной-второй значения насыщения в случае антиферромагнитного знака взаимодействия гейзенберговских спинов.

Как и в предыдущей главе, используя отрицательность как количественную меру запутанности, была изучена тепловая запутанность гейзенберговских спинов в произвольном блоке цепочки. В данном подходе изучение запу-

танности сводится к изучению корней достаточно простого полинома. Было установлено, что запутанность сильно зависит от параметров обменного взаимодействия. В частности, было установлено существование нескольких режимов запутанности, которые завязаны на присутствие квадрупольного взаимодействия и одноионной анизотропии. Было также установлено, что в случае отсутствия квадрупольного взаимодействия и внутри-кристаллического и магнитного полей температура исчезновения запутанности есть линейная функция либо от значения билинейного взаимодействия, либо от разницы изинговских и гейзенберговских билинейных взаимодействий.

Рассмотренные в этой главе результаты опубликованы в работе [62].



## Глава 3

# Модель Изинга-Гейзенберга со спином-1 на даймонд- цепочке

В настоящей главе представляется спин-1 модель Изинга-Гейзенберга на даймонд-решётке в присутствии магнитного поля и одноионной анизотропии как изинговских, так и гейзенберговских спинов [88]. Точное решение модели трансферматричным методом позволяет построить полную диаграмму основного состояния. Изучаются возможности формирования магнитных плато при намагничивании. Найдено, что модель может проявлять плато на нуле, одной- и двух-третях значения намагниченности. Представлено качественное описание процесса намагничивания в отдельно взятой  $Ni^{II}$  цепочке в гомометаллической ферримагнитной структуре  $[Ni_3(fum)_2 - (\mu_3 - OH)_2(H_2O)_4]_n \cdot (2H_2O)_n$ . В противопоставление предыдущей главе, где запутанность изучалась в кластерном подходе, здесь изучение производится в рамках изложенного в этой главе трансфер-матричного метода. Представлены аналитические результаты для запутанности в терминах отрицательности для основного состояния. Показано, что одноионная анизотропия понижает запутанность основного состояния. С другой стороны, при тепловом смешении состояний повышение данной анизотропии повышает критическую температуру исчезновения за-

путанности. Излагается тепловое поведение запутанности.

### 3.1 Определение модели со спином-1 на даймонд-цепочке

Рассмотрим теперь уже спин-1 частицы на узлах даймонд-цепочки (рис. 3.1). Взаимодействия между частицами и внешними полями здесь задаются гамильтонианом.

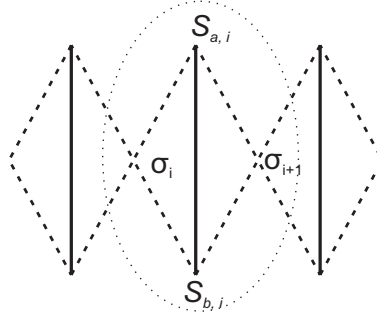


Рис. 3.1: Даймонд-цепочка с изинговскими спин-1 частицами ( $\sigma_i$ ) и квантовым блоком ( $S_{a/b,i}^z$ ) sites.

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i, \\ \mathcal{H}_i &= J \mathbf{S}_{a,i} \mathbf{S}_{b,i} + J_1 (S_{a,i}^z + S_{b,i}^z) (\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z) \\ &\quad - h_H g \mu_B (S_{a,i}^z + S_{b,i}^z) - \frac{h_I g \mu_B}{2} (\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z) \\ &\quad + D_H ((S_{a,i}^z)^2 + (S_{b,i}^z)^2) + \frac{D_I}{2} ((\sigma_i^z)^2 + (\sigma_{i+1}^z)^2). \end{aligned} \quad (3.1)$$

Как и прежде,  $S_{a/b,i}^\alpha$  ( $\alpha = x, y, z$ ) - компоненты спин-1 операторов на узлах с координатами  $(a/b, i)$ , в то время, как  $\sigma_i^z$  -  $z$ -компонента спин-1 оператора, соответствующая изинговской частице на  $i$ -ом узле.  $J$  здесь соответствует  $XXX$  взаимодействию в рамках гейзенберговского блока,  $J_1$  - коэффициент взаимодействия узловых изинговских спинов с вершинами квантового димера. Продольные внутри-кристаллические поля по-разному действуют на

изинговскую и гейзенберговскую подрешетки с соответствующими членами  $D_I$  и  $D_H$ . Магнитным полям, действующим на изинговскую и гейзенберговскую подрешетки, соответствуют  $h_I$  и  $h_H$ . В далее представленных рисунках гиромангнитное отношение взято  $g = 2.2$ . Это значение является характерным для никель содержащих структур [116–118]. Наложённые граничные условия  $\sigma_{N+1}^z = \sigma_1^z$  являются циклическими.

## 3.2 Точное решение модели со спином-1 на даймонд цепочке

Не сложно проверить, что здесь также выполняется коммутационное соотношение  $[\mathcal{H}_i, \mathcal{H}_j] = 0$ , которое позволяет выполнить частичную факторизацию статистической суммы, представляя её в следующем виде

$$Z_N = \sum_{\sigma_i} \prod_{i=1}^N Tr_i \varrho_{\sigma_i, \sigma_{i+1}}, \quad (3.2)$$

где  $\varrho_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} = e^{-\beta \mathcal{H}_i}$ ,  $\beta = (k_B T)^{-1}$  (в этой главе, в отличие от предыдущих, температура представляется не в энергетических единицах, а в единицах абсолютной температуры). Суммирование идет по всем конфигурациям изинговских спинов, рассматривая  $\sigma_i$  как числа  $\sigma_i = \pm 1, 0$ .  $Tr_i$  обозначает операцию взятия следа по гейзенберговским степеням свободы  $i$ -ого блока. Диагонализировав блочный гамильтониан  $\mathcal{H}_i$ , можно получить зависящий от изинговских спинов спектр энергии отдельного даймонд-блока

$$\begin{aligned} E_1 &= -J - \frac{h_I g \mu_B}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) + \frac{D_I}{2} (\sigma_i^2 + \sigma_{i+1}^2) + 2D_H, \\ E_{2,3} &= \pm J - \left( J_1 + \frac{h_I g \mu_B}{2} \right) (\sigma_i + \sigma_{i+1}) + h_H g \mu_B + D_H + \frac{D_I}{2} (\sigma_i^2 + \sigma_{i+1}^2), \\ E_{4,5} &= \pm J + \left( J_1 - \frac{h_I g \mu_B}{2} \right) (\sigma_i + \sigma_{i+1}) - h_H g \mu_B + D_H + \frac{D_I}{2} (\sigma_i^2 + \sigma_{i+1}^2), \\ E_{6,7} &= J + \left( \pm 2J_1 - \frac{h_I g \mu_B}{2} \right) (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \mp 2h_H g \mu_B + \frac{D_I}{2} (\sigma_i^2 + \sigma_{i+1}^2) + 2D_H, \\ E_{8,9} &= \frac{-J \pm \Lambda}{2} - \frac{h_I g \mu_B}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) + \frac{D_I}{2} (\sigma_i^2 + \sigma_{i+1}^2) + D_H, \end{aligned} \quad (3.3)$$

где  $\Lambda = \sqrt{(2D_H - J)^2 + 8J^2}$ . Знание спектра позволяет провести операции взятия частичных следов вдоль гейзенберговских степеней свободы, что делает  $Z_N = \sum_{\sigma_i} \prod_{i=1}^N V_{\sigma_i, \sigma_{i+1}}$  представлением возможным, с  $V_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} = \text{Tr}_i e^{-\beta \mathcal{H}_i} = \sum_{i=1}^9 e^{-\beta E_i(\sigma_i, \sigma_{i+1})}$ .  $V_{\sigma_i, \sigma_{i+1}}$  могут быть рассмотрены как компоненты  $3 \times 3$  матрицы плотности:

$$V_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} = \begin{pmatrix} V_{-1,-1} & V_{-1,0} & V_{-1,1} \\ V_{0,-1} & V_{0,0} & V_{0,1} \\ V_{1,-1} & V_{1,0} & V_{1,1} \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

где матричные индексы по сути есть три возможные проекции изинговских спинов. Учитывая циклические граничные условия, можно записать  $Z_N = \text{Tr}(V^N)$  в трансфер-матричных обозначениях. Следовательно, статистическая сумма может быть представлена через собственные значения трансфер-матрицы  $V_{\sigma_i, \sigma_{i+1}}$ :

$$Z_N = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N. \quad (3.5)$$

Как и прежде, в термодинамическом пределе  $N \rightarrow \infty$  необходимо учитывать лишь вклад наибольшего из собственных значений. Обозначая через  $\lambda$  максимальное собственное значение, свободная энергия на один блок бесконечно длинной цепочки представится в виде:

$$f = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \ln Z_N = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda. \quad (3.6)$$

В качестве параметров порядка (функций отклика) здесь можно рассматривать намагниченность для изинговской и гейзенберговской подрешеток, а также квадрупольный момент на одну изинговскую частицу изинговской же подрешетки (вообще говоря, как и в предыдущей главе, можно было бы рассматривать квадрупольный момент гейзенберговской подрешетки, при условии, что было бы внедрено биквадратное взаимодействие между гейзенберговскими спинами, по интенсивности равное билинейному взаимодействию  $J$ .)

$$m_I = -\frac{\partial f}{\partial h_I}, \quad m_H = -\frac{1}{2} \frac{\partial f}{\partial h_H}, \quad q_I = \frac{\partial f}{\partial D_I}, \quad (3.7)$$

(В последующем магнитное поле будет считаться однородным ( $h_I = h_H$ ); отличие между магнитными полями, действующими на разные подрешетки, было лишь формальным и было введено для удобства расчёта намагниченностей по подрешеткам). Учитывая, что в цепочке из  $N$  блоков существует  $3N$  частиц, мы приходим к выражению для полной намагниченности на одну частицу:

$$m = \frac{1}{3}m_I + \frac{2}{3}m_H. \quad (3.8)$$

### 3.3 Квантовая запутанность в трансфер-матричном подходе

В противопоставление кластерному подходу, рассмотренному в предыдущей главе, здесь применяется метод расчёта квантовой запутанности, который можно назвать трансфер-матричным. Кратко изложим его содержание. Если мы заинтересованы в квантовой запутанности гейзенберговских спинов  $r$ -ого блока в терминах отрицательности, необходимо построить редуцированную матрицу плотности  $\rho_{i,j}$ , зависящую лишь от гейзенберговских степеней свободы. Следовательно, по всем степеням свобод, кроме указанных, необходимо провести операцию взятия следа

$$\rho_{i,j} = \frac{1}{Z_N} \text{Tr}(V^{r-1} R_{i,j} V^{N-r}) = \frac{1}{Z_N} \text{Tr}(V^{N-1} R_{i,j}) \quad (3.9)$$

с

$$R_{i,j} = \begin{pmatrix} \varrho_{i,j}(-1, -1) & \varrho_{i,j}(-1, 0) & \varrho_{i,j}(-1, 1) \\ \varrho_{i,j}(0, -1) & \varrho_{i,j}(0, 0) & \varrho_{i,j}(0, 1) \\ \varrho_{i,j}(1, -1) & \varrho_{i,j}(1, 0) & \varrho_{i,j}(1, 1) \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

а индексы  $i, j = 1 \cdots 9$  соответствуют гейзенберговским спином. Предположим теперь, что  $\{w_1, w_2, w_3\}$  - полный набор векторов, диагонализующих трансфер-матрицу (3.4) в порядке убывания соответствующих собственных значений трансфер-матрицы. Обозначим через  $U$  унитарную матрицу, состав-

ленную из этих векторов (матрица, у которой  $i$ -ый столбец совпадает с  $w_i$ )

$$U = \begin{pmatrix} \frac{(V_{0,0}-\lambda_1)(V_{1,1}-\lambda_1)-V_{0,1}^2}{n_1(V_{-1,1}(\lambda_1-V_{0,0})+V_{-1,0}V_{0,1})} & \frac{(V_{0,0}-\lambda_2)(V_{1,1}-\lambda_2)-V_{0,1}^2}{n_2(V_{-1,1}(\lambda_2-V_{0,0})+V_{-1,0}V_{0,1})} & \frac{(V_{0,0}-\lambda_3)(V_{1,1}-\lambda_3)-V_{0,1}^2}{n_3(V_{-1,1}(\lambda_3-V_{0,0})+V_{-1,0}V_{0,1})} \\ \frac{V_{-1,0}(\lambda_1-V_{1,1})+V_{-1,1}V_{0,1}}{n_1(V_{-1,1}(\lambda_1-V_{0,0})+V_{-1,0}V_{0,1})} & \frac{V_{-1,0}(\lambda_2-V_{1,1})+V_{-1,1}V_{0,1}}{n_2(V_{-1,1}(\lambda_2-V_{0,0})+V_{-1,0}V_{0,1})} & \frac{V_{-1,0}(\lambda_3-V_{1,1})+V_{-1,1}V_{0,1}}{n_3(V_{-1,1}(\lambda_3-V_{0,0})+V_{-1,0}V_{0,1})} \\ \frac{1}{n_1} & \frac{1}{n_2} & \frac{1}{n_3} \end{pmatrix}$$

с

$$n_1 = \sqrt{\frac{(V_{-1,0}(\lambda_1 - V_{1,1}) + V_{-1,1}V_{0,1})^2}{(V_{-1,1}(\lambda_1 - V_{0,0}) + V_{-1,0}V_{0,1})^2} + \frac{((V_{0,0} - \lambda_1)(\lambda_1 - V_{1,1}) + V_{0,1}^2)^2}{(V_{-1,1}(\lambda_1 - V_{0,0}) + V_{-1,0}V_{0,1})^2} + 1},$$

$$n_2 = \sqrt{\frac{(V_{-1,0}(\lambda_2 - V_{1,1}) + V_{-1,1}V_{0,1})^2}{(V_{-1,1}(\lambda_2 - V_{0,0}) + V_{-1,0}V_{0,1})^2} + \frac{((V_{0,0} - \lambda_2)(\lambda_2 - V_{1,1}) + V_{0,1}^2)^2}{(V_{-1,1}(\lambda_2 - V_{0,0}) + V_{-1,0}V_{0,1})^2} + 1},$$

$$n_3 = \sqrt{\frac{(V_{-1,0}(\lambda_3 - V_{1,1}) + V_{-1,1}V_{0,1})^2}{(V_{-1,1}(\lambda_3 - V_{0,0}) + V_{-1,0}V_{0,1})^2} + \frac{((V_{0,0} - \lambda_3)(\lambda_3 - V_{1,1}) + V_{0,1}^2)^2}{(V_{-1,1}(\lambda_3 - V_{0,0}) + V_{-1,0}V_{0,1})^2} + 1}.$$

Можно теперь выразить редуцированную матрицу плотности через трансфер-матрицу и матрицу  $R$  в виде

$$\rho_{i,j} = \frac{1}{Z_N} Tr \left[ U^\dagger R_{i,j} U \begin{pmatrix} \lambda_1^{N-1} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^{N-1} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^{N-1} \end{pmatrix} \right]. \quad (3.11)$$

Выше мы предположили, что  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3$ . Опять в термодинамическом пределе  $(\lambda_{2,3}/\lambda_1)^N \rightarrow 0$  (если наибольшее из собственных значений решений характеристического уравнения первого порядка не имеет себе равных решений). Используя выше указанное в нашем случае, мы получаем, что

$$\varrho = \begin{pmatrix} \mathfrak{A} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathfrak{B}^+ & 0 & \mathfrak{B}^- & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathfrak{C}^+ & 0 & \mathfrak{D} & 0 & \mathfrak{C}^- & 0 & 0 \\ 0 & \mathfrak{B}^- & 0 & \mathfrak{B}^+ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathfrak{D} & 0 & \mathfrak{F} & 0 & \mathfrak{D} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathfrak{G}^+ & 0 & \mathfrak{G}^- & 0 \\ 0 & 0 & \mathfrak{C}^- & 0 & \mathfrak{D} & 0 & \mathfrak{C}^+ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathfrak{G}^- & 0 & \mathfrak{G}^+ & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathfrak{K} \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

с,

$$\begin{aligned}
\mathfrak{A} &= e^{-\beta E_6}, \\
\mathfrak{B}^\pm &= \frac{1}{2} (e^{-\beta E_4} \pm e^{-\beta E_5}) \\
\mathfrak{C}^\pm &= \frac{e^{-\beta E_8}}{2 + \theta^2} + \frac{e^{-\beta E_9}}{2 + \nu^2} \pm \frac{1}{2} e^{-\beta E_1} \quad c\theta = \frac{2D_H - J - \Lambda}{2J} \\
\mathfrak{D} &= -\frac{1}{2J} \left( \frac{e^{-\beta E_8}(2D_H - J - \Lambda)}{2 + \theta^2} + \frac{e^{-\beta E_9}(2D_H - J + \Lambda)}{2 + \nu^2} \right) \\
\mathfrak{F} &= \frac{1}{4J^2} \left( \frac{e^{-\beta E_8}(2D_H - J - \Lambda)^2}{2 + \theta^2} + \frac{e^{-\beta E_9}(2D_H - J + \Lambda)^2}{2 + \nu^2} \right) \\
\mathfrak{G}^\pm &= \frac{1}{2} (e^{-\beta E_2} \pm e^{-\beta E_3}) \\
\mathfrak{K} &= e^{-\beta E_7}.
\end{aligned}$$

Знание редуцированной матрицы плотности даёт возможность провести её частичную транспонацию и расчёт запутанности. Необходимо подчеркнуть, что при низких температурах применённый метод даёт тот же результат, что и кластерный подход.

### 3.4 Основные состояния модели Изинга-Гейзенберга со спином-1

Для полного понимания образования тепловой запутанности, а также плато намагниченности, опишем основное состояние модели в зависимости от входящих в гамильтониан параметров.

Когда магнитное поле выключено, возможно проявление шести отличающихся фаз: две ферромагнитные ( $FRI1$  и  $FRI2$ ), три антиферромагнитные (две квантово-антиферромагнитные, симметричная по отношению к перестановке гейзенберговских спинов  $SQAF$  и антисимметричная по отношению к той же перестановке  $AQAF$ , а так же  $AFM$ ), и фрустрированное  $FRU$  (рис.3.2). Эти состояния могут быть описаны следующими волновыми функциями, параметрами порядков, а также отрицательностью (ниже в прямых произведениях первый кет-вектор  $|\cdot\rangle_i$  соответствует изинговскому  $i$ -ой эле-

ментарной ячейки, в то время как второй  $|\bullet, \bullet\rangle_{a_i, b_i}$  - гейзеберговским спинам той же ячейки).

$$|FRI1\rangle = \prod_{i=1}^N |1\rangle \otimes |-1, -1\rangle, \quad E = J - 4J_1 + hg\mu_B + 2D_H + D_I$$

$$m_I = g\mu_B, \quad m_H = -g\mu_B, \quad m = -\frac{1}{3}g\mu_B, \quad q_D = 1, \quad Ne = 0.$$

$$|FRI2\rangle = \prod_{i=1}^N |-1\rangle \otimes |+1, +1\rangle, \quad E = J - 4J_1 - hg\mu_B + 2D_H + D_I$$

$$m_I = -g\mu_B, \quad m_H = g\mu_B, \quad m = \frac{1}{3}g\mu_B, \quad q_D = 1, \quad Ne = 0.$$

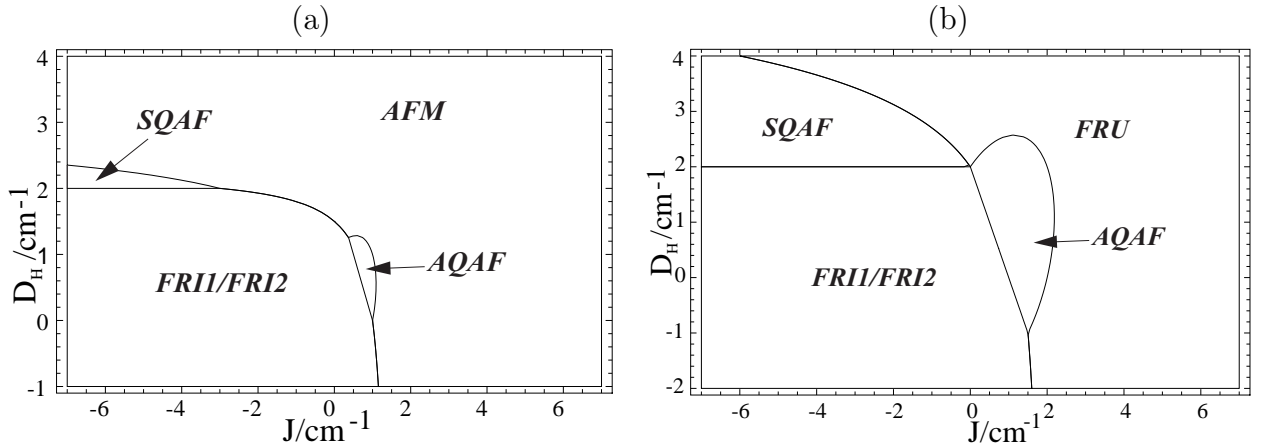


Рис. 3.2: Основное состояние в плоскости  $J - D_H$  в отсутствие магнитного поля при (a)  $J_1 = D_I = 1\text{cm}^{-1}$ , (b)  $J_1 = 1\text{cm}^{-1}$ ,  $D_I = -1\text{cm}^{-1}$ .

$$|SQAF\rangle = \begin{cases} \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle \otimes (|0, -1\rangle + |-1, 0\rangle) \\ \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}} |-1\rangle \otimes (|0, 1\rangle + |1, 0\rangle) \end{cases},$$

$$E = J - 2J_1 + D_H + D_I$$

$$m_I = \pm g\mu_B, \quad m_H = \mp \frac{1}{2}g\mu_B, \quad m = 0, \quad q_D = 1,$$

$$Ne(|SQAF_1\rangle) = 1/2, \quad Ne(|SQAF_2\rangle) = 1/2, \quad Ne(|SQAF\rangle) = \sqrt{2}/4.$$



$$\begin{aligned}
|AQAF\rangle &= \begin{cases} \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \otimes (|-1, 0\rangle - |0, -1\rangle) \\ \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}}|-1\rangle \otimes (|1, 0\rangle - |0, 1\rangle) \end{cases}, \\
E &= -J - 2J_1 + D_H + D_I \\
m_I &= \pm g\mu_B, \quad m_H = \mp \frac{1}{2}g\mu_B, \quad m = 0, \quad q_D = 1, \\
Ne(|AQAF_1\rangle) &= 1/2, \quad Ne(|AQAF_2\rangle) = 1/2, \quad Ne(|AQAF\rangle) = \sqrt{2}/4.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|AFM\rangle &= \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{2 + \nu^2}}|0\rangle \otimes (|1, -1\rangle - \nu|0, 0\rangle + |-1, 1\rangle), \\
E &= \frac{1}{2}(-J - \Lambda + 2D), \\
m_I &= 0, \quad m_H = 0, \quad m = 0, \quad q_D = 0, \quad Ne = \frac{1 + 2\sqrt{\frac{\Lambda\nu}{J} - 2}}{2 + \nu^2},
\end{aligned}$$

где  $\nu = \frac{2D_H - J + \Lambda}{2J}$ . Не сложно показать, что запутанность для этого состояния максимальна при  $D_H = 0$  для  $J > 0$ , и  $J = D_H$  когда  $J < 0$ . В точке  $\nu = 0$  вклад члена  $|0, 0\rangle$  в конфигурации гейзенберговских спинов нулевой и запутанность равняется одной-второй. С другой стороны, в пределе, когда  $D_H$  велико, вклад всех членов, кроме  $|0, 0\rangle$ , становится пренебрежимо малым, следовательно, система становится сепарабельной и незапутанной. Естественно, что не при всех выше указанных значениях параметров это состояние будет основным. Следовательно, одноионная анизотропия гейзенберговских

спинов, вообще говоря, уменьшает запутанность основного состояния.

$$|FRU\rangle = \begin{cases} |\phi_1\rangle \\ |\phi_2\rangle \end{cases};$$

$$|\phi_{1,2}\rangle = \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{2+\nu^2}} |\pm 1\rangle_i \otimes (|1, -1\rangle - \nu|0, 0\rangle + |-1, 1\rangle)_{a_i, b_i}, \quad (3.13)$$

$$E(\phi_{1,2}) = \frac{1}{2} (-J - \Lambda \pm 2hg\mu_B + 2D_H + 2D_I)$$

$$m_I = 0, \quad m_H = 0, \quad m = 0, \quad q_I = 1, \quad Ne(|\phi_{1,2}\rangle) = \frac{1 + 2\sqrt{\frac{\Lambda\nu}{J} - 2}}{2 + \nu^2}.$$

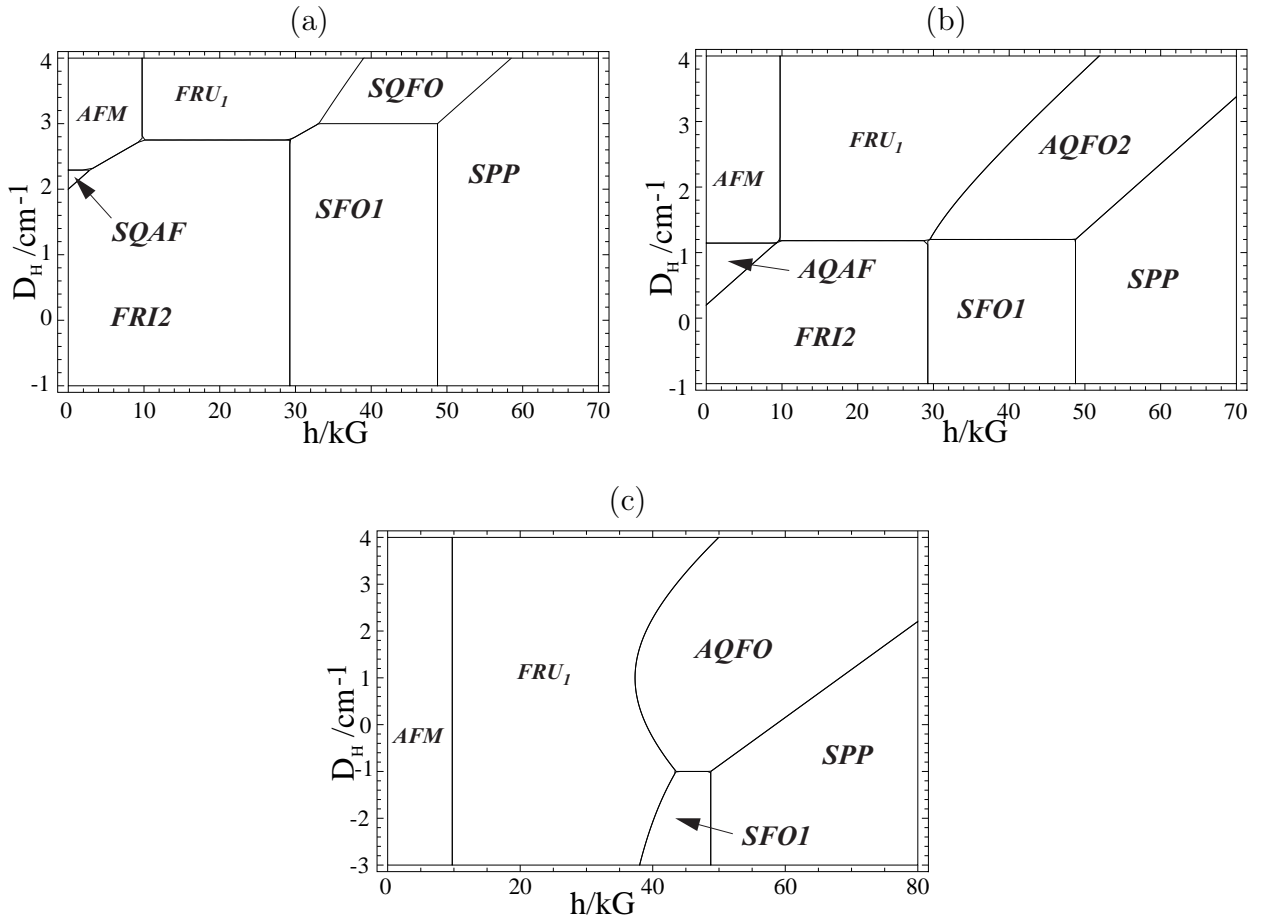


Рис. 3.3: Основное состояние в плоскости  $h - D_H$  для (a)  $J = -6 \text{ cm}^{-1}$  (b)  $J = 0.9 \text{ cm}^{-1}$  (c)  $J = 2 \text{ cm}^{-1}$ , когда  $J_1 = D_I = 1 \text{ cm}^{-1}$ .

Когда магнитное поле включено, появляются новые фазы (см. рис. 3.3). А именно две симметричные по отношению к гейзенберговским спинам ферромагнитные состояния (квантовое  $SQFO$  и  $SFO1$ ; последнее было расщепле-

но из смеси  $SFO1/SFO2$  магнитным полем), антисимметричное квантовое ферромагнитное состояние, а также насыщенно-парамагнитное  $SPP$ . Ниже следует их однозначное представление:

$$|SQFO\rangle = \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle_i \otimes (|1, 0\rangle + |0, 1\rangle)_{a_i, b_i},$$

$$E = J + 2J_1 - 2hg\mu_B + D_I + D_H,$$

$$m_I = g\mu_B, \quad m_H = \frac{1}{2}g\mu_B, \quad m = \frac{2}{3}g\mu_B, \quad q_I = 1, \quad Ne = 1/2.$$

$$|SFO1\rangle = \prod_{i=1}^N |0\rangle_i \otimes |1, 1\rangle_{a_i, b_i}, \quad E = J - 2hg\mu_B + 2D_H,$$

$$m_I = 0, \quad m_H = g\mu_B, \quad m = \frac{2}{3}g\mu_B, \quad q_I = 0.$$

$$|SFO2\rangle = \prod_{i=1}^N |0\rangle_i \otimes |-1, -1\rangle_{a_i, b_i}, \quad E = J + 2hg\mu_B + 2D_H,$$

$$m_I = 0, \quad m_H = -g\mu_B, \quad m = -\frac{2}{3}g\mu_B, \quad q_I = 0, \quad Ne = 0.$$

$$|AQFO\rangle = \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle_i \otimes (|1, 0\rangle - |0, 1\rangle)_{a_i, b_i},$$

$$E = -J + 2J_1 - 2hg\mu_B + D_I + D_H,$$

$$m_I = g\mu_B, \quad m_H = \frac{1}{2}g\mu_B, \quad m = \frac{2}{3}g\mu_B, \quad q_I = 1, \quad Ne = 1/2.$$

$$|SPP\rangle = \prod_{i=1}^N |1\rangle_i \otimes |1, 1\rangle_{a_i, b_i}, \quad E = J + 4J_1 - 3hg\mu_B + D_I + D_H,$$

$$m_I = g\mu_B, \quad m_H = g\mu_B, \quad m = g\mu_B, \quad q_I = 1, \quad Ne = 0.$$

Очевидно, что положительное магнитное поле сделало состояние  $FRI2$  предпочтительнее смеси  $FRI1/FRI2$ . В конце на рис. 3.4 представлены фазовые диаграммы в плоскости  $D_I - D_H$  при разных значениях гейзенберговского взаимодействия.

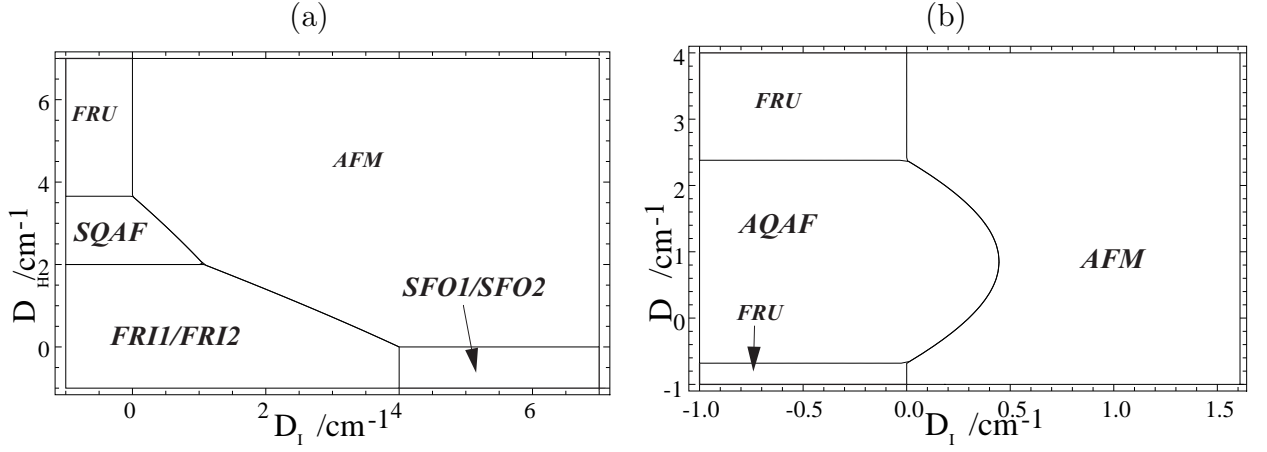


Рис. 3.4: Основное состояние в плоскости  $D_I - D_H$ , когда магнитное поле выключено для (a)  $J = -4\text{cm}^{-1}$ ,  $J_1 = 1\text{cm}^{-1}$ , (b)  $J = 1.7\text{cm}^{-1}$ ,  $J_1 = 1\text{cm}^{-1}$ .

### 3.5 Магнитные плато модели Изинга-Гейзенберга со спином-1

Включение одноионной анизотропии широко обогащает образование магнитных плато на нуле, одной- и двух-третях значения насыщения. К примеру, если

$$D_I > 0 \quad \text{и} \quad J < \frac{D_I(4J_1 - D_I)}{3D_I - 4J_1} \quad (3.14)$$

(когда  $D_I = J_1 = 1\text{cm}^{-1}$   $J < -3$ ), переходы вдоль применения магнитного поля идут по одной из ниже изложенных последовательностей (см. 3.3 (a)):

- при  $2J_1 < D_H < \frac{1}{2} \left( \sqrt{4D_I^2 + 4D_I(3J - 4J_1) + J^2 - 24JJ_1 + 16J_1^2} + J \right)$  по пути  $SQAF - FRI2 - SFO1 - SPP$ ,
- при  $D_H > \frac{1}{2} \left( \sqrt{4D_I^2 + 4D_I(3J - 4J_1) + J^2 - 24JJ_1 + 16J_1^2} + J \right)$  в порядке  $AFM - FRU_1 - SQFO - SPP$ ,
- в то время, как переходы  $FRI1 - SFO1 - SPP$  происходят при  $D_I < 2J_1$ .

Необходимо также подчеркнуть, что последние два перехода при не очень больших магнитных полях образуют плато при нулевой намагниченности.

Более того, эти сценарии намагничивания подразумевают ещё образования плато квадрупольного момента изинговской подрешетки по следующим последовательностям  $q_I = 1, 0, 1$ ,  $q_I = 1, 1, 1$  and  $q_I = 0, 1, 1$  при низких температурах. Когда

$$D_I > 0 \quad \text{и} \quad \frac{D_I(4J_1 - D_I)}{3D_I - 4J_1} < J < \frac{1}{16}(12J_1 - D_I - \sqrt{(11D_I - 36J_1)(3D_I - 4J_1)}), \quad (3.15)$$

намагничивание происходит по похожим, но немного отличающимся сценариям (рис. 3.3(b)):

- $AQAF - FRI2 - SQFO - SPP$ , когда  $D_H < 2J_1 - 2J$ ,
- $FRI2 - SQFO - SPP$ , когда  $2J_1 - 2J < D_H < \frac{1}{7}(|J_1 - D_I| + 4J_1 - 2D_I)$ ,
- при  $D_H > \frac{1}{7}(|J_1 - D_I| + 4J_1 - 2D_I)$  система намагничивается по последовательности  $AFM - FRU_1 - AQFO2 - SPP$ .

Для того чтобы проиллюстрировать процесс намагничивания в нескольких выше указанных случаях, мы построили намагниченность при низких температурах как функцию магнитного поля на рис. 3.5.

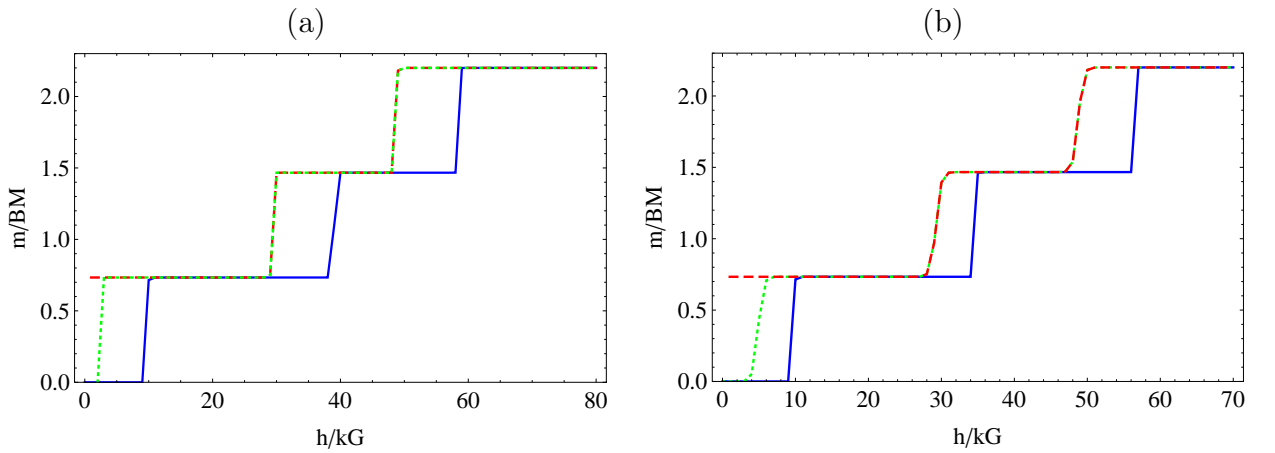


Рис. 3.5: Намагниченность в единицах боровского магнетона, когда  $J = -6cm^{-1}$ ,  $J_1 = D_I = 1cm^{-1}$  и (a)  $D_H = 4cm^{-1}$  (сплошная линия),  $D_H = -1cm^{-1}$  (пунктирная кривая),  $D_H = 2.25cm^{-1}$  (пунктирно-точечная кривая), (b)  $J = 0.9cm^{-1}$  и  $D_H = 2cm^{-1}$  (сплошная кривая),  $D_H = 0.7cm^{-1}$  (пунктирная кривая)  $D_H = -1cm^{-1}$  (пунктирно-точечная кривая), все при  $T = 0.01K$ .

### 3.6 Качественное описание процесса намагничивания



Одной из интересных задач материаловедения является синтезирование новых молекулярных магнитных структур. В работе [116] Коначаром и соавторами было представлено трёхмерное гомометаллическое соединение, обладающее спонтанной намагниченностью при температурах ниже 6 K. Гидротермальная обработка  $Ni_2(NO_3)_2 \cdot 6 H_2O$  динатриевым фумаратом  $Na_2(fum)$  (где  $fum := CO_2CH = CHCO_2$ ) при температуре 443 K приводит к образованию  $[Ni_3(fum)_2 - (\mu_3 - OH)_2(H_2O)_4]_n \cdot (2H_2O)_n := \mathbf{A}$  [116].

Рассмотрим теперь специальный случай взаимодействий, который, как нам кажется, качественно описывает процесс намагничивания отдельно взятой цепочки в  $\mathbf{A}$ . Анализ  $\mathbf{A}$  рентгеновским излучением показал образование трёхмерной структуры, составленной из восьмигранных элементов с  $Ni^{II}$  в вершинах. Эти цепочки включают два кристаллографически независимых иона никеля: поочередно следующие друг за другом пары  $Ni(1)$  и  $Ni(1')$ , симметричные по перестановке последних, и  $Ni(2)$ .

Исследования магнитной восприимчивости  $\chi$  соединения  $\mathbf{A}$  [116] указывают на ферромагнитное поведение системы. Объяснение магнитного поведения системы кроется в следующем. Как уже указывалось, вся структура состоит из цепочек с гидроксо- и карбоксилато- мостов (рис. 3.6). В гидроксо-мостах углы в  $Ni - O(H) - Ni$  лежат в пределах, для которых наблюдается ферромагнитное спаривание между  $Ni^{II}$  центрами [117, 118]. Численные стимуляции показывают в [117] для того же моста в похожей структуре наилучшее схождение с экспериментальными данными получают при  $J = -18,6 \text{ cm}^{-1}$ ). Следовательно, для данного сегмента ожидается основное состояние с  $S = 2$ . Между тем, взаимодействие между этим ферромагнитным сегментом и отдельно взятым центром  $Ni(2)$  осуществляется одним гидроксо- и карбоксилато-мостами, приводя к антиферромагниту вза-

имодействию сегментов с  $S = 1$  и  $S = 2$  и, следовательно, к ферромагнитному поведению всей цепочки. Мы будем предполагать, что ферромагнитное взаимодействие в рамках сегмента пары  $Ni(1)$  выполняется гейзенберговским образом, в то время, как антиферромагнитное взаимодействие между  $Ni(1)$  и  $Ni(2)$  - изинговским. Следует отметить, что между соседними уже

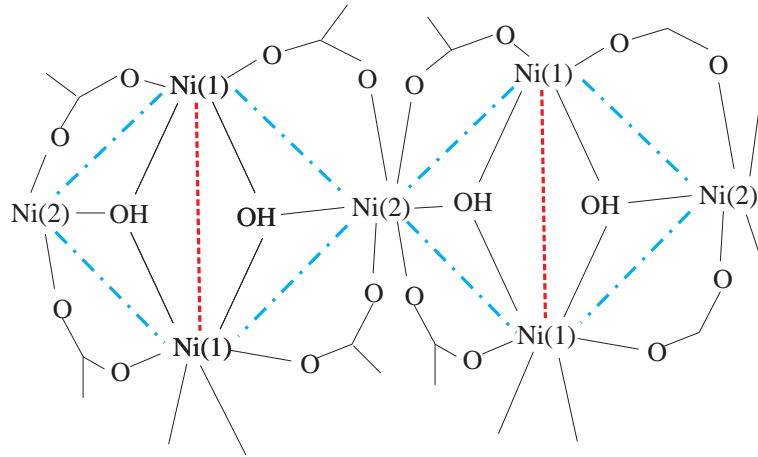


Рис. 3.6: Молекулярная структура цепочки  $Ni^{II}$  с налаженными эффективными магнитными взаимодействиями (штриховой пунктир соответствует ферромагнитному взаимодействию, штрих-пунктир - антиферромагнитному)

описанными цепочками существует ферромагнитное взаимодействие, которое приводит к ферромагнитности всей структуры при температурах ниже  $T = 6 \text{ K}$ . Измерения в [116] указывают на скачок намагниченности при  $h = 0$ , существование магнитного плато на  $2/3$  значения насыщения при малых магнитных полях ( $0.2 - 0.5 \text{ kG}$ ). Как можно увидеть из рис. 3.3(а), единственная возможность осуществления перехода из ферромагнитного основного состояния к состоянию с плато на двух-третях при намагничивании предоставляется при переходах  $FRI2-SFO1$  (при этом скачок при нуле происходит вследствие того, что при включении магнитного поля состояние  $FRI2$  становится предпочтительнее смеси  $FRI1/FRI2$ ). Существование такого перехода в рамках модели Изинга-Гейзенберга на даймонд-решетке является следствием включения внутри-кристаллического поля и одноионной анизотропии  $D_I$ , в то время, как существование и место перехода не зави-

сят от  $D_H$  (для сравнения, в [98], где изучалось поведение похожей модели без одноионной анизотропии, такой переход отсутствует). Как можно увидеть, переход  $FRI-SFO1$  происходит при намного более высоких полях, чем в описанном соединении, это объясняется тем, что в реальном соединении существуют ферромагнитные взаимодействия между соседними цепочками, которые можно усредненно считать эквивалентными добавочному самосогласованному полю. Последнее приведёт необходимое для перехода критическое внешнее поле к более низким температурам, а длина плато станет короче (эффективное самосогласованное поле растёт с внешним полем нелинейным образом). На рис. 3.5(а) пунктирная линия соответствует именно описанному выше случаю (хотя, как уже отмечалось,  $D_H$  не играет существенной роли).

### 3.7 Квантовая запутанность в зависимости от температуры и магнитного поля

В этом разделе мы концентрируем наше внимание на запутанности двух гейзенберговских спинов в даймонд-цепочке в нескольких интересных случаях. Рассмотрим сперва модуляцию максимально запутанных основных состояний. Как было видно из описания основных состояний, единственными кандидатами на эту роль являются состояния  $AFM$  и  $FRU$ . С другой стороны, меняя значение одноионной анизотропии гейзенберговских спинов, можно изменять саму запутанность. Для иллюстрации сказанного, а также резких переходов и плато запутанности, мы построили график зависимости запутанности от магнитного поля для разных значений параметра анизотропии  $D_H$  на рис. 3.7(а). Как можно увидеть, переход  $AFM - FRU_1$  на данной диаграмме не отражается (ср. рис. 3.3(с)), поскольку переход происходит между различными упорядочениями, по сути, классических степеней свободы (изинговских спинов). Следовательно, рассмотрение лишь магнитной восприимчивости как свидетельства запутанности (entanglement witnesses) не достаточно - необходимо ещё добавочное рассмотрение восприимчивости квадрупольного



момента в случае сохранения последнего (как и эквивалентно магнитной восприимчивости гейзенберговской подрешетки). Рост одноионной анизотропии с нулевого значения приводит к уменьшению запутанности. При значении анизотропии  $D_H = \frac{1}{4} (1 + 2J + \sqrt{1 + 32J^2})$   $Ne = 1/2$  (три плато отрицательности для состояний  $AFM, FRU_1$  и  $AQFO$  находятся на одном и том же уровне). Резюмируя, можно утверждать, что для рассматриваемой модели запутанность основного состояния, вообще говоря, понижается одноионной анизотропией  $D_H$ . Несмотря на то, что введение  $D_H$  в представленном выше

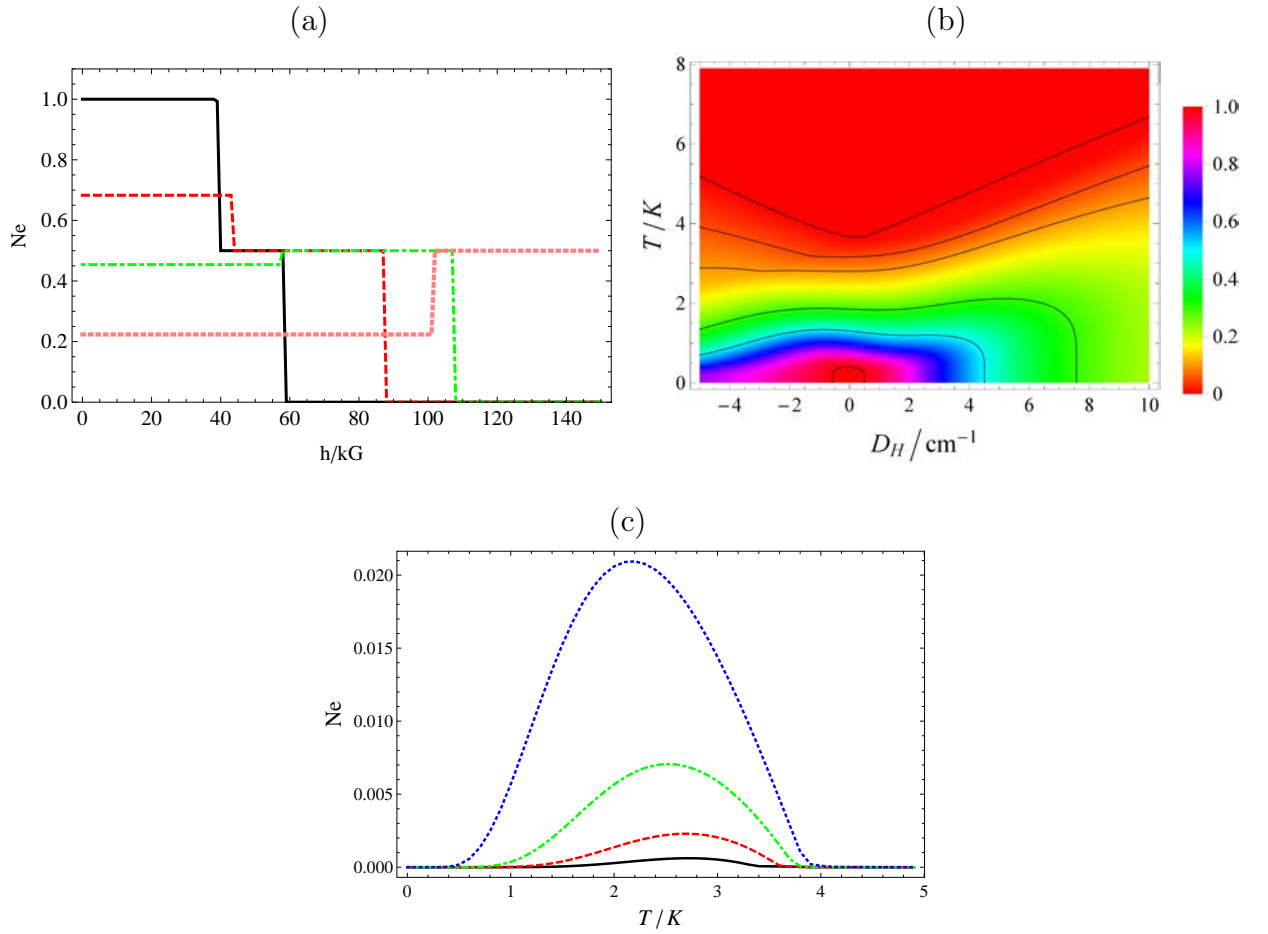


Рис. 3.7: (a) Отрицательность в зависимости от магнитного поля для различных значений одноионной анизотропии  $D_H = 0, 3, 5, 10 cm^{-1}$  (сплошная, пунктирная, точечно-пунктирная и точечная кривые соответственно) когда  $J = 2 cm^{-1}$  при  $T = 10^{-4} K$ , (b) Плотностной график отрицательности с линиями постоянной запутанности при  $Ne = 0.99, 0.5, 0.3, 0.1, 0.05, 0$  в зависимости от температуры и  $D_H$ , когда  $h = 0$ . (c)  $Ne$  как функция от температуры, когда  $h = 100 kG$  и  $D_H = 0, 1, 2, 3 cm^{-1}$  (сплошная, пунктирная, точечно-пунктирная и точечная кривые соответственно). Везде  $J_1 = D_I = 1 cm^{-1}$ .

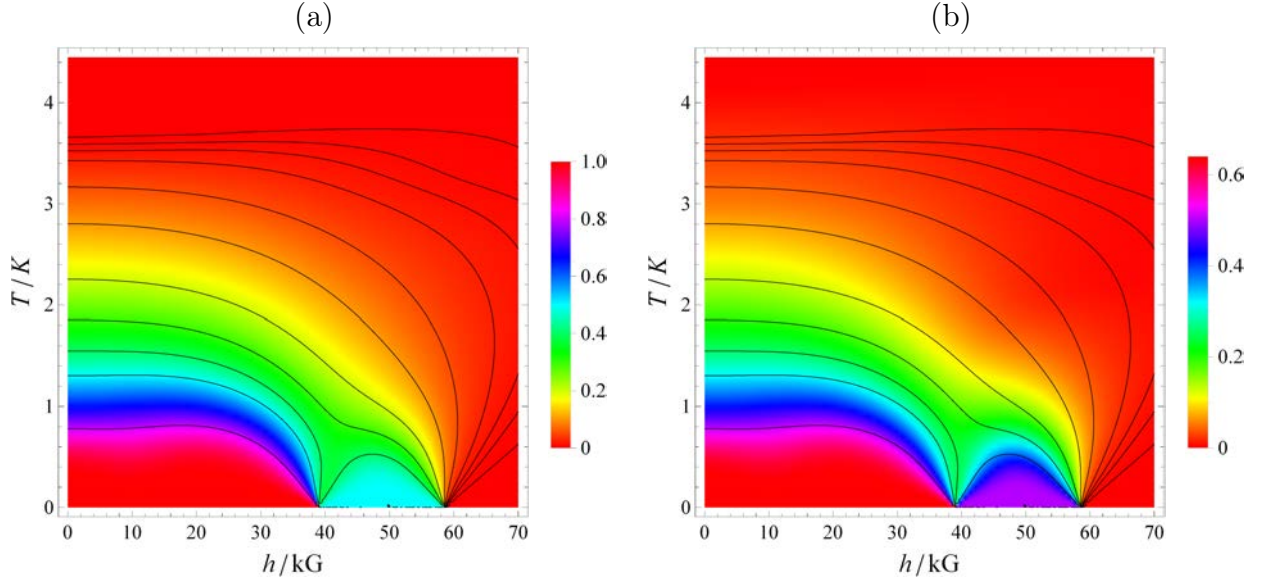


Рис. 3.8: (а) Плотностной график отрицательности, когда  $J = 2\text{cm}^{-1}$ ,  $D_H = 0$  и  $J_1 = D_I = 1\text{cm}^{-1}$  с линиями постоянной запутанности при  $Ne = 0, 0.005, 0.01, 0.02, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.8$ . (б)  $J = -6\text{cm}^{-1}$ ,  $D_H = 4\text{cm}^{-1}$  и  $J_1 = D_I = 1\text{cm}^{-1}$  с линиями постоянной запутанности при  $Ne = 0, 0.005, 0.01, 0.02, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ .

случае понижает запутанность основного состояния, оно также делает некоторые возбуждённые запутанные состояния более достигаемыми, вследствие чего критическая температура исчезновения запутанности повышается (см. рис.3.7(b)). Более того, как можно увидеть из рис.3.7(c), при высоких магнитных полях, когда основным состоянием модели является незапутанное состояние *SPP*, тепловые эффекты могут повышать квантовую запутанность.

Наконец, на рис. 3.8 представлен плотностной (градиентный) график отрицательности  $Ne(h, T)$  для двух случаев: первый - когда существует возможность достижения максимальной запутанности для основного состояния ( $J > 0$ ,  $D_H = 0$ ), и второй - когда введение одноионной запутанности превращает основное состояние лишь в частично запутанное (рис. 3.8(b)). Как можно увидеть на этих графиках, до тех пор, пока основное состояние модели не является *SPP*, критическая температура исчезновения запутанности слабо зависит от значения магнитного поля. После критического для основ-

ного состояния значения магнитного поля (когда в основном состоянии происходит переход к *SPP*) при близких к нулю температурах система незапутанная. При повышении температуры досягаемость возбуждённых запутанных состояний превращает состояние в тепловое запутанное. В этой области ( $h \approx 60 - 80kG$  для представленных на рис. 3.8 графиков) критическая температура исчезновения сильно зависит от значения магнитного поля. Более высокие магнитные поля делают систему незапутанной.

### 3.8 Выводы

В этой главе трансфер-матричным методом была решена модель Изинга-Гейзенберга со спином-1 с одноионной анизотропией изинговских и гейзенберговских спинов. Была построена полная диаграмма основного состояния. Было установлено, что модель, в зависимости от параметров, включенных в гамильтониан, может проявлять различные ферромагнитные, ферримагнитное, антиферромагнитные, а также фрустрированные состояния. Анализ низкотемпературного намагничивания показывает возможность появления промежуточных магнитных плато на нуле одной-трети и двух-третях значения насыщения, которые составляют весь набор промежуточных плато, предсказываемых условием необходимости Ошикавы-Яманаки-Афлека [95], с периодом основного состояния, равным единице.

Было показано, что изученная в настоящей главе модель качественно описывает процесс намагничивания соединения **A** с последующими переходами от ферримагнитного к ферромагнитному, а в последующем и к парамагнитному состояниям.

Трансфер-матричным методом была посчитана отрицательность пары гейзенберговски спинов внутри цепочки. Были получены аналитические выражения для отрицательности во всех основных состояниях. Было установлено, что существуют всего две возможности максимального запутывания гейзенберговских спинов: во-первых, в антиферромагнитном и, во-вторых, во фрустрированном состояниях. Как в первом, так и во втором случаях

максимальное запутывание не возможно при отличной от нуля одноионной анизотропии гейзенберговских спинов. Однако при тепловом запутывании, несмотря на уменьшение запутанности в основном состоянии, одноионная анизотропия повышает запутанность при конечных температурах. Было также установлено, что до значения полей, при которых происходит переход к парамагнитному состоянию, магнитное поле слабо влияет на температуру исчезновения запутанности.

Рассмотренные в этой главе результаты опубликованы в работе [88].

# Заключение

Основные результаты диссертации:

- В первой главе диссертации были представлены результаты для двух-частичной квантовой запутанности в терминах отрицательности в системе двух и трех частиц со спином 1, взаимодействующих по общему виду гамильтониана, включающего биквадратное взаимодействие, одно-ионную анизотропию, а также магнитное поле. Изучены влияния на запутанность всех параметров, входящих в гамильтониан. В частности, установлено, что одно-ионная анизотропия понижает квантовую запутанность. Было установлено, что происходящие при нулевой температуре переходы между состояниями с различными намагниченностью и квадрупольным моментом в спин-1 модели Гейзенберга на двух- и трехчастичных кластерах сопровождаются характерными изменениями квантовой запутанности. Более того, запутанность как мера чисто квантовых корреляций может быть использована для понимания природы того или иного перехода. И наоборот, однозначная связь между фазовыми диаграммами основного состояния и квантовой запутанности может позволить делать предсказания о запутанности состояния, исходя из измеримых параметров.
- Для анизотропной спин-1 модели Гейзенберга на малочисленных кластерах было установлено существование режимов анизотропии, позволяющих тепловым образом запутать систему, которая при тех же параметрах незапутанна в основном состоянии.

- Во второй главе для спин- $1/2$ – $1$  смешанной модели Изинга-Гейзенберга посчитана квантовая запутанность в кластерном подходе. Установлено, что при намагничивании переходы, обусловленные изменениями состояний изинговских степеней свободы, не приводят к изменению квантовой запутанности.
- В третьей главе для модели Изинга-Гейзенберга со спином- $1$  на даймонд-цепочке в трансфер-матричном подходе была точно построена двухчастичная редуцированная матрица плотности, что позволяет точно предсказывать квантовые корреляции внутри даймонд-блока как при нулевой, так и при конечных температурах.
- Было установлено, что одно-ионная анизотропия гейзенберговских спинов убирает возможность максимального запутывания гейзенберговских спинов в основном состоянии для модели на даймонд-цепочке со спином единица, в то же время повышая температуру исчезновения запутанности. Расчёты показали, что в довольно широком интервале магнитных полей температура исчезновения запутанности слабо зависит от значения магнитного поля.
- Точное решение и построение намагниченности позволили установить, что для спин- $1/2$ – $1$  смешанной и спин- $1$  Изинг-Гейзенберговской моделей все промежуточные магнитные плато, предсказываемые правилом Ошикавы-Яманаки-Афлека [95], с периодом единица проявляются в моделях.
- Показано, что в изученных моделях при квантовых фазовых переходах, обусловленных переориентацией гейзенберговских спинов, квантовая запутанность претерпевает скачкообразные изменения.
- Показано, что спин- $1$  модель Изинга-Гейзенберга на даймонд-цепочке может грубо описывать фазовую диаграмму основного состояния отдельного гомометаллического соединения [116] при учёте одно-ионной анизотропии изинговских спинов.

## Благодарности

В заключение автор выражает искреннюю благодарность своему научному руководителю профессору Н.С. Ананикяну за постановку задач и плодотворные обсуждения. Хотелось бы также выразить благодарность профессору В.А. Осипову за полезные обсуждения и подсказки. Автор также выражает благодарность своим соавторам Л.Н. Ананикяну, В.В. Оганнисяну и А.Н. Кочаряну. Благодарю также своих оппонентов - профессора О.В. Тихонову, Т.Акопяна, а также профессора М.В. Федорова. Автор благодарен А.Г. Торосян за помощь в правке манускрипта. Благодарю руководство Лаборатории Теоретической Физики им. Н.Н. Боголюбова за предоставленную возможность для выполнения диссертационной работы.

# Литература

- [1] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?* *Phys. Rev.* **47**, 777 (1935).
- [2] E. Schrödinger, *Discussion of Probability Relations between Separated Systems*, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **31**, 04, 555, (1935).
- [3] J.S. Bell, *On The Einstein Podolsky Rosen Paradox*, *Physics* **1 (3)**, 195 (1964).
- [4] J.J. Sakurai *Modern Quantum Mechanics*, (1994).
- [5] A. Aspect, P. Grangier, G. Roger, *Experimental Realization of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm Gedankenexperiment: A New Violation of Bell's Inequalities*, *Phys. Rev. Lett.* **49** (2), 91 (1982).
- [6] M. A. Nielsen, I. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* Cambridge University Press, Cambridge, England, (2000).
- [7] K. Mattle, H. Weinfurter, P. G. Kwiat, A. Zeilinger, *Dense Coding in Experimental Quantum Communication*, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4656 (1996).
- [8] Y. Yeo and W. K. Chua, *Teleportation and Dense Coding with Genuine Multipartite Entanglement*, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 060502 (2006).
- [9] C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres, W. K. Wootters,



- Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels, Phys. Rev. Lett.* **70**, 1895 (1993).
- [10] C. H. Bennett, G. Brassard, S. Popescu, B. Schumacher, J. Smolin, W. K. Wootters, *Purification of Noisy Entanglement and Faithful Teleportation via Noisy Channels, Phys. Rev. Lett.* **76**, 722 (1996).
- [11] A. K. Ekert, *Quantum cryptography based on Bell's theorem, Phys. Rev. Lett.* **67**, 661 (1991).
- [12] A. K. Ekert *Beating the code breakers, Nature (London)*, **358**, 14 (1992).
- [13] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, V. Vedral, *Entanglement in many-body systems, Rev. Mod. Phys.* **80**, 517 (2008).
- [14] R. B. Laughlin, *Anomalous Quantum Hall Effect: An Incompressible Quantum Fluid with Fractionally Charged Excitations, Phys. Rev. Lett.* **50**, 1395 (1983).
- [15] D. Larsson, H. Johannesson, *Entanglement Scaling in the One-Dimensional Hubbard Model at Criticality, Phys. Rev. Lett.* **95**, 196406 (2005).
- [16] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, Cambridge, England) (1999).
- [17] A. Osterloh, L. Amico, G. Falci, and R. Fazio, *Scaling of entanglement close to a quantum phase transition, Nature (London)* **416**, 608 (2002).
- [18] T. J. Osborne, M. A. Nielsen, *Entanglement in a simple quantum phase transition, Phys. Rev. A* **66**, 032110 (2002).
- [19] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, A. Kitaev, *Entanglement in Quantum Critical Phenomena, Phys. Rev. Lett.* **90**, 227902 (2003).
- [20] J. I. Latorre, E. Rico, G. Vidal, *Ground state entanglement in quantum spin chains, Quantum Inf. Comput.* **4**, 48 (2004).

- [21] L. E. Sadler, J. M. Higbie, S. R. Leslie, M. Vengalattore, D. M. Stamper-Kurn, *Spontaneous symmetry breaking in a quenched ferromagnetic spinor Bose–Einstein condensate*, *Nature (London)* **443**, 312 (2006).
- [22] A. N. Kocharian, G. W. Fernando, K. Palandage, J. W. Davenport *Coherent and incoherent pairing instabilities and spin-charge separation in bipartite and nonbipartite nanoclusters: Exact results*, *Phys. Rev. B* **78**, 075431 (2008).
- [23] A. N. Kocharian, G.W. Fernando, K. Palandage, J.W. Davenport, *Electron coherent and incoherent pairing instabilities in inhomogeneous bipartite and nonbipartite nanoclusters*, *Phys. Lett. A* **373**, 1074 (2009).
- [24] M. Fedorov, P. Volkov, J. Mikhailova, S. Straupe, S. Kulik, *Entanglement of qutrits and ququarts*, arXiv:1009.2744 [quant-ph].
- [25] M. Fedorov, N. Miklin, *Schmidt modes and entanglement of biphoton polarization qutrits*, arXiv:1308.2513 [quant-ph]
- [26] M. V. Chekhova, M. V. Fedorov, *The Schmidt modes of biphoton qutrits: Poincare-sphere representation*, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **46**, 095502 (2013).
- [27] V. S. Abgaryan, N. S. Ananikian, L. N. Ananikyan and A. N. Kocharian, *Phase transitions and entanglement properties in spin-1 Heisenberg clusters with single-ion anisotropy*, *Physica Scripta* **83** 055702, 7 страниц (2011).
- [28] V. S. Abgaryan, *Quantum Entanglement and Quantum Phase Transitions in Anisotropic Two- and Three-Particle Spin-1 Heisenberg Clusters*, *Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences)*, **49**, 6, 249-257 (2014).
- [29] G. Vidal, R. F. Werner, *Computable measure of entanglement*, *Phys. Rev. A* **65**, 032314 (2002).

- [30] G. Misguish and C. Lhuillier, *Two Dimensional Quantum Antiferromagnets*, Обзорная статья в книге *Frustrated Spin Systems*, под редакцией Н. Т. Diep (World Scientific, Singapore (2005)), и ссылки в ней.
- [31] M. Blume, V. J. Emery, and R. B. Griffiths, *Ising Model for the  $\lambda$  Transition and Phase Separation in  $He^3 - He^4$  Mixtures* *Phys. Rev.* **A4**, 1071 (1971).
- [32] X.N. Wu and F.Y. Wu, *Blume-Emery-Griffiths model on the honeycomb lattice*, *J. Stat. Phys.* **50**, 41 (1988).
- [33] T. Horiguchi. *A spin-one Ising model on a honeycomb lattice*, *Phys. Lett.* **A113**, 425 (1986).
- [34] A. R. Avakian, N. S. Ananikian, and N. Sh. Izmailyan, *A spin-1 model on the Bethe lattice*, *Phys. Lett.* **A 150**, 163 (1990).
- [35] N.S. Ananikian, A. R. Avakian, N. Sh. Izmailyan, *Phase diagrams and tricritical effects in the BEG model*, *Physica* **A 172**, 391 (1991).
- [36] A. Z. Akhayan and N. S. Ananikian, *Global Bethe lattice consideration of the spin-1 Ising model*, *J. Phys.* **A 29**, 721 (1996).
- [37] E. Albayrak, M. Keskin, *An exact formulation of the Blume-Emery-Griffiths model on a two-fold Cayley tree model*, *Eur. Phys. J.* **B 24**, 505 (2001).
- [38] E. Albayrak, M. Keskin, *Mixed spin- $\frac{1}{2}$  and spin-1 Blume-Capel Ising ferrimagnetic system on the Bethe lattice*, *J. Magn. Mater. Mater.* **261**, 196 (2003).
- [39] A. Erdinc , O. Canko, E. Albayrak, *J. Magn. Mater. Mater. Multicritical behaviors of the antiferromagnetic Blume-Emery-Griffiths model with the external magnetic field on the Bethe lattice*, **303**, 185 (2006).
- [40] L. A. F. Almeida, D. Dalmazi, *The Yang-Lee zeros of the 1D Blume-Capel model on connected and non-connected rings*, *J. Phys.* **A 38**, 6863 (2005).

- [41] R. G. Ghulghazaryan, K. G. Sargsyan, N. S. Ananikian, *Partition function zeros of the one-dimensional Blume-Capel model in transfer matrix formalism*, *Phys. Rev.* **E 76**, 021104 (2007).
- [42] D. Dalmazi and F. L. Sá, *The Yang–Lee edge singularity in spin models on connected and non-connected rings*, *J. Phys. A* **41**, 505002 (2008).
- [43] D. Dalmazi, F. L. Sá, *Critical behavior at edge singularities in one-dimensional spin models*, *Phys. Rev.* **E 78**, 031138 (2008).
- [44] T. Misawa, Y. Yamaji, M. Imada, *YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>: Quantum Tricritical Behavior in Itinerant Electron Systems*, *J. Phys. Soc. Jap.* **77**, 093712 (2008).
- [45] T. Misawa, Y. Yamaji, M. Imada, *Tricritical Behavior in Charge-Order System*, *J. Phys. Soc. Jap.* **75**, 064705 (2006).
- [46] H. Bethe, *Zur Theorie der Metalle*, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
- [47] L. Takhtajan, *The picture of low-lying excitations in the isotropic Heisenberg chain of arbitrary spins*, *Phys. Lett.* **A 87** 479 (1982).
- [48] H. Babujian, *Exact solution of the isotropic Heisenberg chain with arbitrary spins: Thermodynamics of the model*, *Nucl. Phys.* **B 215** 317 (1983).
- [49] F. D. M. Haldane, *Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet: Identification with the O(3) nonlinear sigma model*, *Phys. Lett.* **A 93** 464 (1983).
- [50] M. C. Arnesen, S. Bose, V. Vedral, *Natural Thermal and Magnetic Entanglement in the 1D Heisenberg Model*, *Phys. Rev. Lett.* **87** 017901(2001).
- [51] C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. Smolin, W. K. Wootters, *Mixed-state entanglement and quantum error correction*, *Phys. Rev.* **A 54**, 3824 (1996).
- [52] F. Mintert, M. Kus, and A. Buchleitner *Concurrence of Mixed Bipartite Quantum States in Arbitrary Dimensions*, *Phys. Rev. Lett.* **92** 167902 (2004).

- [53] T.L. Ho, Spinor Bose Condensates in Optical Traps, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 742 (1998).
- [54] S. Tsuchiya, S. Kurihara, T. Kimura, *Superfluid–Mott insulator transition of spin-1 bosons in an optical lattice*, *Phys. Rev.* **A70**, 043628 (2004).
- [55] Ting Wang, Xiaoguang Wang, Zhe Sun, *Entanglement oscillations in open Heisenberg chains*, *Physica A* **383** 316 (2007).
- [56] Schollwöck, T. Jolicoeur, and T. Garel, *Onset of incommensurability at the valence-bond-solid point in the  $S = 1$  quantum spin chain*, *Phys. Rev.* **B53**, 3304 (1996).
- [57] Zhe Sun, Xiao Guang Wang, You-Quan Li, *Entanglement in dimerized and frustrated spin-one Heisenberg chains*, *New Journal of Physics* **7** , 83 (2005).
- [58] Guo-Feng Zhang, Shu-Shen Li, *Entanglement in a spin-one spin chain*, *Solid State Commun.* **138**, 17 (2006).
- [59] Guo-feng Zhang, Shu-shen Li, Jiu-qing Liang, *Thermal entanglement in Spin-1 biparticle system* *Optics Communications* **245** 457 (2005).
- [60] Da-Chuang Li, Xian-Ping Wang, Zhuo-Liang Cao, *Thermal entanglement in the anisotropic Heisenberg XXZ model with the Dzyaloshinskii–Moriya interaction*, *J. Phys.: Condens. Matter* **20** 325229(2008).
- [61] L. Zhou, X. X. Yi, H. S. Song, Y. Q. Qu, *Thermal entanglement of Bosonic atoms in an optical lattice with nonlinear couplings*, arXiv:quant-ph/0310169v2 (2003).
- [62] V. S. Abgaryan, N. S. Ananikian, L. N. Ananikyan, V. Hovhannisyan, *Entanglement, magnetic and quadrupole moments properties of the mixed spin Ising–Heisenberg diamond chain*, *Solid State Comm.* **203**, 5-9 (2015).
- [63] B.M. Lisnyi, J. Strečka, *Exact results for a generalized spin-1/2*

*Ising–Heisenberg diamond chain with the second-neighbor interaction between nodal spins, Phys. Status Solidi B* **251** (2014) 1083.

- [64] H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, *Magnetic properties of the frustrated diamond chain compound  $Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$ , Physica B* **329** 967 (2003).
- [65] H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Kuwai, *Experimental evidence of the one-third magnetization plateau in the diamond chain compound  $Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$ , J. Magn. Magn. Mater.* **272**, 900 (2004).
- [66] H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, H. Ohta, Experimental Observation of the  $\frac{1}{3}$  Magnetization Plateau in the Diamond-Chain Compound  $Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$ , *Phys. Rev. Lett.* **94** 227201 (2005).
- [67] H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, K. Kindo, A. Matsuo, W. Higemoto, M. Horvatic, C. Berthier, *Magnetic Properties of the Diamond Chain Compound  $Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$ , Prog. Theor. Phys. Suppl.*, 159, 1 (2005).
- [68] F. Aimo, S. Krämer, M. Klajšek, M. Horvatič, C. Berthier, H. Kikuchi, *Spin Configuration in the  $1/3$  Magnetization Plateau of Azurite Determined by NMR, Phys. Rev. Lett.* **102**, 127205 (2009).
- [69] K. C. Rule, A. U. B. Wolter, S. Süllo, D. A. Tennant, A. Brühl, S. Köhler, B. Wolf, M. Lang, J. Schreuer, *Nature of the Spin Dynamics and  $1/3$  Magnetization Plateau in Azurite, Phys. Rev. Lett.* **100**, 117202 (2008).
- [70] B. Gu and G. Su, *Magnetism and thermodynamics of spin-1/2 Heisenberg diamond chains in a magnetic field, Phys. Rev.* **B 75**, 174437 (2007).
- [71] K. Hida, K. Takano, H. Suzuki, *Finite Temperature Properties of Mixed Diamond Chain with Spins 1 and  $1/2$ , J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 084716 (2009).

- [72] K. Takano, H. Suzuki, K. Hida, *Exact spin-cluster ground states in a mixed diamond chain*, *Phys. Rev. B* **80**, 104410 (2009).
- [73] O. Derzhko, A. Honecker, J. Richter, *Exact low-temperature properties of a class of highly frustrated Hubbard models*, *Phys. Rev. B* **79**, 054403 (2009).
- [74] M. S. S. Pereira, F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, *Magnetization plateau in diamond chains with delocalized interstitial spins*, *Phys. Rev. B* **77**, 024402 (2008).
- [75] M. S. S. Pereira, F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, *Magnetocaloric effect in kinetically frustrated diamond chains*, *Phys. Rev. B* **79**, 054427 (2009).
- [76] N. B. Ivanov, J. Richter, J. Schulenburg, *Diamond chains with multiple-spin exchange interactions*, *Phys. Rev. B* **79**, 104412 (2009).
- [77] T. Sakai, K. Okamoto, and T. Tonegawa, *Magnetization process of the  $S = 1/2$  distorted diamond spin chain with the Dzyaloshinsky-Moriya interaction*, *J. Phys. : Conf. Series* **200**, 022052 (2010).
- [78] O. Rojas, S. M. de Souza, V. Ohanyan, M. Khurshudyan, *Exactly solvable mixed-spin Ising-Heisenberg diamond chain with biquadratic interactions and single-ion anisotropy*, *Phys. Rev. B* **83**, 094430 (2011)
- [79] H. Kobayashi, Y. Fukumoto, A. Oguchi, *Frustrated Ising Model on a Diamond Hierarchical Lattice*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 074004 (2009).
- [80] T. A. Arakelyan, V. R. Ohanyan, L. N. Ananikyan, N. S. Ananikian, M. Roger, *Multisite-interaction Ising model approach to the solid  $^3\text{He}$  system on a triangular lattice*, *Phys. Rev. B* **67**, 024424 (2003).
- [81] J. Strečka, L. Čanová, T. Lučivjanský, M. Jaščur, *Multiple frustration-induced plateaus in a magnetization process of the mixed spin-1/2 and spin-3/2 Ising-Heisenberg diamond chain*, *J. Phys. : Conf. Series* **145**, 012058 (2009).

- [82] L. Canova, J. Strečka and M. Jaščur, *Geometric frustration in the class of exactly solvable Ising–Heisenberg diamond chains*, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 4967 (2006).
- [83] T. Verkholyak, J. Strečka, M. Jaščur, J. Richter, *Magnetic properties of the quantum spin-1/2 XX diamond chain: the Jordan-Wigner approach*, *Eur. Phys. J.* **B80**, 433 (2011).
- [84] J.S. Valverde, O. Rojas, S.M. de Souza, *J. Phys.: Condens. Matter, Phase diagram of the asymmetric tetrahedral Ising–Heisenberg chain*, **20**, 345208 (2008).
- [85] B.M. Lisnii, *Spin-1/2 asymmetric diamond Ising-Heisenberg chain*, *Ukr. J. Phys.* **56**, 1237 (2011).
- [86] L. Gálisová, *Magnetic properties of the spin-1/2 Ising–Heisenberg diamond chain with the four-spin interaction*, *Phys. Status Solidi B* **250**, 187 (2013).
- [87] L. Gálisová, *Magnetocaloric effect in the spin-1/2 Ising-Heisenberg diamond chain with the four-spin interaction*, *Condens. Matter Phys.* **17**, 13001 (2014).
- [88] V. S. Abgaryan, N. S. Ananikian, L. N. Ananikyan, V. Hovhannisyan, *Quantum transitions, magnetization and thermal entanglement of the spin-1 Ising–Heisenberg diamond chain*, *Solid State Comm.* **224** 15-20 (2015).
- [89] S. Bellucci, V. Ohanyan, *Correlation functions in one-dimensional spin lattices with Ising and Heisenberg bonds*, *Eur. Phys. J.* **B 86**, 446 (2013).
- [90] Y. Qi, A. Du, *Magnetocaloric effect in an Ising–Heisenberg diamond chain with direct monomer spin couplings*, *Phys. Status Solidi*, **B 251**, 1096 (2014).
- [91] N.S. Ananikian, V. Hovhannisyan, R. Kenna, *Partition function zeros of the antiferromagnetic spin-1/2 Ising–Heisenberg model on a diamond chain*, *Physica*, **A 396**, 51 (2014).



- [92] N. Ananikian, V. Hovhannisyanyan, *Partition function zeros of the antiferromagnetic spin- $\frac{1}{2}$  Ising–Heisenberg model on a diamond chain*, *Physica A* **392**, 2375 (2013).
- [93] O. Rojas, M. Rojas, N. S. Ananikian, S. M. de Souza, *Thermal entanglement in an exactly solvable Ising-XXZ diamond chain structure*, *Phys. Rev. A* **86**, 042330 (2012).
- [94] N. S. Ananikian, L. N. Ananikyan, L. A. Chakhmakhchyan, O. Rojas, *Thermal entanglement of a spin-1/2 Ising–Heisenberg model on a symmetrical diamond chain*, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 256001 (2012).
- [95] M. Oshikawa, M. Yamanaka, I. Affleck, *Magnetization Plateaus in Spin Chains: “Haldane Gap” for Half-Integer Spins*, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1984 (1997) .
- [96] I. Affleck, *Spin gap and symmetry breaking in  $\text{CuO}_2$  layers and other antiferromagnets*, *Phys. Rev. B* **37**, 5186 (1998).
- [97] M.S. Naseri, G.I. Japaridze, S. MahdaviFar, S.F. Shayesteh, *Magnetic properties of the spin  $S = 1/2$  Heisenberg chain with hexamer modulation of exchange*, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 116002 (2012).
- [98] N.S. Ananikian, J. Strecka, V. Hovhannisyanyan, *Magnetization plateaus of an exactly solvable spin-1 Ising–Heisenberg diamond chain*, *Solid State Communications* **194** 48, (2014).
- [99] C. H. Bennett, H. J. Bernstein, S. Popescu, B. Schumacher, *Concentrating partial entanglement by local operations*, *Phys. Rev. A* **53**, 2046 (1996).
- [100] S. Popescu, D. Rohrlich, *Thermodynamics and the measure of entanglement*, *PhysRev* **A56**, R3319 (1997).
- [101] A. Shimony, *Degree of Entanglement*, в *Fundamental Problems in Quantum Theory*, под редакцией D. M. Greenberger и A. Zeilinger, *Annals of the New York Academy of Sciences* **755**, 675, (1995).

- [102] V. Vedral, M. B. Plenio, M. A. Rippin, P. L. Knight, *Quantifying Entanglement*, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2275, (1997).
- [103] S. Hill and W. K. Wootters, *Entanglement of a Pair of Quantum Bits*, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 5022 (1997).
- [104] W. K. Wootters, *Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits*, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2245 (1998).
- [105] A. Peres, *Separability Criterion for Density Matrices*, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1413 (1996).
- [106] M. Blume, *Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in  $UO_2$* , *Phys. Rev.* **141**, 517 (1966).
- [107] H. W. Capel, *On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting*, *Physica* **32**, 966 (1966).
- [108] C. La Pair, K.W. Taconis, R. de Bruyn Ouboter, P. Das, *A direct measurement of the minimum in the melting curve of  $^4He$* , *Physica* **29**, 755 (1963).
- [109] N. Sh. Izmailian and N. S. Ananikian, *General spin-3/2 Ising model in a honeycomb lattice: Exactly solvable case*, *Phys. Rev.* **B 50**, 6829 (1994).
- [110] O. Canko, E. Albayrak, *Crystal field effect on a bilayer Bethe lattice*, *Phys. Rev.* **E 75**, 011116 (2007).
- [111] E. Albayrak, M. Keskin, *Phase diagrams of the Blume–Emery–Griffiths model calculated by the mean-field approximation including the transverse fields effects*, *J. Magn. Mater. Mater.* **206**, 83 (1999).
- [112] A. N. Kocharian, G. W. Fernando, K. Palandage, J. W. Davenport, *Exact study of charge-spin separation, pairing fluctuations, and pseudogaps in four-site Hubbard clusters*, *Phys. Rev.* **B74**, 024511 (2006).

- [113] J. Stenger, S. Inouye, D. M. Stamper-Kurn, H.-J. Miesner, A. P. Chikkatur, W. Ketterle, *Spin domains in ground-state Bose–Einstein condensates*, *Nature (London)* **396**, 345 (1998).
- [114] J. Torrico, M. Rojas, S. M. de Souza, O. Rojas, N. S. Ananikian, *Pairwise thermal entanglement in the Ising-XYZ diamond chain structure in an external magnetic field*, *EPL* **108**, 50007 (2014).
- [115] G. Birkhoff, S. Mac Lane, *Modern Algebra*, (New York:Macmillan) (1977)
- [116] S. Konar, P.S. Mukherjee, E. Zangrando, F. Lloret, N.R. Chaudhuri, *A three-dimensional homometallic molecular ferrimagnet*, *Angew Chem Int Ed.*, **3;41(9)** 1561-3 (2002).
- [117] S. Rauba, E. Ressouche, L. P. Regnault, M. Drillon, *Ferromagnetism in 1d and 2d triangular nickel(II) -based compounds*, *J. Magn. Magn. Mater.*, **163**, 365 (1996).
- [118] M. Kurmoo, P. Day, D. Derory, C. Estournes, R. Poinso, M. J. Stead, C. J. Kepert, *3D Long-Range Magnetic Ordering in Layered Metal–Hydroxide Triangular Lattices 25 Å Apart*, *J. Solid State Chem.*, **145**, 452 (1999).