УДК 530.1

СПИНОВЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ В МНОГОФЕРМИОННЫХ СИСТЕМАХ

О. Д. Тимофеевская

(*кафедра квантовой теории и физики высоких энергий*)

E-mail: olga@goa.bog.msu.ru

Вычислены двухчастичные спиновые матрицы плотности для многофермионных систем при наличии спаривания фермионов. Исследованы парные корреляционные функции двух фермионов и условия неразделимости двухчастичной спиновой матрицы плотности.

Введение

В современных приложениях квантовой механики (квантовые вычисления, квантовые коммуникации, квантовая криптография) широко используется понятие квантовой неразделимости (или перепутанности) квантовых состояний. В квантовой информации [1, 2] свойства перепутанных состояний рассматриваются как один из возможных ресурсов достижений этого направления квантовой теории. Согласно критерию сепарабельности [3], состояние составной системы называется разделимым, если его матрица плотности может быть представлена в виде

$$\hat{\rho}_{AB} = \sum_{i=1}^{k} p_i \hat{\rho}_A^i \otimes \hat{\rho}_B^i,$$

$$0 \leqslant p_i \leqslant 1, \quad \sum_{i=1}^{k} p_i = 1,$$

где ρ_A^i и $\hat{\rho}_B^i$ — матрицы плотности подсистем, и перепутанным, если его нельзя представить в виде такого разложения.

В работах [4, 5] квантовые состояния подсистем сложной системы описывались на языке условной матрицы плотности. В последнее время значительное внимание уделяется перепутанным состояниям двух частиц в многочастичных системах: тождественные частицы [6], ансамбли спинов [7, 8]. Условия неразделимости для спиновых состояний двух фермионов идеального ферми-газа исследовались в работах [9, 10].

В квантовых системах, объединяющих большое количество взаимодействующих частиц, понятие о состояниях отдельной частицы заменяется понятием коллективных мод возбуждений. Фермионная или бозонная статистики частиц приобретают первостепенное значение, в том числе и при описании перепутанных состояний.

Существенную роль при описании явлений в многочастичных системах играют корреляционные функции. Поэтому кажется естественным выяснить соотношение между квантовой неразделимостью состояний и свойствами корреляционных функций в таких системах. В этой работе мы находим двухспиновые матрицы плотности в системах тождественных фермионов (свободных и при наличии фермионного спаривания) и обсуждаем связь меры перепутывания со структурой парных корреляционных функций.

1. Квазичастицы Боголюбова

Рассмотрим многочастичную систему тождественных фермионов. Операторы поля $\hat{\Psi}$ и $\hat{\Psi}^+$ подчиняются обычным антикоммутационным соотношениям

$$\{\hat{\Psi}_{\sigma'}^+(\boldsymbol{r}'), \hat{\Psi}_\sigma(\boldsymbol{r})\} = \delta_{\sigma'\sigma}\delta(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}),$$
$$\{\hat{\Psi}_{\sigma'}(\boldsymbol{r}'), \hat{\Psi}_\sigma(\boldsymbol{r})\} = 0,$$

где $\boldsymbol{r}$ – вектор координаты и $\sigma = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ — проекции спина фермиона. С помощью преобразования Фурье

$$\hat{\Psi}_\sigma(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\boldsymbol{f} \hat{a}_{f,\sigma} e^{i\boldsymbol{fr}},$$
$$\hat{\Psi}_\sigma^+(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\boldsymbol{f} \hat{a}_{f,\sigma}^+ e^{-i\boldsymbol{fr}}$$

получаются операторы рождения $\hat{a}^+(f)$ и уничтожения $\hat{a}(f)$ фермионов с импульсом $\hbar\boldsymbol{f}$, которые удовлетворяют антикоммутационным соотношениям

$$\{\hat{a}(f), \hat{a}^+(f')\} = \delta_{f,f'},$$
$$\{\hat{a}(f), \hat{a}(f')\} = 0, \quad f \equiv (\boldsymbol{f}, \sigma).$$

Фермионные операторы квазичастиц $\hat{\alpha}_\xi^+$, $\hat{\alpha}_\xi$ определяются с помощью преобразования Боголюбова:

$$\hat{a}(\boldsymbol{f}) = u_{f\xi}\hat{\alpha}_\xi + v_{f\xi}^*\hat{\alpha}_\xi^+,$$
$$\hat{a}^+(\boldsymbol{f}) = u_{f\xi}^*\hat{\alpha}_\xi^+ + v_{f\xi}\hat{\alpha}_\xi,$$

где функции $u_{f\xi}$, $v_{f\xi}$ удовлетворяют соотношениям

$$\sum_f (u_{f\xi}^* u_{f\xi'} + v_{f\xi'}^* v_{f\xi}) = \delta_{\xi\xi'},$$
$$\sum_f (u_{f\xi}^* v_{f\xi'} + v_{f\xi'} u_{f\xi'}^*) = 0.$$

Операторы квазичастиц удовлетворяют соотношениям антикоммутации для фермионных операторов

$$\{\hat{\alpha}_\xi, \hat{\alpha}^+_{\xi'}\} = \delta_{\xi,\xi'}, \quad \{\hat{\alpha}_\xi, \hat{\alpha}_{\xi'}\} = 0.$$

Предполагается, что «новый вакуум» $|c\rangle$ является основным состоянием системы. Вакуум для квазичастиц определяется условиями

$$\hat{\alpha}_\xi|c\rangle = 0, \quad \forall\, \xi, \quad \langle c|c\rangle = 1.$$

Плотность числа частиц для каждой проекции спина n_σ в этом состоянии определяется средним значением оператора плотности:

$$n_\sigma(\boldsymbol{r}) = \langle c|\hat{\Psi}^+_\sigma(\boldsymbol{r})\hat{\Psi}_\sigma(\boldsymbol{r})|c\rangle.$$

2. Идеальный Ферми-газ

Рассмотрим невзаимодействующий ферми-газ. Энергия частиц равна

$$\epsilon(f) = \frac{f^2\hbar^2}{2m} - \mu,$$

где μ — это химический потенциал, значение которого предполагается положительным $\mu > 0$. Состояния с отрицательной энергий, $\epsilon(f) < 0$, заполняют ферми-сферу, где при $T = 0$ все состояния заняты. Радиус сферы Ферми в пространстве волновых векторов определяется соотношением $f_F = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m\epsilon_F}$, $\epsilon_F = \mu$. Таким образом,

$$\hat{a}(\boldsymbol{f},\sigma) = \hat{\alpha}^+(\boldsymbol{f},\sigma) \quad (v_f = 1, u_f = 0), \quad \text{если} \quad f < f_F,$$
$$\hat{a}(\boldsymbol{f},\sigma) = \hat{\alpha}(\boldsymbol{f},\sigma) \quad (v_f = 0, u_f = 1), \quad \text{если} \quad f > f_F.$$

Плотность числа частиц для каждой проекции спина равна

$$n_\sigma = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\boldsymbol{f}|v_f|^2. \tag{1}$$

Для свободных фермионов получаем $n_\sigma = \frac{1}{6\pi^2}\, f_F^3$.

Корреляционные функции определяются соотношениями

$$\mathcal{K}(\boldsymbol{r},\sigma,\sigma') = \langle c|\hat{\Psi}^+_\sigma(\boldsymbol{r}_1)\hat{\Psi}^+_{\sigma'}(\boldsymbol{r}_2)\hat{\Psi}_{\sigma'}(\boldsymbol{r}_2)\hat{\Psi}_\sigma(\boldsymbol{r}_1)|c\rangle, \tag{2}$$

где $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$.

Если спины фермионов параллельны, то

$$\mathcal{K}(\boldsymbol{r},\sigma,\sigma) = n_\sigma^2(1 - \phi^2(r)), \tag{3}$$

где

$$\phi(r) = \frac{1}{n_\sigma(2\pi)^3}\int d\boldsymbol{f}e^{i\boldsymbol{f}\boldsymbol{r}}|v(\boldsymbol{f},\sigma)|^2. \tag{4}$$

Таким образом, фермионы с параллельными спинами отрицательно коррелируют, и радиус корреляций r_- определяется радиусом f_F сферы Ферми: $r_- \sim r_F \equiv \frac{1}{f_F}$.

Для свободных фермионов интеграл $\phi(r)$ легко вычисляется:

$$\phi(r) = \frac{3}{4\pi f_F^3}\int\limits_{f<f_F} d\boldsymbol{f}e^{i\boldsymbol{f}\boldsymbol{r}} = \frac{1}{(f_F r)^3}(\sin(f_F r) - \cos(f_F r)).$$

Функция удовлетворяет соотношениям: $0 \leqslant \phi^2(r) \leqslant 1$, $\phi^2(0) = 1$, $\phi^2(\infty) = 0$.

Так как

$$\mathcal{K}(\boldsymbol{r},\sigma,-\sigma) = n_\sigma^2,$$

свободные фермионы с противоположными спинами распределены независимо.

В «вакуумном» состоянии $|c\rangle$ двухспиновая приведенная матрица плотности двух фермионов равна

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\gamma}\hat{R}(\boldsymbol{r}), \quad \gamma = Tr\hat{R}(\boldsymbol{r}),$$

где

$$R(\sigma_1,\sigma_2;\sigma_1',\sigma_2',\boldsymbol{r}) =$$
$$= \langle c|\hat{\Psi}^+_{\sigma_1}(\boldsymbol{r}_1)\hat{\Psi}^+_{\sigma_2}(\boldsymbol{r}_2)\hat{\Psi}_{\sigma_2'}(\boldsymbol{r}_2)\hat{\Psi}_{\sigma_1'}(\boldsymbol{r}_1)|c\rangle.$$

Здесь r — расстояние между фермионами.

Вычисляя $R(\sigma,-\sigma;\sigma,-\sigma;r) = -n_\sigma^2\phi^2(r)$, получаем выражение для двухчастичной спиновой матрицы плотности свободных фермионов

$$\hat{\rho}(r) = \frac{1}{\gamma'}\begin{pmatrix} 1-\phi^2(r) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\phi^2(r) & 0 \\ 0 & -\phi^2(r) & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-\phi^2(r) \end{pmatrix},$$

где

$$\gamma' = 2\big(2 - \phi^2(r)\big).$$

Согласно критерию неразделимости [11] спиновых состояний, условием того, что матрица $\tilde{\rho}$ описывает перепутанное состояние, служит условие неотрицательности собственных значений для матрицы, полученной частичным транспонированием, т. е. $\tilde{\rho}_{\mu\nu;\mu'\nu'} = \rho_{\mu\nu';\mu'\nu}$. Условие приводит к соотношению $\phi^2(r) > 1/2$. Этот же результат для свободных электронных газов был получен в работе [9] с помощью метода функций Грина.

Это условие означает, что спины свободных электронов перепутаны, если относительное расстояние между ними меньше, чем $1.8r_F$ при $T = 0$. И состояния двух фермионов максимально перепутаны, если они находятся в том же самом пространственном положении.

3. Электроны в сверхпроводящем состоянии

В сверхпроводниках электроны с противоположными спинами спариваются в s-состояние со спином пары, равным нулю:

$$\begin{aligned} \hat{a}(\boldsymbol{f},1/2) &= u_f\hat{\alpha}(\boldsymbol{f},1/2) + v_f\hat{\alpha}^+(-\boldsymbol{f},-1/2), \\ \hat{a}(\boldsymbol{f},-1/2) &= u_f\hat{\alpha}(\boldsymbol{f},-1/2) - v_f\hat{\alpha}^+(-\boldsymbol{f},1/2). \end{aligned} \tag{5}$$

Здесь

$$u_f = \left[\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\epsilon(\boldsymbol{f})}{E(\boldsymbol{f})}\right)\right]^{1/2}, \quad v_f = \left[\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\epsilon(\boldsymbol{f})}{E(\boldsymbol{f})}\right)\right]^{1/2}.$$

Спектр возбуждений квазичастиц Боголюбова определяется формулой $E(\boldsymbol{f}) = \sqrt{\epsilon^2(\boldsymbol{f}) + \Delta_f^2}$, где Δ_f — сверхпроводящая щель и $\epsilon(\boldsymbol{f}) = \frac{\hbar^2 f^2}{2m} - \mu$ — энергии возбуждений тривиального ($\Delta_f \equiv 0$) решения. Если $\Delta_f \ll \epsilon_F$, то можно считать $\mu \simeq \epsilon_F$, сверхпроводящая щель отлична от нуля только в узком слое около f_F.

Подставим выражения (5) в формулы (2). Корреляционные функции электронов с параллельными спинами определяются формулами (3) и (4) с корреляционным радиусом r_-.

Для противоположных спинов получаем

$$\mathcal{K}(\boldsymbol{r}, \sigma, -\sigma) = n_\sigma^2(1 + |\phi_1(r)|^2),$$

где

$$\phi_1(r) = \frac{1}{n_\sigma(2\pi)^3}\int d\boldsymbol{f} e^{i\boldsymbol{fr}} v^*(\boldsymbol{f})u(\boldsymbol{f}). \tag{6}$$

Электроны с противоположными спинами положительно скоррелированы. Радиус корреляций r_+ определяется шириной слоя, в котором произведение $v(\boldsymbol{f})u(\boldsymbol{f}) = \frac{1}{2}\frac{\Delta_f}{E(\boldsymbol{f})}$ существенно отлично от нуля [12], т. е. $|\epsilon(\boldsymbol{f})| < \Delta_f$. Заменяя $f^2 - f_F^2 \approx 2f_F(f - f_F)$, получаем выражение для ширины δ_f слоя в $\boldsymbol{f}$-пространстве:

$$f_F - \frac{\Delta(f_F)m}{\hbar^2 f_F} < f < f_F + \frac{\Delta(f_F)m}{\hbar^2 f_F}.$$

Корреляционный радиус r_+ имеет порядок $\frac{1}{2\delta_f}$:

$$r_+ \sim (\frac{\Delta(f_F)}{\epsilon_F})^{-1} r_-,$$

где ϵ_F — энергия Ферми. Так как $\Delta(f_F) \ll \epsilon_F$, то отсюда следует, что $r_+ \gg r_-$.

Двухспиновая матрица плотности равна

$$\hat{\rho}(r) = \frac{1}{\gamma'}\begin{pmatrix} 1-\phi^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+\phi_1^2 & -(\phi^2+\phi_1^2) & 0 \\ 0 & -(\phi^2+\phi_1^2) & 1+\phi_1^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-\phi^2 \end{pmatrix}, \tag{7}$$

где

$$\gamma' = 2(2 - \phi^2(r) + \phi_1^2(r)).$$

Согласно критерию неразделимости [13], состояния двух спинов перепутаны, если

$$(2\phi^2(r) - \phi_1^2(r)) > 1.$$

Если сверхпроводящая щель Δ_f отлична от нуля только в узком сферическом слое в окрестности радиуса Ферми f_F, то везде $\phi_1^2(r) \ll 1/2$. Это означает, что область, где спины двух фермионов перепутаны, близка к случаю свободных фермионов, и два фермиона находятся в перепутанном спиновом состоянии, если относительное расстояние между ними меньше, чем $1.8r_F$.

Заметим, что матрицу плотности $\rho(r)$ можно представить в форме

$$\hat{\rho}(r) = (1-p)\frac{\hat{I}}{4} + p|\Psi^-\rangle\langle\Psi^-|, \quad p = \frac{2(\phi^2(r) + \phi_1^2(r))}{\gamma'},$$

где $|\Psi^-\rangle = 1/\sqrt{2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ — это максимально перепутанное синглетное спиновое состояние пары. Условие неразделимости $p > 1/3$. Подобно свободным фермионам [12], матрица плотности n фермионов в сверхпроводящем состоянии равна

$$\rho_n = (1 - \sum_{ij} p_{ij})\frac{\hat{I}}{2^n} + \sum_{ij} p_{ij}|\Psi_{ij}^-\rangle\langle\Psi_{ij}^-| \otimes \frac{\hat{I}}{2^{n-2}},$$

где $|\Psi_{ij}^-\rangle$ — синглетное состояние пары ij.

4. Спаривание с параллельными спинами

В сверхтекучих состояниях ^{3}He [14] атомы ($s = 1/2$) с противоположными импульсами спариваются в p-состояния со спином пары, равным единице. Здесь мы рассмотрим тот случай, когда происходит образование пар фермионов с параллельными спинами, как, например, в A-фазе ^{3}He. Операторы квазичастиц определяются преобразованием

$$\hat{a}(\boldsymbol{f}, 1/2) = u_{\boldsymbol{f}}\hat{\alpha}(\boldsymbol{f}, 1/2) + v_{\boldsymbol{f}}\hat{\alpha}^+(-\boldsymbol{f}, 1/2), \tag{8}$$
$$\hat{a}(\boldsymbol{f}, -1/2) = u_{\boldsymbol{f}}\hat{\alpha}(\boldsymbol{f}, -1/2) + v_{\boldsymbol{f}}\hat{\alpha}^+(-\boldsymbol{f}, -1/2),$$

где $u_{\boldsymbol{f}} = u_{-\boldsymbol{f}}$, $v_{\boldsymbol{f}} = -v_{-\boldsymbol{f}}$, $u_{\boldsymbol{f}}^2 + v_{\boldsymbol{f}}^2 = 1$.

Подставляя формулы (7) в выражения (2), получаем корреляционные функции двух фермионов:

$$\mathcal{K}(\boldsymbol{r}, \sigma, -\sigma) = n_\sigma^2,$$
$$\mathcal{K}(\boldsymbol{r}, \sigma, \sigma) = n_\sigma^2(1 - |\phi(r)|^2 + |\phi_1(r)|^2),$$

где функции $\phi(r)$ и $\phi_1(r)$ определяются выражениями (4) и (6).

Противоположно ориентированные спины не скоррелированы. Параллельными спинами скоррелированы: радиус отрицательных корреляций оценивается как $r_- \sim \frac{1}{f_F}$; если $\Delta_f \ll \epsilon_F$, то радиус положительных корреляций, равный $r_+ \sim \left(\frac{\Delta(f_F)}{\epsilon_F}\right)^{-1} r_-$, много больше, чем радиус отрицательных.

Спиновая матрица плотности двух спинов равна

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\gamma''}\begin{pmatrix} 1-|\phi|^2+|\phi_1|^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -|\phi|^2 & 0 \\ 0 & -|\phi|^2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-|\phi|^2+|\phi_1|^2 \end{pmatrix}, \tag{9}$$

где $\gamma'' = 2(2 - |\phi(\boldsymbol{r})|^2 + |\phi_1(\boldsymbol{r})|^2)$.

Условие неразделимости имеет вид $(2|\phi(\boldsymbol{r})|^2 - |\phi_1(\boldsymbol{r})|^2) > 1$.

Заключение

Приведенные вычисления позволяют сделать следующие выводы о спиновых свойствах двухчастичных подсистем в многофермионных системах.

1. Образование фермионных пар в сверхпроводящем и сверхтекучем состояниях, являясь проявлением дальнего порядка, приводит к уменьшению меры перепутанности состояний отдельных частиц в многофермионных системах.

2. Хорошо известно, что физические свойства многофермионных состояний, обусловленные наличием нетривиальной сверхпроводящей щели $\Delta(f)$, существенно отличаются от свойств состояний, для которых имеется только тривиальное тождественно равное нулю решение $\Delta(f) \equiv 0$. Вместе с тем результаты настоящей работы показывают, что если решение для сверхпроводящей щели отлично от нуля только в узком слое около поверхности Ферми, свойства приведенной двухспиновой матрицы плотности в основном определяются статистикой Ферми, и условия критерия неразделимости спиновых состояний приближаются к случаю свободных фермионов.

Литература

1. *Nielsen M.A., Chuang I.I.* // Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge, 2001.
2. *Galindo A., Martin-Delgado M.A.* // Rev. Mod. Phys. 2002. **74**. P. 347.
3. *Horodecki M., Horodecki P., Horodecki R.* // Phys. Lett. 1996. **A223**. P. 1.
4. *Belokurov V.V., Khrustalev O.A., Sadovnichy V.A., Timofeevskaya O.D.* // Proc. of XXIII Solvay Conference on Physics. Delphi Latin, 2001. P. 555.
5. *Belokurov V.V., Khrustalev O.A., Sadovnichy V.A., Timofeevskaya O.D.* // Part. Nucl. Lett. 2003. **1[116]**. P. 16.
6. *Eckert K., Schliemann J., Bruss D., Lewenstein M.* // Ann. Phys. 2002. **299**. P. 88.
7. *Vidal G., Latorre J.I., Rico E., Kitaev A.* // Phys. Rev. Lett. 2003. **90**. P. 227902.
8. *Glaser U., Buttner H., Fehske H.* // Phys. Rev. 2003. **A68**. P. 032318.
9. *Oh S., Kim J.* // Phys. Rev. 2004. **A69**. P. 054305.
10. *Lunkes C., Brukner C., Vedral V.* // Phys. Rev. Lett. 2005. **95**. P. 030503.
11. *Peres A.* // Phys. Rev. Lett. 1996. **77**. P. 1413.
12. *Лунев Ф.А., Свешников К.А., Свешников Н.А., Тимофеевская О.Д., Хрусталев О.А.* Введение в квантовую теорию. Квантовая механика. М., 1985.
13. *Lunkes C., Brukner C., Vedral V.* // Phys. Rev. 2005. **A71**. P. 034309.
14. *Volovik G.* The Universe in a Helium Droplet. Oxford, 2002.

Поступила в редакцию
14.02.06