

Квантовая запутанность и квантовый дискорд в магнитоактивных материалах (Обзор)

С.М. Алдошин, Э.Б. Фельдман, М.А. Юрищев

*Институт проблем химической физики РАН
пр. Акад. Семенова, 1, г. Черноголовка, Московская обл., 142432, Россия
E-mail: efeldman@icp.ac.ru*

Статья поступила в редакцию 25 июля 2013 г.

Рассмотрены концепции квантовой запутанности и квантового дискорда. Представлены энтропийные меры для этих информационных корреляций. Приведены примеры, демонстрирующие присутствие квантово-информационных корреляций в различных парамагнитных материалах как с ферромагнитными, так и антиферромагнитными взаимодействиями. Рассмотрено температурное поведение дискорда для спинов атомных ядер. Обсуждены вопросы декогеренции квантовых состояний с электронными и ядерными спинами.

Розглянуто концепції квантової запутаності та квантового дискорда. Представлено ентропійні заходи для цих інформаційних кореляцій. Наведено приклади, що демонструють присутність квантово-інформаційних кореляцій в різних парамагнітних матеріалах як з ферромагнітними, так і антиферромагнітними взаємодіями. Розглянуто температурну поведінку дискорда для спінів атомних ядер. Обговорено питання декогеренції квантових станів з електронними та ядерними спінами.

PACS: 03.65.Ud Запутанность и квантовая нелокальность;
03.67.Mn Меры запутанности, свидетели и другие характеристики;
75.10.Jm Квантовые спиновые модели;
75.50.Xx Молекулярные магнетики.

Ключевые слова: кубит, время декогеренции, матрица плотности, энтропия, информационная корреляция.

Содержание

1. Введение	6
2. Корреляционные функции.....	6
3. Квантовая запутанность и ее меры	7
3.1. Чистые состояния	7
3.1.1. Энтропия запутанности	7
3.1.2. Двухкубитовая система	8
3.1.3. Запутанность и квантовые фазовые переходы	8
3.2. Смешанные состояния	9
3.2.1. Сепарабельные и несепарабельные состояния	9
3.2.2. Запутанность формирования	9
3.2.3. Формула Хилла–Вуттерса	9
3.2.4. Димер Гейзенберга	9
3.2.5. Запутанность и магнитная восприимчивость	10
3.2.6. Температура T_E в спин-кластерных материалах	10
3.2.7. Поведение запутанности в димерных магнетиках	11
4. Квантовый дискорд.....	13
4.1. Классические и квантовые информационные корреляции.....	13
4.1.1. Взаимная информация.....	13
4.1.2. Определение дискорда. Формулы для его расчета	13

4.2. Корреляции в димере Гейзенберга	14
4.3. Экспериментальное измерение термального дискорда.....	15
4.3.1. Рассеяние нейтронов	15
4.3.2. Внутренняя энергия и теплоемкость	16
4.3.3. Магнитная восприимчивость.....	16
4.4. Дискорд в веществах с ядерными спинами.....	17
5. Проблема декогеренции	18
5.1. Ядерные спиновые системы	18
5.2. Кубиты на электронных спинах.....	19
6. Заключение	19
Литература.....	19

1. Введение

В настоящее время сложилась ситуация, когда дальнейшая миниатюризация электроники неизбежно приведет к молекулярным размерам элементной базы. Разработка такой базы потребует применения законов квантовой механики. Как ожидается, при этом может произойти прорыв технологий за счет использования материалов со святой святых квантовой теории — особых, так называемых квантово-информационных корреляций или, для краткости, просто квантовых корреляций.

Первоначально к квантовым корреляциям относили запутанность (перепутанность, сцепленность) E [1–4]. Квантовая запутанность способна связывать части составных систем даже тогда, когда между частями нет никакого взаимодействия (эффект Эйнштейна–Подольского–Розена). Именно на запутанность, начиная с 80–90-х годов минувшего столетия, стали возлагать надежды в амбициозных проектах радикального повышения производительности компьютеров, создания безопасных сетей передачи данных, осуществления телепортации состояний и т.д. [5–8].

XXI век ознаменовался дальнейшим развитием представлений о квантовых корреляциях. В 2000 году Зурек ввел в научный оборот понятие quantum discord (квантовый дискорд, квантовая невязка, квантовое несогласование) для количественного описания «степени нарушения классичности объединенного состояния двух квантовых подсистем» [9]. В дальнейшем, однако, исходное определение дискорда претерпело важное уточнение: было дополнено оптимизацией по измерениям (см. ниже).

В 2001 году Хендерсон и Ведрал, а затем независимо от них Олливиер и Зурек в работах [10,11] (см. также [12,13]) провели анализ всех корреляций I в двухсоставной системе и, опираясь на теорию измерений, предложили способы выделять из них, с одной стороны, чисто классическую часть C , а с другой, — целиком квантовый вклад Q . При этом $I = C + Q$. Величина полных чисто квантовых корреляций Q получила название дискорда (в современном значении этого термина).

Важную роль на пути продвижения концепции дискорда сыграла модель детерминистского квантового вычисления с одним квантовым битом (ДКВ1) [14]. В 2008 году на примере ДКВ1 было продемонстрировано, что квантовый процессор можно построить на смешанных состояниях, используя квантовые корреляции практически без запутанности [15,16]. Это вызвало взрыв интереса к новому типу корреляций. Вскоре были обнаружены различные замечательные свойства дискорда. Так, например, было показано, что его можно использовать для детектирования квантовых фазовых переходов [17,18]. Более того, в отличие от запутанности и обычных термодинамических величин, он может улавливать приближение квантового фазового перехода даже при конечной температуре [19,20]. Выяснился также любопытный факт: «Почти все квантовые состояния имеют неклассические корреляции» [21]. Кроме того, было показано, что дискорд является важным ресурсом для создания защищенных каналов связи [22]. Наконец, недавно были опубликованы экспериментальные данные, которые подтверждают, что квантовые преимущества можно получить, используя дискорд без запутанности [23,24]. Достигнутые результаты по теории и приложениям квантового дискорда отражены в недавних обзорах [25,26] и специальном выпуске журнала [27].

2. Корреляционные функции

Прежде чем переходить к информационным корреляциям, кратко коснемся обычных статистических корреляционных функций.

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

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

(черта означает усреднение по распределению вероятностей) или коэффициента корреляции Пирсона

$$R_{xy} = \frac{\overline{(x - \bar{x})(y - \bar{y})}}{\sqrt{D_1} \sqrt{D_2}}, \quad (2)$$

где $D_1 = \overline{(x - \bar{x})^2}$ и $D_2 = \overline{(y - \bar{y})^2}$ — дисперсии для x и y соответственно. В теории вероятностей и математической статистике хорошо известно [28–30], что обращение ковариации (1) или коэффициента корреляции (2) в нуль еще не означает, вообще говоря, независимости случайных величин, т.е. что $p(x, y) = p_1(x)p_2(y)$. Для независимости требуется обращение в нуль совместных центрированных моментов всех порядков.

В статистической физике и квантовой механике большой интерес представляют средние значения от заданных динамических переменных — корреляционные функции системы. Корреляционные функции являются непосредственно измеряемыми величинами (например, в экспериментах по рассеянию). Знание корреляционных функций позволяет находить различные характеристики физической системы: восприимчивость, теплоемкость, внутренняя энергия и так далее. Мы увидим, что запутанность и дискорд тоже выражаются через обычные статистические корреляторы. Это предопределено тем, что элементы матрицы плотности, исходя из которой вычисляют информационные корреляции, являются корреляционными функциями переменных системы.

3. Квантовая запутанность и ее меры

Запутанность — один из наиболее интригующих феноменов квантовой механики. Примером, где проявляется данное явление, может служить синглетное состояние системы из двух спинов 1/2 с волновой функцией

$$|\psi\rangle = (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) / \sqrt{2}. \quad (3)$$

Эту функцию, описывающую когерентную суперпозицию кубитов, невозможно представить в виде произведения волновых функций отдельных составных частей системы. Именно свойство запутанности приводит к тому, что измерение состояния одной частицы позволяет мгновенно повлиять на состояние второй частицы, как бы далеко или близко она не находилась от первой.

Квантово-механическая запутанность является объектом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований [31,32] (см. также уже упомянутые обзоры [2,3]). При этом одной из наиболее плодотворных и глубоких по смыслу мер (степени, величины) запутанности стала энтропия состояния с редуцированной (частичной, приведенной, усредненной) матрицей плотности. Впервые такая энтропия была рассмотрена в 1986 году в проблеме черных дыр [33]. Сейчас энтропия редуцированного состояния широко используется в различных областях, включая квантовую теорию поля, физику твердого тела и, конечно, квантовую информатику.

Физический (информационный) смысл запутанности, определяемой через энтропию, трактуется как относительное число максимально запутанных пар m ,

которые можно извлечь из большого числа n копий исходных систем с помощью протокола очищения, включающего только локальные операции и классическую коммуникацию (ЛОКК): $E \rightarrow m/n$, $n \rightarrow \infty$ [34,35]. Энтропия запутанности может быть также интерпретирована как количество информации, доступной наблюдателю, для которого часть переменных (степеней свободы) полной системы потеряна или недоступна при проведении измерений.

Рассмотрим меры запутанности для чистых и смешанных состояний по отдельности. Меры были введены в 1986 году Беннетом с соавторами: в работе [35] для чистых состояний и в [36] для смешанных состояний.

3.1. Чистые состояния

Чистое состояние описывается волновой функцией. Если волновая функция составной системы допускает факторизацию в произведение волновых функций подсистем, то между подсистемами нет никаких корреляций — ни квантовых, ни классических. Если же волновую функцию невозможно факторизовать, то это означает, как уже отмечено, запутанность состояния. Таким образом, «чистые квантовые состояния бывают либо квантово-коррелированными (запутанными), либо вообще некоррелированными» [37]. Заметим, что наличие запутанности не означает отсутствие классических корреляций в нефакторизуемом чистом состоянии. Количественно запутанность определяется мерой, выбираемой из потребностей информационной теории.

3.1.1. Энтропия запутанности. Согласно [35], мерой запутанности системы, находящейся в чистом состоянии $|\psi\rangle$ и состоящей из двух подсистем A и B , служит энтропия фон Неймана любой подсистемы (вследствие разложения Шмидта [8] обе энтропии равны между собой):

$$E = S(\rho_A) = S(\rho_B). \quad (4)$$

В этих соотношениях $\rho_A = \text{Tr}_B |\psi\rangle\langle\psi|$ и $\rho_B = \text{Tr}_A |\psi\rangle\langle\psi|$ — редуцированные матрицы плотности, $S = -\text{Tr} \rho \log \rho$ — энтропия фон Неймана, $\rho \in \{\rho_A, \rho_B\}$. Выбор основания логарифма определяет единицы измерения количества информации: биты, наты, хартли, диты. В этих же единицах можно измерять и величину запутанности. Однако иногда для полной ясности уточняют и, например, говорят: «Один бит запутанности» и т.д.

Важным свойством энтропии запутанности (4) является ее инвариантность относительно локальных унитарных преобразований, т.е. преобразований, которые можно проводить в гильбертовых подпространствах каждой из подсистем независимо друг от друга. Но относительно общих унитарных преобразований гильбертова пространства всей системы запутанность, вообще говоря, не инвариантна. Отметим сразу же, что аналогичными свойствами обладают меры для запу-

танности смешанных состояний и меры для квантового дискорда.

3.1.2. *Двухкубитовая система.* Рассмотрим величину квантовой запутанности в двухкубитовой модели. Для нее волновая функция наиболее общего вида в стандартном базисе имеет форму

$$|\psi\rangle = a|00\rangle + b|01\rangle + c|10\rangle + d|11\rangle, \quad (5)$$

где $|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 + |d|^2 = 1$. Отсюда

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} |a|^2 & ab^* & ac^* & ad^* \\ a^*b & |b|^2 & bc^* & bd^* \\ a^*c & b^*c & |c|^2 & cd^* \\ a^*d & b^*d & c^*d & |d|^2 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Одно собственное значение этой матрицы равно $|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 + |d|^2 (=1)$, ему отвечает собственный вектор $|\psi\rangle$. Три других собственных значения равны нулю. Из (6) для редуцированных матриц плотности следует

$$\rho_A = \begin{pmatrix} |a|^2 + |b|^2 & ac^* + bd^* \\ a^*c + b^*d & |c|^2 + |d|^2 \end{pmatrix}, \\ \rho_B = \begin{pmatrix} |a|^2 + |c|^2 & ab^* + cd^* \\ a^*b + c^*d & |b|^2 + |d|^2 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

С учетом нормировки $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, собственные значения каждой из этих матриц равны

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}(1 \pm \sqrt{1 - \tilde{C}^2}), \quad (8)$$

где

$$\tilde{C} = 2|ad - bc| \quad (9)$$

называется *согласованностью*. Через нее запутанность выражается по формуле

$$E = -\frac{1 + \sqrt{1 - \tilde{C}^2}}{2} \log_2 \left(\frac{1 + \sqrt{1 - \tilde{C}^2}}{2} \right) - \\ - \frac{1 - \sqrt{1 - \tilde{C}^2}}{2} \log_2 \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \tilde{C}^2}}{2} \right). \quad (10)$$

Зависимость E от \tilde{C} является взаимно-однозначной. Кроме того, значения запутанности и согласованности в граничных точках совпадают: $E = 0$ при $\tilde{C} = 0$ и $E = 1$ при $\tilde{C} = 1$. Это позволяет рассматривать согласованность как меру запутанности в системе.

Таким образом, расчет запутанности двухсоставной системы с заданным вектором состояния сводится к построению матрицы плотности, ее редуцированию и, наконец, вычислению энтропии фон Неймана.

Пользуясь приведенными результатами, нетрудно найти, что в состоянии (3) запутанность $E = 1$. Это максимально запутанное двухкубитовое состояние.

Отметим один несколько неожиданный факт. Возьмем двухкубитовую систему с равновероятным распределением по базисным состояниям, т.е. когда $a = b = c = d = 1/2$. Казалось бы, для существования запутанности здесь наиболее благоприятные условия. Однако из формулы (9) следует $\tilde{C} = 0$, и поэтому, в согласии с (10), в этом случае запутанность $E = 0$.

3.1.3. *Запутанность и квантовые фазовые переходы.* Рассмотрим поведение энтропии запутанности в системе с фазовым переходом второго рода. Следуя [38,39], возьмем одну из наиболее простейших моделей — точно решаемую цепочку Изинга в поперечном поле. Гамильтониан модели имеет вид

$$\mathcal{H} = -\sum_{i=1}^L \sigma_i^x - \lambda \sum_{i=1}^{L-1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z. \quad (11)$$

Здесь λ — величина спин-спиновых взаимодействий, а σ_i^α — α -я компонента вектора матриц Паули в узле i . Основное состояние $|\psi_0\rangle$ системы (11) невырождено как при ферромагнитном ($\lambda > 0$), так и при антиферромагнитном ($\lambda < 0$) характере взаимодействий. При $\lambda = 1$ бесконечно длинная цепочка Изинга испытывает квантовый фазовый переход второго рода, который описывается конформной теорией поля с центральным зарядом $c = 1/2$.

Предполагая число узлов L четным, разобьем систему на две равные части (A и B) и вычислим энтропию S редуцированной матрицы плотности основного состояния для одной из частей в пределе $L \rightarrow \infty$. Согласно результатам [38,40,41] (см. также [42]), энтропия запутанности в натах равна

$$S = \frac{1}{24} \left[\ln \left(\frac{16}{k^2 k'^2} \right) + \frac{4}{\pi} (k^2 - k'^2) I(k) I(k') \right], \quad \lambda < 1, \quad (12)$$

в неупорядоченной (парамагнитной) фазе и

$$S = \frac{1}{12} \left[\ln \left(\frac{k^2}{16k'} \right) + \frac{4}{\pi} (1 - k^2/2) I(k) I(k') \right] + \ln 2, \quad \lambda > 1, \quad (13)$$

в упорядоченной (ферромагнитной) фазе. Здесь $I(k)$ означает полный эллиптический интеграл первого рода

$$I(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}}, \quad (14)$$

где параметр $k = \min \{\lambda, \lambda^{-1}\}$ есть модуль этого интеграла; $k' = \sqrt{1 - k^2}$ — дополнительный модуль. Из выражений (12) и (13) следует, что в окрестности фазового перехода ($\lambda \rightarrow 1$) запутанность, как и предписывает конформная теория поля (см. [43] и имеющиеся там ссылки), расходится по логарифмическому закону

$$S \simeq \frac{c}{6} \ln [1/|1 - \lambda|], \quad (15)$$

где центральный заряд $c = 1/2$ определяет класс универсальности обсуждаемой (1+1)-мерной модели Изинга. Запутанность, таким образом, может быть использована для обнаружения и идентификации квантовых фазовых переходов. Это важное достижение теории запутанности.

3.2. Смешанные состояния

Смешанные состояния описываются матрицей плотности, которая обязана быть эрмитовой, неотрицательной определенной и иметь след, равный единице.

3.2.1. Сепарабельные и несепарабельные состояния. Смешанные состояния делятся на сепарабельные и несепарабельные. Состояние ρ системы, состоящей из подсистем A и B , называется сепарабельным, если существует хотя бы одно разложение матрицы плотности вида [44,45]

$$\rho = \sum_i w_i \rho_i^{(A)} \otimes \rho_i^{(B)}, \quad (16)$$

где веса $w_i \geq 0$ и $\sum_i w_i = 1$, а $\rho_i^{(A)}$ и $\rho_i^{(B)}$ — матрицы плотности соответственно подсистем A и B .

Существенно, что в сепарабельных состояниях запутанность E равна нулю, а в несепарабельных присутствует ($E \neq 0$). Матрицы плотности (16) можно приготовить из незапутанных состояний исключительно средствами ЛОКК [36]. Заметим, что в свете теории дискорда отсюда еще не следует, что в сепарабельных состояниях не могут присутствовать квантовые корреляции.

3.2.2. Запутанность формирования. В отличие от чистых состояний, для смешанных состояний рассматривают несколько разных мер. Наиболее разработана теоретически так называемая запутанность формирования (создания). Ею мы и ограничимся, называя ее часто просто запутанностью.

Запутанность формирования в системе, находящейся в состоянии с матрицей плотности

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad (17)$$

(веса $p_i \geq 0$, $\sum_i p_i = 1$), по определению [36] равна

$$E = \min_{\mathcal{E}} \sum_i p_i S(\psi_i). \quad (18)$$

Здесь $S(\psi_i)$ означает запутанность чистого состояния $|\psi_i\rangle$ (способ ее расчета в случае двухсоставной системы изложен выше). Минимум в (18) должен быть найден среди всех ансамблей $\mathcal{E} = \{\psi_i\}$ при условии сохранения состояния ρ .

Для набора из одинаковых пар 1/2-спиновых систем запутанность формирования (18) определяется минимальным числом максимально запутанных пар, которые необходимы для создания с помощью ЛОКК заданного состояния ρ [36].

Входящая в равенство (18) операция минимизации делает определение для запутанности смешанного со-

стояния, в сущности, неконструктивным. Однако для двухкубитовых систем удалось преодолеть все необходимые вычисления и вывести общую формулу в замкнутом аналитическом виде.

3.2.3. Формула Хилла–Вуттерса. Как показали Хилл и Вуттерс [46,47] (см. также [48]), согласованность для произвольной двухкубитовой системы равна

$$\tilde{C} = \max \{0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4}\}. \quad (19)$$

Здесь λ_i — собственные значения ($\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \lambda_4 \geq 0$) матрицы

$$R = \rho(\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho^*(\sigma_y \otimes \sigma_y), \quad (20)$$

где σ_y — y -матрица Паули. Поскольку произведение эрмитовых матриц является в общем случае неэрмитовой матрицей, то матрица R , вообще говоря, неэрмитова. Однако при $\det \rho \neq 0$ с помощью преобразования подобия R -матрицу можно привести к эрмитовому виду:

$$R' = \rho^{-1/2} R \rho^{1/2} = \sqrt{\rho}(\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho^*(\sigma_y \otimes \sigma_y) \sqrt{\rho}. \quad (21)$$

Нетрудно убедиться, что для чистого состояния с матрицей плотности (6) соответствующая R -матрица имеет только одно ненулевое собственное значение. Оно равно $4|ad - bc|^2$, и формула Хилла–Вуттерса (19) дает (9).

Другой частный случай соответствует состоянию, матрица плотности которого является произвольной смесью состояний Белла:

$$\rho = p_1 |\Psi^+\rangle\langle\Psi^+| + p_2 |\Psi^-\rangle\langle\Psi^-| + p_3 |\Phi^+\rangle\langle\Phi^+| + p_4 |\Phi^-\rangle\langle\Phi^-|, \quad (22)$$

где $|\Psi^\pm\rangle$ и $|\Phi^\pm\rangle$ представляют собой функции Белла

$$|\Psi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle \pm |10\rangle), \quad |\Phi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle \pm |11\rangle). \quad (23)$$

Матрица плотности (22) имеет структуру

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} p_3 + p_4 & & & p_3 - p_4 \\ & p_1 + p_2 & p_1 - p_2 & \\ & p_1 - p_2 & p_1 + p_2 & \\ p_3 - p_4 & & & p_3 + p_4 \end{pmatrix}. \quad (24)$$

Для такой системы $R = \rho^2$, причем собственные значения матрицы R равны p_i^2 . Поэтому формула Хилла–Вуттерса приводит к согласованности

$$\tilde{C} = \begin{cases} 2p_{\max} - 1, & p_{\max} > 1/2; \\ 0, & p_{\max} \leq 1/2, \end{cases} \quad (25)$$

где $p_{\max} = \max \{p_1, p_2, p_3, p_4\}$. Соотношения (25) и (10) возвращают нас к результатам работы [36].

3.2.4. Димер Гейзенберга. Рассмотрим на основе формулы Хилла–Вуттерса запутанность в системе, состоящей из двух изотропно связанных спинов 1/2 в состоянии термодинамического равновесия. Такая мо-

дель, модель Гейзенберга, находит многочисленные приложения к эксперименту.

Гамильтониан для димера Гейзенберга имеет вид

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}J\sigma_1\sigma_2. \quad (26)$$

В этом равенстве J — константа обменного взаимодействия, $\sigma_1 = \sigma \otimes e$ и $\sigma_2 = e \otimes \sigma$, где e — единичная матрица размером 2×2 , а $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — вектор матриц Паули

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (27)$$

Компоненты магнитного момента димера равны

$$M_v = \frac{1}{2}g_v\mu_B(\sigma_1^v + \sigma_2^v), \quad v = x, y, z. \quad (28)$$

Здесь g_v — компоненты g -фактора и μ_B — магнетон Бора. Магнитная восприимчивость моля димеров Гейзенберга определяется уравнением Блинн–Бауэрс [49,50]

$$\chi(T) = \frac{2N_A g^2 \mu_B^2}{k_B T (3 + \exp(-2J/k_B T))}, \quad (29)$$

где N_A — число Авогадро, k_B — постоянная Больцмана и T — температура; g — соответствующая компонента g -фактора, если измерения проводятся на монокристалле, либо

$$g^2 = (g_x^2 + g_y^2 + g_z^2)/3 \quad (30)$$

при выполнении измерений на поликристаллическом образце.

Запутанность по формуле (10) выражается, как мы знаем, через согласованность \tilde{C} . Для расчета последней используем матрицу плотности Гиббса

$$\rho = \frac{1}{Z} \exp(-\mathcal{H}/k_B T), \quad (31)$$

где Z — статистическая сумма

$$Z = \text{Tr} \exp(-\mathcal{H}/k_B T). \quad (32)$$

Привлекая результаты предыдущего подраздела, нетрудно установить, что в димере (26) с ферромагнитным взаимодействием, т.е. когда $J \geq 0$, согласованность тождественно равна нулю. В силу (10) запутанность тоже отсутствует при всех температурах: $E \equiv 0 \forall T$.

При антиферромагнитном же характере связи в гейзенберговском димере ($J < 0$) согласованность равна [51,52] (см. также [6], с. 50)

$$\tilde{C}(T) = \frac{1 - 3 \exp(-2|J|/k_B T)}{1 + 3 \exp(-2|J|/k_B T)}, \quad T < T_E \quad (33)$$

$$\tilde{C}(T) = 0, \quad T \geq T_E,$$

где

$$T_E = \frac{2}{\ln 3} |J|/k_B \simeq 1,820 |J|/k_B. \quad (34)$$

Из этих соотношений следует, что при абсолютном нуле температуры $\tilde{C} = 1$. При повышении температуры запутанность в димере уменьшается и при $T = T_E$ полностью исчезает.

3.2.5. *Запутанность и магнитная восприимчивость.* Из уравнения Блинн–Бауэрс (29) и соотношения (33) следует выражение для согласованности через восприимчивость антиферромагнитного димера Гейзенберга (26) при температурах $T < T_E$:

$$\tilde{C}(T) = 1 - \frac{3}{2} \chi(T)/\chi^{\text{Curie}}(T), \quad (35)$$

где

$$\chi^{\text{Curie}}(T) = N_A g^2 \mu_B^2 / (2k_B T) \quad (36)$$

есть закон Кюри для двух спинов с $S = 1/2$ (уравнение Блинн–Бауэрс (29) при высоких температурах, когда можно считать $J = 0$). Эти соотношения вместе с (10) позволяют определять квантовую запутанность по измеряемой на опыте магнитной восприимчивости системы гейзенберговских димеров.

Магнитная восприимчивость антиферромагнитного димера (29) как функция температуры имеет максимум с координатами

$$\frac{k_B T_{\text{max}}^{\chi}}{|J|} = \frac{2}{1 + W(3/e)} = 1,2472\dots, \quad (37)$$

$$\frac{|J| \chi_{\text{max}}}{N_A g^2 \mu_B^2} = \frac{1}{3} W(3/e) = 0,2011\dots \quad (38)$$

Здесь $W(x)$ — функция Ламберта [53], определяемая соотношением $We^W = x$. Эта функция под именем Lambert $W(x)$ включена в пакет Maple. Из (34) и (37) находим, что

$$T_E / T_{\text{max}}^{\chi} = (1 + W(3/e)) / \ln 3 = 1,4596\dots \quad (39)$$

Таким образом, квантовая запутанность спиновых степеней свободы исчезает лишь при температуре, почти в полтора раза превосходящей температуру максимума магнитной восприимчивости. Это обстоятельство благоприятствует нахождению T_E и $E(T)$ из экспериментальных данных.

3.2.6. *Температура T_E в спин-кластерных материалах.* В соответствии с (35), запутанность в димере (26) существует ($\tilde{C} > 0$), когда восприимчивость

$$\chi(T) < \frac{2}{3} \chi^{\text{Curie}}(T). \quad (40)$$

Исходя из определения сепарабельности (16), удалось получить более общее условие возникновения запутанности в системе из N частиц со спинами S [54,55]:

$$\chi_p(T) < \frac{Ng^2\mu_B^2 S}{3k_B T}, \quad (41)$$

где χ_p — усредненная по пространственным направлениям восприимчивость (восприимчивость поликристаллического материала).

Уравнение (41) можно представить в виде

$$\chi_p(T) < \frac{1}{1+S} \chi^{\text{Curie}}(T), \quad (42)$$

где

$$\chi^{\text{Curie}}(T) = \frac{nN_A g^2 \mu_B^2 S(S+1)}{3k_B T} \quad (43)$$

есть закон Кюри для моля n -ядерных кластеров, состоящих из спинов величины S . (В димере $n = 2$.)

В магнетохимии принято наряду с кривыми $\chi(T)$ (а часто даже вместо них) изображать на графиках те же самые экспериментальные данные в виде зависимостей эффективного магнитного момента

$$\mu_{\text{eff}}(T) = \frac{1}{\mu_B} \left(\frac{3k_B T \chi}{N_A} \right)^{1/2}. \quad (44)$$

Тогда условию (42) с учетом (43) можно придать форму

$$\mu_{\text{eff}}(T) < g\sqrt{nS}. \quad (45)$$

Использование критерия наличия или отсутствия запутанности становится предельно простым делом: нужно лишь провести горизонтальную прямую на высоте $g\sqrt{nS}$ и посмотреть, пересекает ли она кривую $\mu_{\text{eff}}(T)$ или нет, а если пересекает, то определить где.

Правые части неравенств (40) и (42) представляют собой деформированные законы Кюри. Именно вследствие таких деформаций (из-за дополнительных ренормировочных коэффициентов) может возникать пересечение кривых, и становится возможным определение запутанности по магнитной восприимчивости.

Эти теоретические результаты открыли возможность находить важный параметр — температуру возникновения/исчезновения запутанности T_E в реальных веществах. В работе [56] было показано, что в кристаллах тригидрата нитрата меди $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2,5\text{D}_2\text{O}$, магнитная структура которых является квазидимерной, температура $T_E \approx 5$ К. Мы еще вернемся к этим соединениям при обсуждении дискорда. В работе [57] были предъявлены свидетельства, указывающие на существование квантовой запутанности при температурах ниже $T_E \approx 200 - 240$ К в кристаллах $\text{Na}_2\text{Cu}_5\text{Si}_4\text{O}_{14}$, содержащих цепочки пятиядерных спиновых кластеров меди. В водном и безводном ацетатах меди запутанность присутствует до температур соответственно 371 и 393 К [58]. Подробный список других материалов представлен в обзоре [59]. Важно, что среди материалов существуют такие, в которых

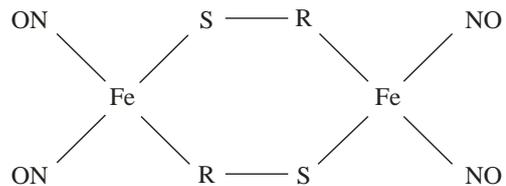
запутанность спинов присутствует вплоть до комнатных температур. Это, очевидно, будет существенно при конструировании приборов и устройств, работающих на квантовых корреляциях.

3.2.7. *Поведение запутанности в димерных магнетиках.* Условия (42) и (45) позволяют находить лишь температуру T_E , но не саму величину запутанности. Однако для димерных 1/2-спиновых соединений, и в этом их преимущество, удастся определять как T_E , так и температурный ход запутанности различных веществ, используя для этого экспериментальные данные по восприимчивости.

Рассмотрим запутанность в подробно изученных биядерных нитрозильных комплексах железа (НКЖ) [60]. Обсуждать будем два комплекса: НКЖ I [61] и НКЖ II [62].

Нитрозильные комплексы являются носителями монооксида азота NO, который выполняет роль сигнальной молекулы в целом ряде метаболических и физиологических процессов, происходящих в биологических системах и организмах, включая человека. НКЖ были открыты в живых тканях в 1960-е годы [63]. По характерному сигналу ЭПР с $g = 2,03$ они получили название «комплексов 2,03».

Структура НКЖ I и II имеет вид



где R есть имидазол-2-тиолат (для комплекса I) или имидазолидин-2-тиолат (для комплекса II). Лиганды R представляют собой пятичленные гетероциклы, которые состоят из трех атомов углерода и двух атомов азота, разделенных углеродом.

Магнитоактивные центры в НКЖ образованы ионами железа, каждый из которых связан с двумя нитрозильными группами. Спин отдельного центра S равен 1/2. Механизм формирования магнитоактивного центра из одного Fe и двух NO-групп на примере моноядерного НКЖ рассмотрен в [64].

Магнитная структура кристаллов НКЖ I и II представляет собой достаточно уединенные димеры. Данное обстоятельство выделяет эти вещества среди других материалов, проявляющих квазидимерные магнитные свойства (см. обзоры [65,66] и имеющиеся там ссылки). Кроме того, измерения магнитной восприимчивости свидетельствуют о том, что комплексы I и II антиферромагнитны и взаимодействия в димерах являются гейзенберговскими.

На рис. 1 показано поведение начальной магнитной восприимчивости комплекса I [61]. Реальное вещество с НКЖ I содержит небольшое количество примеси

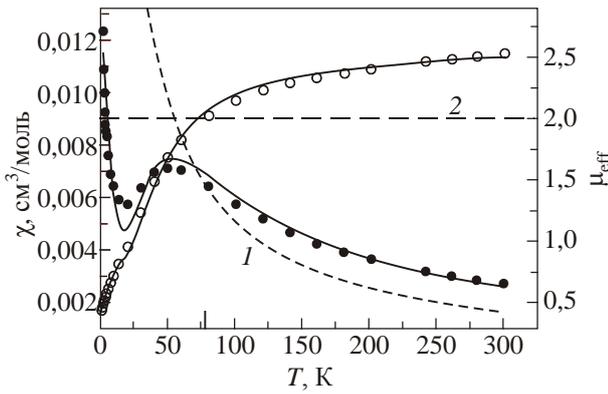


Рис. 1. Температурные зависимости магнитной восприимчивости (●) и эффективного магнитного момента (○) для НКЖ I. Рисунок взят из статьи [61] и дополнен нами, как объяснено в тексте, пунктирными линиями 1 и 2.

(порядка 2,3% [61]), вклад от которой подчиняется закону Кюри–Вейсса. Этот вклад велик при $T \rightarrow 0$ (на рис. 1 он проявляется в виде подъема восприимчивости вблизи нуля температуры). Однако при $T > T_{\max}^{\chi}$ вклад примеси относительно невелик, и при оценках температуры T_E для НКЖ I им можно пренебречь.

Пунктирной линией 1 на рис. 1 нанесена деформированная гипербола Кюри (правая часть неравенства (40)) с учетом того, что в НКЖ $g = 2$ [61]. Видно, что эта гипербола пересекает экспериментальные точки (●) при $T_E \approx 80$ К (по оси абсцисс эта температура отмечена удлиненной риской). С другой стороны, магнитная восприимчивость обсуждаемого НКЖ I проходит через максимум при $T_{\max}^{\chi} = 63$ К. Следовательно, в соответствии с равенством (39), температура исчезновения запутанности $T_E \approx 90$ К. Учитывая обе полученные оценки, заключаем, что запутанность в комплексе I существует при температурах $T \leq 80-90$ К.

На рис. 1 символами (○) представлены также значения $\mu_{\text{eff}}(T)$ для комплекса I. Пунктиром на этом рисунке проведена горизонтальная прямая 2 по уровню $g\sqrt{nS} = 2$ (поскольку $g = 2$, $n = 2$ и $S = 1/2$). Видим, что значение абсциссы точки пересечения согласуется с температурой T_E , найденной выше.

Обсудим теперь опытные данные для НКЖ II, опубликованные в [62]. Поведение магнитной восприимчивости здесь в целом аналогично комплексу I (см. рис. 2). Образцы были более чистыми, количество примеси не превышало 1,7%. В целях проведения более тщательного анализа был вычтен вклад примеси и получена восприимчивость $\chi(T)$ собственно для НКЖ II (● на рис. 2). На этом же рисунке кривая 1 показывает зависимость Блинн–Бауэрса (29) с найденными в работе [62] параметрами: $J/k_B = -68$ К и $g = 2$. Как видно на рис. 2, деформированная кривая Кюри пересекает (●) при температуре $T_E \approx 110$ К, а теоретическую аппроксимацию опытных данных — при $T_E \approx 120$ К. Магнитная восприимчивость рассматриваемого комплек-

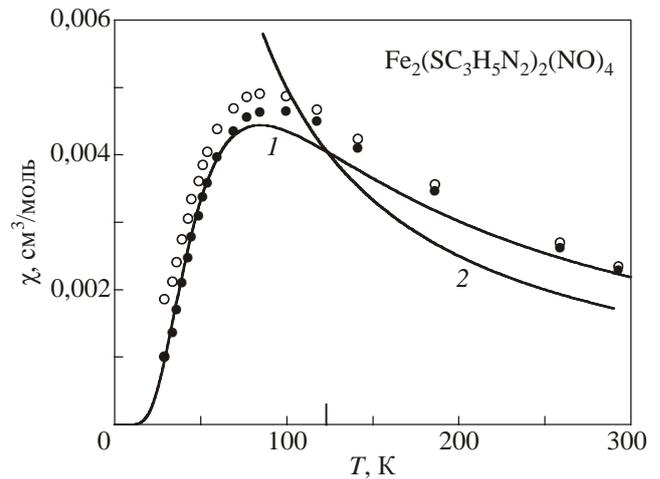


Рис. 2. Температурные зависимости магнитной восприимчивости НКЖ II с примесями (○) и после вычета вклада примеси (●). Кривая 1 — теоретическая зависимость Блинн–Бауэрса с $J/k_B = -68$ К и $g = 2$; кривая 2 — зависимость $(2/3)\chi^{\text{Curie}}(T)$ с $g = 2$.

са II с примесями проходит через максимум при температуре 83 К. Пользуясь соотношением (39), находим, что $T_E \approx 121$ К. Таким образом, в НКЖ II температура возникновения запутанности $T_E \approx 110-120$ К.

Наконец, на рис. 3 представлены температурные зависимости для согласованности (○) и запутанности (●), пересчитанные по формулам (35), (36) и (10) из экспериментальных данных по магнитной восприимчивости комплекса II. Сплошными кривыми показаны теоретические зависимости $\tilde{C}(T)$ и $E(T)$, полученные с использованием уравнения Блинн–Бауэрса (29) с приведенными выше параметрами J/k_B и g для этого комплекса. Видно, что при температуре 25 К степень запутанности в комплексе составляет 90–95% от максимальной величины.

Итак, при $T = 0$ запутанность НКЖ I и II максимальна и равна единице. Это обусловлено тем, что ос-

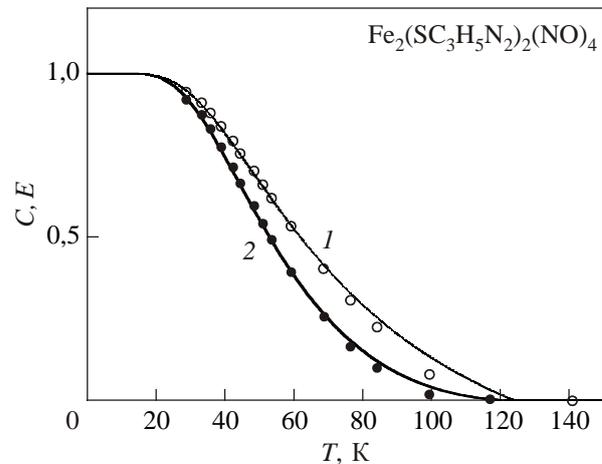


Рис. 3. Температурный ход согласованности (○) и запутанности (●) для НКЖ II. Сплошные кривые 1 и 2 — теоретические зависимости для C и E соответственно.

новое состояние антиферромагнитного димера является синглетом (3). При повышении температуры начинает заселяться триплет и запутанность ослабевает. При температуре T_E она исчезает вовсе. Поскольку в системе есть характерный энергетический параметр — щель $\Delta (= 2|J|)$, то неудивительно, что $T_E \sim \Delta/k_B$. При температурах $T > T_E$ система остается все время в сепарабельном состоянии.

4. Квантовый дискорд

В 1990-е годы было распространено мнение, что сепарабельные состояния являются лишь классически-коррелированными. Однако тщательный анализ на основе теории квантовых измерений поколебал это представление.

4.1. Классические и квантовые информационные корреляции

Полные корреляции, как упоминалось во Введении, состоят из классических и квантовых корреляций. Мерой полных корреляций может служить взаимная информация двух подсистем.

4.1.1. *Взаимная информация.* В классической теории информации [67–72] оперируют с понятием взаимной информации

$$I(X : Y) = H(X) + H(Y) - H(X, Y) \geq 0 \quad (46)$$

между объектами X и Y . Здесь $H(X)$, $H(Y)$ и $H(X, Y)$ — энтропии Шеннона [67]:

$$H(X) = -\sum_x p_1(x) \log p_1(x), \quad H(Y) = -\sum_y p_2(y) \log p_2(y), \\ H(X, Y) = -\sum_{x,y} p(x, y) \log p(x, y), \quad (47)$$

где $p_1(x) = \sum_y p(x, y)$, $p_2(y) = \sum_x p(x, y)$. Существенно, что, в отличие от коэффициента корреляции Пирсона, обращение в нуль взаимной информации, $I = 0$, теперь уже является необходимым и достаточным условием независимости X и Y ([8], с. 617). Это позволяет использовать величину I в качестве меры (информационной) корреляции между системами X и Y [30]. Такая мера отвечает интуитивному представлению: два объекта или явления коррелируют (взаимообусловлены), если в одном из них есть доля информации о другом.

Пользуясь известной в теории вероятностей формулой Байеса, правую часть равенства (46) для взаимной информации можно записать в шенноновской несимметричной форме, которую обозначим через I' :

$$I'(X : Y) = H(X) - H(X | Y), \quad (48)$$

где

$$H(X | Y) = H(X, Y) - H(Y) \quad (49)$$

есть условная энтропия. Соотношение (48) означает, что взаимная информация равна незнанию о системе, которое остается после извлечения о ней сведений из

другой системы. В обсуждаемом классическом случае, разумеется, $I' \equiv I$.

В квантовой теории информации [1,4,8,73–76] (см. также пионерские работы [10,11] и обзоры [25,26]) соотношение (46) заменяют новым определением

$$I(A : B) = S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{AB}), \quad (50)$$

которое служит мерой взаимной информации между двумя подсистемами A и B , составляющими вместе объединенную систему $AB = A \cup B$. В равенстве (50) ρ_{AB} — матрицы плотности всей системы AB , ρ_A и ρ_B — редуцированные матрицы плотности для подсистем A и B соответственно, а $S(\rho)$ ($\rho = \{\rho_A, \rho_B, \rho_{AB}\}$) представляет собой энтропию фон Неймана

$$S(\rho) = -\text{Tr } \rho \log \rho. \quad (51)$$

Важно, что $I = 0$ является необходимым и достаточным условием факторизации матрицы плотности полной системы: $\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$, что означает абсолютную независимость (некоррелированность) A и B ([8], с. 627). В квантовой теории информации величина I служит мерой всех (и классических, и квантовых) корреляций между двумя (под)системами.

4.1.2. *Определение дискорда.* Формулы для его расчета. В квантовом случае измерения, проводимые на одной системе, в общем случае влияют на состояние другой системы [13]. (По вопросам измерений см. [77,78], а из цитированной литературы — [8,73] или, например, [76].) Исходя из того, что полная классическая часть корреляций есть максимальное количество информации о подсистеме, скажем A , которое можно извлечь, выполняя измерения на подсистеме B , Хендерсон и Ведрал [10] (см. также [12,26]) предложили взять в качестве меры всех чисто классических корреляций величину

$$C(\rho_{AB}) = \max_{\{E_i\}} [S(\rho_A) - \sum_i p_i S(\rho_A^i)]. \quad (52)$$

Здесь максимум должен быть найден на множестве всех элементов $E_i = B_i^+ B_i$, где B_i — оператор измерения. (Множество $\{E_i\}$ есть положительная операторно-значная мера (ПОЗМ) [8,26].) В равенстве (52)

$$\rho_A^i = \text{Tr}_B (B_i \rho_{AB} B_i^+) / \text{Tr}_{AB} (B_i \rho_{AB} B_i^+) \quad (53)$$

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

$$p_i = \text{Tr}_{AB} (B_i \rho_{AB} B_i^+) \quad (54)$$

есть вероятность получения после измерения результата i .

Олливиер и Зурек [11], наоборот, сфокусировали внимание на выявлении квантовых корреляций. Огра-

ничиваясь ортогональными проективными измерениями, они обобщили выражение (48) на квантовый случай:

$$I'(A : B) = S(\rho_A) - \sum_i p_i S(\rho_A^i). \quad (55)$$

Очевидно, что выражение в правой части этого равенства является ни чем иным, как неоптимизированной по измерениям классической корреляцией Хендерсона–Ведрала (52). Минимальная разность $I - I' \equiv Q$, которая достигается на множестве измерений, была отождествлена с величиной квантовой корреляции и получила название квантового дискорда — разногласия, расхождения между I и I' , между классичностью и квантовостью. Учитывая, что

$$I = C + Q, \quad (56)$$

видим эквивалентность результатов Хендерсона–Ведрала и Олливиера–Зурека (за исключением того, что Хендерсон и Ведрал рассматривали общие измерения, а не только ортогональные проективные).

Квантовый дискорд обладает рядом важных свойств. Отметим среди них следующие. Для чистого состояния дискорд совпадает с запутанностью E . Поскольку в чистом состоянии $I = 2E$, то приходим к выводу, что в чистом состоянии квантовые и классические корреляции равны по величине: $Q = C = E$. В смешанных состояниях квантовые корреляции (дискорд) могут присутствовать даже в том случае, когда запутанности нет. Квантовый дискорд $Q \geq 0$. Сверху дискорд ограничен величиной энтропии подсистемы, на которой проводилось измерение: $Q \leq S(\rho_B)$. В частности, если система двухкубитовая и информация измеряется в битах, то $Q \leq 1$.

К сожалению, из-за необходимости решения оптимизационной задачи определения для классических и квантовых корреляций на практике фактически не пригодны (как и для запутанности, они тоже не конструктивны). Всего лишь для нескольких вариантов двухчастичных систем удалось преодолеть сложности выполнения оптимизационной процедуры и в итоге получить аналитические формулы для расчета квантового дискорда [79–84]. Для двухкубитовых моделей (размеры матрицы плотности всего только $4 \times 4!$) наивысшим достижением является формула для дискорда, когда матрица плотности принадлежит к X-типу (отличны от нуля матричные элементы лишь на главной и побочной диагоналях) [81]. Впрочем, недавно с помощью локального ортогонального преобразования была найдена связь между X и центросимметричными (ЦС) матрицами четвертого порядка [85]. (В ЦС матрице $n \times n$ матричные элементы связаны соотношениями $a_{i,j} = a_{n+1-i,n+1-j}$ [86–88].) Поскольку дискорд инвариантен относительно произвольных локальных унитарных преобразований, то установленная связь позволяет вычислять дискорд для любых двухкубитовых ЦС мат-

риц плотности, используя соответствующие формулы для X-состояний.

4.2. Корреляции в димере Гейзенберга

Рассмотрим снова гейзенберговскую систему из двух спинов $1/2$ в состоянии теплового равновесия. Матрицу плотности (31) запишем в виде

$$\rho(T) = \frac{1}{4}(1 + G\sigma_1\sigma_2) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1+G & & & \\ & 1-G & 2G & \\ & 2G & 1-G & \\ & & & 1+G \end{pmatrix}. \quad (57)$$

Здесь

$$G(T) = -1 + \frac{4}{3 + \exp(-2J/k_B T)} \quad (58)$$

есть спин-спиновая корреляционная функция

$$G = \langle \sigma_1^x \sigma_2^x \rangle = \langle \sigma_1^y \sigma_2^y \rangle = \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle, \quad (59)$$

где угловые скобки означают статистическое усреднение. Значения G изменяются от -1 до нуля для антиферромагнитного кластера ($J < 0$) и от нуля до $1/3$ для ферромагнитного ($J > 0$).

Матрица плотности (57) является, очевидно, частным случаем X-матрицы. Для нее квантовый дискорд может быть рассчитан по формулам работы [79]:

$$Q = I - C, \quad (60)$$

где взаимная информация равна

$$I = \frac{1}{4} [(1-3G) \log_2(1-3G) + 3(1+G) \log_2(1+G)], \quad (61)$$

а классическая часть полных корреляций есть

$$C = \frac{1}{2} [(1+|G|) \log_2(1+|G|) + (1-|G|) \log_2(1-|G|)]. \quad (62)$$

Выражения (58), (60)–(62) определяют термальный дискорд в димере Гейзенберга. Видим, что полная, классическая и квантовая корреляции выражаются через спин-спиновую корреляционную функцию G . Из соотношений (33) и (59) находим для согласованности димера

$$\tilde{C}(T) = \begin{cases} -\frac{1}{2}(1+3G), & T < T_E; \\ 0, & T \geq T_E. \end{cases} \quad (63)$$

Согласованность и, значит, квантовая запутанность тоже целиком определяются коррелятором G .

Отметим, что, согласно (60)–(63), дискорд и запутанность связаны функциональной зависимостью. График $E(Q)$ показан на рис. 4 сплошной кривой. Видно, что при $Q \leq Q_E = (1/2) \log_2 3 - 2/3 \simeq 0,1258$ запутанность равна нулю. При $Q = Q^* \simeq 0,746$ (точка пересечения кривой $E(Q)$ и вспомогательной прямой $E = Q$, показанной пунктиром) запутанность и дискорд

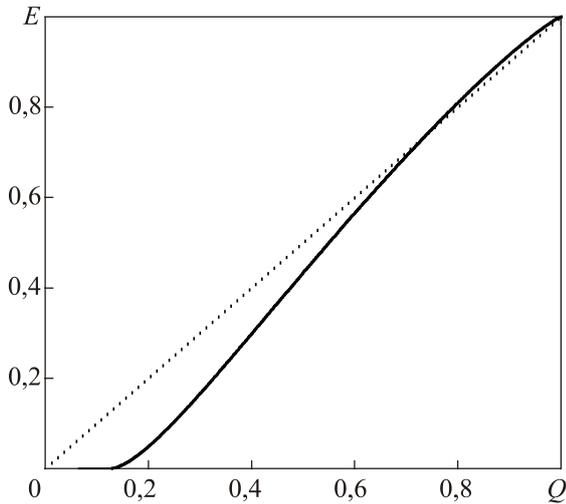


Рис. 4. Зависимость $E(Q)$ (сплошная кривая) в димере Гейзенберга. Пунктир — вспомогательная прямая, показывающая области, где запутанность меньше и больше дискорда.

равны по величине. На участке выше этой точки $E > Q$. То, что в некоторых состояниях запутанность может быть больше, чем полные чисто квантовые корреляции, т.е. дискорд, было установлено в работе [79]. Автор этой работы свое наблюдение объяснял тем, что запутанность является качественно иной мерой квантовых корреляций. Мы можем к этому добавить, что раз $E > Q$, то запутанность представляет собой некоторую смесь чисто квантовых и чисто классических корреляций. Поэтому E может быть и больше Q .

На рис. 5 показано поведение $|G|$, E , Q и C , которые описывают разные корреляции в антиферромагнитном димере. (В антиферромагнитном случае коррелятор $G \leq 0$, поэтому для него взята абсолютная величина.) При $T = 0$ все четыре корреляции максимальны и равны 1. При увеличении температуры корреляции вначале практически сохраняют свое максимальное значение (графики имеют квазигоризонтальный участок, который обусловлен существованием щели в спектре энергии системы), а затем убывают до нуля. Величина

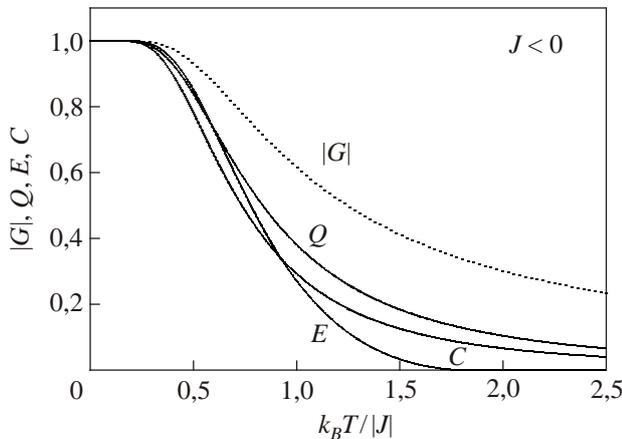


Рис. 5. Температурное поведение корреляций $|G|$, Q , C и E в антиферромагнитном димере Гейзенберга.

спин-спиновой корреляционной функции убывает по закону $1/T$, а Q и C — более быстро, по закону $1/T^2$. На рис. 5 видно, что при низких температурах запутанность E больше, чем Q и C . Однако поскольку $E(T)$ имеет точку исчезновения запутанности при температуре T_E , то $E(T)$ неизбежно пересекает кривые как $Q(T)$, так и $C(T)$.

В димере с ферромагнитными взаимодействиями ($J > 0$) запутанность отсутствует. На рис. 6 представлены зависимости G , Q и C для такой модели в зависимости от температуры. При нулевой температуре спин-спиновая корреляционная функция достигает своего максимального значения $G = 1/3$. Дискорд в этом случае тоже равен $1/3$. Интересно, что полная классическая корреляция тут меньше Q . Согласно (62), она равна лишь

$$C_0 \equiv C(0) = \frac{5}{3} - \log_2 3 = 0,0817 \dots \quad (64)$$

4.3. Экспериментальное измерение термального дискорда

Дискорд, как отмечено выше, имеет целый ряд привлекательных свойств. К сожалению, вопрос, как его измерять, остается открытым. Однако в случае спиновых димеров информационные корреляции I , C и Q можно, как и запутанность E , выразить через экспериментально наблюдаемые характеристики системы.

4.3.1. *Рассеяние нейтронов.* Неупругое рассеяние тепловых нейтронов — мощный инструмент для исследования низколежащих возбуждений в кристаллах соединений с переходными металлами. В таких экспериментах из данных по рассеянию извлекаются компоненты Фурье спин-спиновых корреляционных функций [89–91]. Обратное преобразование Фурье дает саму корреляционную функцию.

Экспериментальные результаты по рассеянию нейтронов в кристаллах квазидимерного антиферромагнетика $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2,5\text{D}_2\text{O}$ представлены в работе [92]

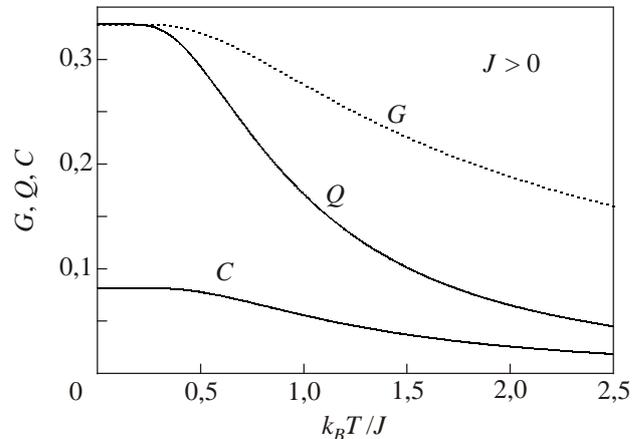


Рис. 6. Корреляции G , Q и C в зависимости от $k_B T / J$ в ферромагнитном димере Гейзенберга.

(см. также [56]). В этом эксперименте интенсивность нейтронного рассеяния измерялась в интервале температур $0,31 \text{ К} < T < 7,66 \text{ К}$. Было найдено, что при $T = 4 \text{ К}$ спин-спиновая корреляционная функция имеет величину $G = -0,54(9)$. Используя соотношения (60)–(62), для дискорда получаем оценку $Q = 0,3(1)$ [58].

4.3.2. *Внутренняя энергия и теплоемкость.* Внутренняя энергия на моль димеров Гейзенберга (26) равна

$$u(T) \equiv N_A \langle \mathcal{H} \rangle = -\frac{3RJ}{2k_B} G(T). \quad (65)$$

Здесь $R = k_B N_A$ — универсальная газовая постоянная (не следует ее путать с матрицей R разд. 3.2.3). Но дискорд выражается через корреляционную функцию G . Это позволяет установить связь дискорда и внутренней энергии.

Обратимся снова к нитрату меди $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$. Его удельная теплоемкость $c_m(T) = \partial u / \partial T$ была измерена в интервале температур $0,5\text{--}4,2 \text{ К}$ [93] (см. также [94]). Кривая теплоемкости имеет аномалию Шоттки — характерный максимум, расположенный при температуре $1,82 \text{ К}$. Когда $T < 0,5 \text{ К}$, теплоемкость практически равна нулю. При температурах выше максимума теплоемкость уменьшается и постепенно выходит на асимптотический закон $1/T^2$. Величина обменной константы была оценена как $2J/k_B = -5,18 \text{ К}$ [93]. Чтобы найти внутреннюю энергию, в работе [58] было произведено численное интегрирование экспериментальных данных по теплоемкости от нуля до 4 К и было получено $u(4)/R = -1,63 \text{ К}$. Согласно (65), для корреляционной функции это дает $G(4) = -0,42$. В итоге была найдена величина дискорда при температуре 4 К : $Q = 0,2$. Это значение находится в согласии с оценкой, полученной из данных по рассеянию нейтронов.

Можно также и непосредственно связать дискорд с теплоемкостью. Действительно, магнитная теплоемкость на моль димеров Гейзенберга равна [50]

$$c_m(T) = 12R \left(\frac{J}{k_B T} \right)^2 \frac{\exp(2J/k_B T)}{[1 + 3 \exp(2J/k_B T)]^2}. \quad (66)$$

Используя выражение для корреляционной функции (58), эту формулу можно представить в виде

$$c_m(T) = \frac{3R}{4} \left(\frac{J}{k_B T} \right)^2 [1 + G(T)][1 - 3G(T)] \quad (67)$$

или

$$c_m / R = \frac{3}{16} (1 + G)(1 - 3G) \ln^2 \left(\frac{1 + G}{1 - 3G} \right). \quad (68)$$

Выражение для дискорда (60) и эти соотношения в параметрическом виде (через G) определяют связь дискорда с теплоемкостью.

4.3.3. *Магнитная восприимчивость.* Магнитная восприимчивость димеров Гейзенберга подчиняется, как

уже говорилось, уравнению Блинн–Бауэrsa, которое мы представим в виде

$$\chi(T) = \frac{N_A g^2 \mu_B^2}{2k_B T} (1 + G(T)). \quad (69)$$

Из этого уравнения можно извлечь выражение для спиновой корреляционной функции теперь уже через магнитную восприимчивость:

$$G(T) = \frac{2k_B T \chi(T)}{N_A g^2 \mu_B^2} - 1 \quad (70)$$

или

$$G(T) = -1 + \chi(T) / \chi^{\text{Curie}}(T). \quad (71)$$

Следовательно, можно измерять квантовый дискорд, используя магнитометрическую технику. Кроме того, соотношения (65), (68), (70) и (71) устанавливают связь теплоемкости с магнитной восприимчивостью или ее производной [95], что позволяет проводить измерения теплоемкости на магнитометре.

Обратимся опять к примеру с нитратом меди. Магнитная восприимчивость $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ при низких температурах была измерена в работе [96]. В рамках модели Гейзенберга авторы этой статьи нашли из данных по порошковой восприимчивости, что g -фактор равен $2,11$. Используя экспериментальные точки, представленные на рисунках работы [96], можно определить, что при $T = 4 \text{ К}$ порошковая магнитная восприимчивость для нитрата меди составляет $\chi = 0,063 \text{ см}^3/\text{моль}$. Тогда соотношение (70) дает $G(4) = -0,698$. В результате для дискорда при $T = 4 \text{ К}$ получаем $Q = 0,48$. Эта оценка более или менее согласуется с предыдущими значениями, особенно если учесть, что магнитная структура в обсуждаемом веществе является лишь квазидимерной, а не строго димерной.

Рассмотрим теперь биядерные НКЖ, которые имеют выраженную димерную магнитную структуру. Используя данные по магнитной восприимчивости для НКЖ II [62], нетрудно рассчитать дискорд в зависимости от температуры. Результаты показаны на рис. 7.

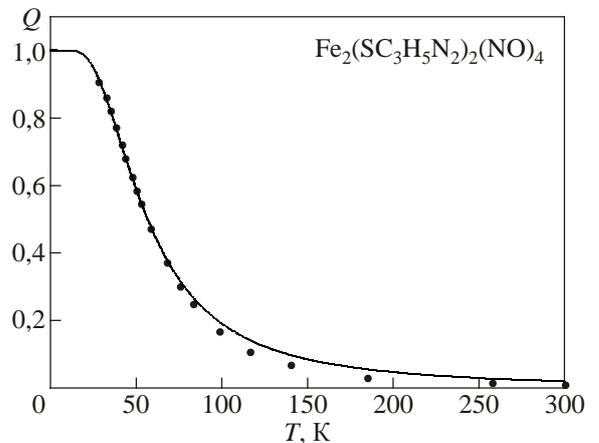


Рис. 7. Температурный ход дискорда для НКЖ II. (●) — эксперимент, кривая — теория.

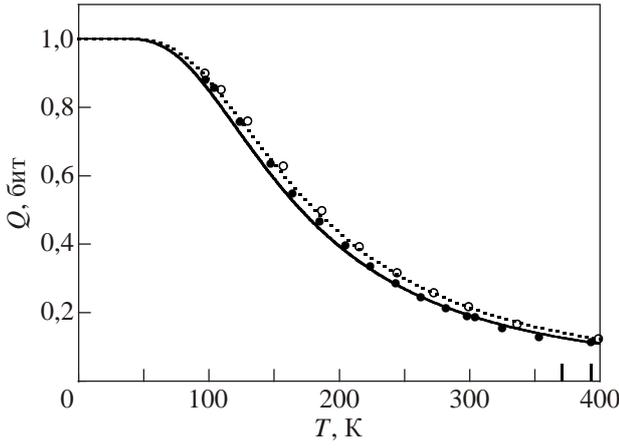


Рис. 8. Температурный квантовый дискорд в гидрированном (сплошная кривая и ●) и безводном (пунктирная кривая и ○) ацетатах меди.

Как видим, дискорд, в отличие от запутанности, сохраняет ненулевое значение даже при комнатных температурах и выше.

В работе [58] были проанализированы имеющиеся экспериментальные данные [97] по магнитной восприимчивости для гидрированного и безводного ацетатов меди — $[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}]_2$ и $[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2]_2$. Эти вещества являются классическими представителями димерных антиферромагнетиков Гейзенберга со спинами $1/2$. Результаты анализа представлены на рис. 8. Температуры 371 и 393 К, отмеченные на оси абсцисс этого рисунка удлинненными метками, показывают температуры T_E для гидрированного и безводного ацетатов меди соответственно. При температуре 400 К, когда запутанности уже нет, дискорд составляет вполне заметную величину: 11–12% от максимального значения $Q(0) = 1$.

Как мы знаем, запутанность в ферромагнитном димере Гейзенберга полностью отсутствует. Однако дискорд имеет ненулевые значения. В работе [58] были взяты из литературы [98] экспериментальные данные

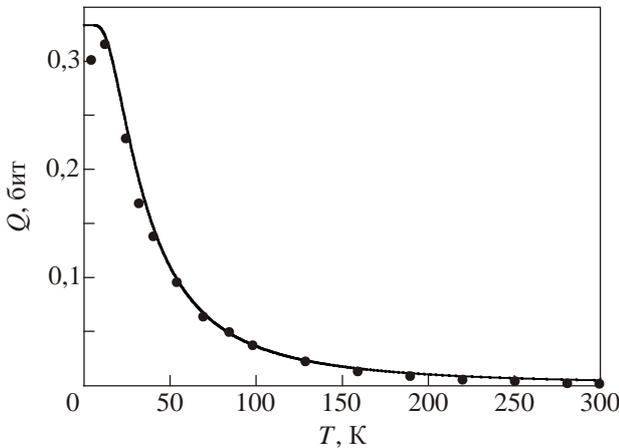


Рис. 9. Квантовый дискорд в зависимости от температуры в ферромагнитном материале $[\text{Cu}_2\text{L}(\text{OAc})] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$.

по магнитной восприимчивости димерного ферромагнетика — биядерного комплекса ацетата меди $[\text{Cu}_2\text{L}(\text{OAc})] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, где L — лиганд. На рис. 9 показана полученная из магнитной восприимчивости зависимость дискорда от температуры. При температуре $T = 300$ К дискорд составляет $Q \approx 0,003$, т.е. около 1% от теоретического максимума $1/3$, достигаемого в точке $T = 0$.

4.4. Дискорд в веществах с ядерными спинами

В качестве кубитов могут выступать не только электронные спины, но и спины таких ядер, как, например, ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P . Спин-спиновые взаимодействия подразделяются на прямые (диполь-дипольные) и косвенные, идущие через электронные облака и химические связи [8].

Возьмем для примера систему, состоящую из двух одинаковых частиц со спинами $1/2$, которые связаны между собой диполь-дипольным взаимодействием. Пусть, кроме того, система находится во внешнем однородном магнитном поле с индукцией B . Тогда гамильтониан модели можно записать в виде

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{dd} + \mathcal{H}_Z, \quad (72)$$

где диполь-дипольная часть

$$\mathcal{H}_{dd} = \frac{\mu_0 \gamma^2 \hbar^2}{4\pi 4r^3} [\sigma_1 \sigma_2 - 3(\mathbf{n} \cdot \sigma_1)(\mathbf{n} \cdot \sigma_2)] \quad (73)$$

и энергия Зеемана

$$\mathcal{H}_Z = -\frac{1}{2} \gamma \hbar (\sigma_1 + \sigma_2) \mathbf{B}. \quad (74)$$

В этих равенствах $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ — магнитная постоянная (магнитная проницаемость вакуума) в системе единиц СИ, \hbar — постоянная Планка, γ — гиромагнитное отношение, $\sigma_{1,2}$ — векторы матриц Паули в узлах локализации спинов 1 и 2, r — расстояние между спинами в димере, \mathbf{n} — единичный вектор в направлении от одного спина к другому, \mathbf{B} — вектор индукции магнитного поля.

Диполь-дипольное взаимодействие весьма анизотропно. Ограничимся случаем, когда продольная ось димера параллельна внешнему полю, идущему в z -направлении: $\mathbf{n} \parallel \mathbf{B} \parallel Oz$. Тогда гамильтониан (72) приобретает вид

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} D (\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y - 2\sigma_1^z \sigma_2^z) - \frac{1}{2} h (\sigma_1^z + \sigma_2^z), \quad (75)$$

где

$$D = \frac{\mu_0 \gamma^2 \hbar^2}{4\pi 2r^3} \quad (76)$$

есть константа диполь-дипольных взаимодействий и

$$h = \gamma \hbar B. \quad (77)$$

Гамильтониан (75) соответствует ХХЗ-модели. В состоянии термального равновесия матрица плотности является гиббсовской и имеет Х-форму, поэтому дискорд системы допускает аналитический расчет [99]. На рис. 10 показан температурный ход дискорда при различных значениях нормированного внешнего поля. В точке абсолютного нуля температуры квантовые корреляции в системе отсутствуют. Это обусловлено сильной анизотропией взаимодействий (75): доминирующий zz -вклад приводит к классическому (изинговскому) основному состоянию димера (независимо от знака D). В отсутствие внешнего поля (когда $h = 0$) квантовый дискорд при температуре T_m ,

$$k_B T_m / D = 0,8812\dots, \quad (78)$$

достигает своего наибольшего значения

$$Q_m = 0,0830\dots \quad (79)$$

При высоких температурах квантовый дискорд ведет себя как

$$Q|_{T \rightarrow \infty} \approx \frac{1}{4 \ln 2} \frac{1}{(k_B T / D)^2}. \quad (80)$$

Высокотемпературное поведение, таким образом, не зависит от величины внешнего магнитного поля.

Достаточно уединенные пары, состоящие из ядерных спинов с диполь-дипольным взаимодействием, содержат кристаллогидраты. Так, измерения, проведенные методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР) при комнатной температуре, показали, что в кристаллах гипса $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ расстояние между протонами в каждой молекуле воды составляет $r = 0,158$ нм [100,101]). Для протона гиромангнитное отношение γ равно $2,675 \cdot 10^8$ рад/(с·Тл), поэтому константа диполь-ди-

польных взаимодействий (76) для гипса в температурных единицах составляет $D/k_B = 0,73$ мкК. Максимальное значение $Q_m \simeq 0,083$ дискорд достигает при температуре 0,64 мкК. При комнатной же температуре величина квантового дискорда в гипсе, согласно (80), составляет $Q \sim 2 \cdot 10^{-18}$. Несмотря на крайне низкий уровень квантовых корреляций в спин-ядерных системах при комнатных температурах, в настоящее время предприняты попытки их обнаружения методами ЯМР [102–104].

В качестве другого примера можно привести 1,2-дихлорэтан $\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$. В этом соединении два протона у каждого атома углерода намного сильнее связаны диполь-дипольным взаимодействием между собой, чем с протонами, относящимися к другому атому углерода. ЯМР измерения, проведенные на твердом дихлорэтане при температуре 90 К, показали, что здесь $r = 0,17(2)$ нм [105] (см. также [101,106]). Температура T_m , при которой дискорд максимален в этом материале, равна 0,517 мкК [99]. При температуре 90 К величина квантовых корреляций составляет $Q \sim 1,5 \cdot 10^{-17}$.

5. Проблема декогеренции

В настоящее время основным препятствием на пути создания приборов и устройств, работающих на квантовых корреляциях, является квантовая декогерентность [107,108]. Кубиты в веществах с магнитоактивными центрами существуют. Более того, как следует из предыдущего изложения, между ними существуют и квантовые корреляции, которые, подобно суперпозиционным запутанным состояниям в ковалентных связях, неограниченно долго поддерживаются взаимодействиями. Однако, чтобы реализовать на тех или иных материалах квантово-когерентные приборы, нужны не статические кубиты, а большие системы когерентных кубитов с управляемой и контролируемой в течение достаточно длительного времени динамикой.

Так, для квантового компьютера время существования когерентного состояния регистра должно быть настолько большим, чтобы в течение него можно было успеть выполнить требуемое алгоритмом число вычислительных операций. Следует заметить, что время декогеренции τ_{dc} быстро уменьшается с увеличением числа кубитов в системе [7,109–111].

5.1. Ядерные спиновые системы

Большие успехи в манипулировании кубитами сейчас достигнуты методами ЯМР для спинов ядер атомов различных молекул [112,113]. В технике магнитного резонанса динамика спинов характеризуется, как известно, временем спин-решеточной (продольной) релаксации T_1 и временем спин-спиновой (поперечной) релаксации T_2 . При этом $T_2 < T_1$, а $\tau_{dc} \leq T_2$. Спин-решеточная релаксация ответственна за затухание про-

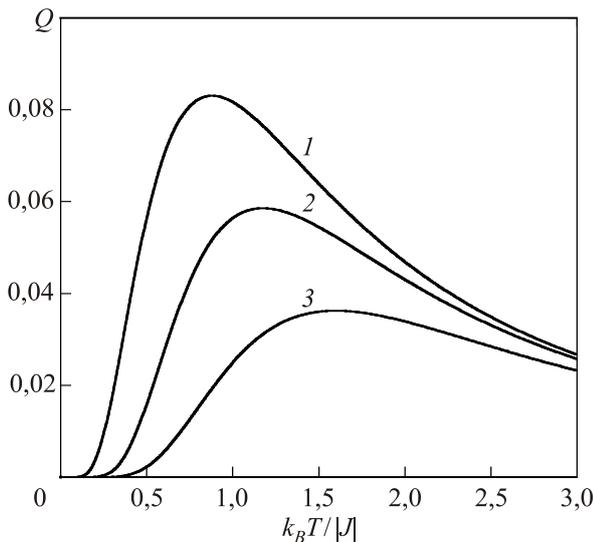


Рис. 10. Температурные зависимости квантового дискорда в димере с диполь-дипольным взаимодействием при значениях нормированного внешнего поля $h / D = 0$ (1), 1 (2) и 2 (3).

дольной намагниченности в системе, а спин-спиновая — за расфазировку поперечной компоненты намагниченности, декогеренцию состояний.

Время спин-решеточной релаксации T_1 для ядерных спинов может достигать минут, часов и более. Например, в кристаллах фторapatита кальция $\text{Ca}_5\text{F}(\text{PO}_4)_3$ время релаксации T_1 для ядер фтора ^{19}F составляет ~ 3 мин [114]. Однако при использовании запутанности недостаток для ядерных спинов является необходимость работы при крайне низких температурах $T \sim D/k_B$, т.е. при долях микрокельвина. Причина кроется в том, что ядерный магнетон мал (почти в 1840 раз меньше электронного). Чтобы работать при более высоких температурах, надежды теперь стали возлагать на дискорд, который, в отличие от запутанности, может присутствовать (правда, в очень небольших количествах) при сколь угодно высоких температурах.

5.2. Кубиты на электронных спинах

Для электронных спинов запутанность в парамагнитных материалах, как мы видели, может существовать при комнатных температурах и даже выше. Это их несомненное преимущество перед кубитами на спинах ядер атомов (молекул). Однако в электронных парамагнетиках велико спин-решеточное взаимодействие (обусловленное, в частности, «шубой» из лигандов), приводящее к слишком малым временам релаксации — порядка $10^{-10} - 10^{-6}$ с ([6], с. 178). В настоящее время для таких материалов, к сожалению, не просматривается перспектива их использования в качестве кубитовых систем. Так, наблюдать, скажем, на моноядерных НКЖ осцилляции Раби (начальный тест наличия управляемых кубитов) или осуществить на них какую-либо однокубитовую операцию сейчас не представляется возможным.

Тем не менее исследователи не теряют надежды создать или найти материалы с большими временами релаксации электронных спинов. Для этой цели помещают, например, атомы азота или фосфора внутрь клеток фуллеренов C_{60} . Получаются эндодральные фуллерены, в которых электронные облака внедренных атомов не перекрываются друг с другом, поэтому обменное взаимодействие между ними отсутствует. (Магнитные диполь-дипольные связи, наоборот, присутствуют, поскольку расстояние между эндоатомами может составлять ~ 1 нм.) Основное состояние атомов N и P является кваттетом (спин $S = 3/2$). Однако из четырех спиновых состояний этих эндоатомов состояния с проекцией спина $\pm 1/2$ образуют внутренний электронный кубит. ЭПР спектры обсуждаемых материалов очень резкие и показывают, что время продольной релаксации при температуре $T \sim 7$ К составляет приблизительно 1 с, а поперечной не зависит от температуры и равно ~ 20 мкс ([6], с. 171). Более аккуратные измерения, проведенные на эндодральных фуллеренах

N@C_{60} , позволили установить, что в них время декогерентности электронных спинов атомов азота при комнатной температуре составляет порядка 80 мкс [115].

Теоретические оценки предсказывают, что время существования квантовой суперпозиции и запутанности в радикальных парах, ответственных за химический компас перелетных птиц, должно быть не менее 100 мкс [116]. В последнее время большие надежды возлагают также на NV-центры в алмазе, для которых измеренное при комнатной температуре время декогерентности достигает 1,8 мс [117].

6. Заключение

Исследования последних лет значительно расширили существовавшие ранее представления о квантовых корреляциях. Были разработаны количественные меры как для запутанности, так и для дискорда. Используя их, удалось развить методы, пригодные для фактического расчета квантовых корреляций в реальных материалах. Однако следует отметить, что не все обстоит гладко. Так, например, нет математического доказательства того, что за повышение скорости упомянутого во Введении ДКВ1 ответственен именно дискорд. До сих пор никто не разработал алгоритмов квантовых вычислений на основе дискорда, как это было ранее сделано с использованием запутанности. Тем не менее оптимисты считают, что заложенный теоретический фундамент откроет пути для развития новых технологий, направленных на создание приборов и устройств, работающих на квантовых корреляциях.

Работа поддержана РФФИ (гранты 13-03-00017 и 13-03-12418) и программой № 8 Президиума РАН.

1. А.С. Холево, *Введение в квантовую теорию информации*, МЦНМО, Москва (2003).
2. L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, and V. Vedral, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 517 (2008).
3. R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, and K. Horodecki, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 865 (2009).
4. А.С. Холево, *Квантовые системы, каналы, информация*, МЦНМО, Москва (2010).
5. К.А. Валиев, А.А. Кокин, *Квантовые компьютеры: надежды и реальность*, НИЦ РХД, Москва-Ижевск (2002).
6. А.А. Кокин, *Твердотельные квантовые компьютеры на ядерных спинах*, Институт компьютерных исследований, Москва-Ижевск (2004).
7. К.А. Валиев, *УФН* **175**, 3 (2005).
8. М. Нильсен, И. Чанг, *Квантовые вычисления и квантовая информация*, Мир, Москва (2006).
9. W.H. Zurek, *Ann. Phys. (Leipzig)* **9**, 855 (2000).
10. L. Henderson and V. Vedral, *J. Phys. A: Math. Gen.* **34**, 6899 (2001).
11. H. Ollivier and W.H. Zurek, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 017901 (2002).
12. V. Vedral, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 050401 (2003).

13. W.H. Zurek, *Phys. Rev. A* **67**, 012320 (2003).
14. E. Knill and R. Laflamme, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5672 (1998).
15. A. Datta, A. Shaji, and C.M. Caves, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 050502 (2008).
16. B.P. Lanyon, M. Barbieri, M.P. Almeida, and A.G. White, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 200501 (2008).
17. R. Dillenschneider, *Phys. Rev. B* **78**, 224413 (2008).
18. M.S. Sarandy, *Phys. Rev. A* **80**, 022108 (2009).
19. T. Werlang, C. Trippe, G.A.P. Ribeiro, and G. Rigolin, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 095702 (2010).
20. T. Werlang, G.A.P. Ribeiro, and G. Rigolin, *Int. J. Mod. Phys. B* **27**, 1345032 (2013).
21. A. Ferraro, L. Aolita, D. Cavalcanti, F.M. Cucchietti, and A. Acín, *Phys. Rev. A* **81**, 052318 (2010).
22. V. Madhok and A. Datta, *Int. J. Mod. Phys. B* **27**, 1345041 (2013).
23. B. Dakić, Y.-O. Lipp, X.-S. Ma, M. Ringbauer, S. Krottschek, S. Barz, T. Paterek, V. Vedral, A. Zeilinger, Č. Brukner, and P. Walther, *Nature Phys.* **8**, 666 (2012).
24. M. Gu, H.M. Chrzanowski, S.M. Assad, T. Symul, K. Modi, T.C. Ralph, V. Vedral, and P.K. Lam, *Nature Phys.* **8**, 671 (2012).
25. L.C. Céleri, J. Maziero, and R.M. Serra, *Int. J. Quant. Inf.* **9**, 1837 (2011).
26. K. Modi, A. Brodutch, H. Cable, T. Paterek, and V. Vedral, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1655 (2012).
27. L. Amico, S. Bose, V.E. Korepin, and V. Vedral (guest eds.), *Int. J. Mod. Phys. B* **27**, Nos. 1–3 (2013), special issue: *Classical Versus Quantum Correlations in Composite Systems*.
28. Е.С. Венгцель, *Теория вероятностей*, Наука, Москва (1964).
29. В.П. Чистяков, *Курс теории вероятностей*, Наука, Москва (1982).
30. Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике для научных работников и инженеров*, Наука, Москва (1984).
31. W.K. Wootters, *Quant. Inf. Comp.* **1**, 27 (2001).
32. M.V. Plenio and S. Virmani, *Quant. Inf. Comp.* **7**, 1 (2007).
33. L. Bombelli, R.K. Koul, J. Lee, and R.D. Sorkin, *Phys. Rev. D* **34**, 373 (1986).
34. C.H. Bennett, G. Brassard, S. Popescu, B. Schumacher, J. Smolin, and W.K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 722 (1996).
35. C.H. Bennett, H.J. Bernstein, S. Popescu, and B. Schumacher, *Phys. Rev. A* **53**, 2046 (1996).
36. C.H. Bennett, D.P. DiVincenzo, J.A. Smolin, and W.K. Wootters, *Phys. Rev. A* **54**, 3824 (1996).
37. И.В. Баргатин, Б.А. Гришанин, В.Н. Задков, *УФН* **171**, 625 (2001).
38. P. Calabrese and J. Cardy, *J. Stat. Mech.* P06002 (2004), [doi:10.1088/1742-5468/2004/06/P06002](https://doi.org/10.1088/1742-5468/2004/06/P06002).
39. P. Calabrese and J. Cardy, *J. Quant. Inf.* **4**, 429 (2006).
40. I. Peschel, *J. Stat. Mech.* P12005 (2004), [doi:10.1088/1742-5468/2004/12/P12005](https://doi.org/10.1088/1742-5468/2004/12/P12005).
41. I. Peschel and V. Eisler, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 504003 (2009).
42. М.А. Юрищев, *ЖЭТФ* **138**, 595 (2010).
43. G. Vidal, J.I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 227902 (2003).
44. R.F. Werner, *Phys. Rev. A* **40**, 4277 (1989).
45. A. Peres, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1413 (1996).
46. S. Hill and W.K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 5022 (1997).
47. W.K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2245 (1998).
48. K. Audenaert, F. Verstraete, and B. De Moor, *Phys. Rev. A* **64**, 052304 (2001).
49. B. Bleaney and K.D. Bowers, *Proc. Roy. Soc. London, Ser. A* **214**, 451 (1952).
50. Р. Карлин, *Магнетохимия*, Мир, Москва (1989).
51. М.А. Nielsen, *Quantum Information Theory, Dissertation*, New Mexico (1998); *E-print archives, quant-ph/0011036*.
52. M.C. Arnesen, S. Bose, and V. Vedral, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 017901 (2001).
53. А.Е. Дубинов, И.Д. Дубинова, С.К. Сайков, *W-функция Ламберта: таблицы интегралов и другие математические свойства*, СарФТИ, Саров (2004).
54. M. Wieśniak, V. Vedral, and Č. Brukner, *New J. Phys.* **7**, 258 (2005).
55. M. Wieśniak, *Quantum Entanglement in Some Physical Systems, Dissertation*, Gdańsk (2007); *E-print archives, quant-ph/0710.1775*.
56. Č. Brukner, V. Vedral, and A. Zeilinger, *Phys. Rev. A* **73**, 012110 (2006).
57. A.M. Souza, M.S. Reis, D.O. Soares-Pinto, L.S. Oliveira, and R.S. Sarthour, *Phys. Rev. B* **77**, 104402 (2008).
58. М.А. Yurishchev, *Phys. Rev. B* **84**, 024418 (2011).
59. С.М. Алдошин, А.И. Зенчук, Э.Б. Фельдман, М.А. Юрищев, *Усп. химии* **81**, 91 (2012).
60. С.М. Алдошин, Э.Б. Фельдман, М.А. Юрищев, *ЖЭТФ* **134**, 940 (2008).
61. N.A. Sanina, S.M. Aldoshin, T.N. Rudneva, N.I. Golovina, G.V. Shilov, Y.M. Sul'ga, N.S. Ovanesyan, V.N. Ikorskii, and V.I. Ovcharenko, *J. Mol. Struct.* **752**, 110 (2005).
62. Н.А. Санина, Т.Н. Руднева, С.М. Алдошин, А.Н. Чехлов, Р.Б. Моргунов, Е.В. Курганова, Н.С. Ованесян, *Изв. АН. Серия хим.* № 1, 28 (2007).
63. А.Ф. Ванин, *УФН* **170**, 455 (2000).
64. А.Ф. Шестаков, Ю.М. Шульга, Н.С. Емельянова, Н.А. Санина, С.М. Алдошин, *Изв. АН. Серия хим.* № 7, 1244 (2007).
65. А.Н. Васильев, М.М. Маркина, Е.А. Попова, *ФНТ* **31**, 272 (2005) [*Low Temp. Phys.* **31**, 203 (2005)].
66. А.И. Смирнов, В.Н. Глазков, *ЖЭТФ* **132**, 984 (2007).
67. К. Шеннон, *Работы по теории информации и кибернетике*, ИИЛ, Москва (1963).
68. А.М. Яглом, И.М. Яглом, *Вероятность и информация*, КомКнига, Москва (2006).
69. Р.Л. Стратонович, *Теория информации*, Советское радио, Москва (1975).
70. В.В. Митюгов, *Физические основы теории информации*, Советское радио, Москва (1976).
71. В.В. Панин, *Основы теории информации*, БИНОМ. Лаборатория знаний, Москва (2007).
72. Э.М. Габидулин, Н.И. Пилипчук, *Лекции по теории информации*, МИФИ, Москва (2007).
73. Дж. Прескилл, *Квантовая информация и квантовые вычисления*, Т. 1, НИЦ РХД, Москва-Ижевск (2008).

74. С.Я. Килин, УФН **169**, 507 (1999).
75. А.Ю. Хренников, *Введение в квантовую теорию информации*, Физматлит, Москва (2008).
76. Ш. Имре, Ф. Балаж, *Квантовые вычисления и связь. Инженерный подход*, Физматлит, Москва (2008).
77. *Quantum Theory and Measurements*, J.A. Wheeler and W.H. Zurek (eds.), Princeton University Press, Princeton (1983).
78. А.С. Холево, *Вероятностные и статистические аспекты квантовой теории*, МЦНМО, Москва (2003).
79. S. Luo, *Phys. Rev. A* **77**, 042303 (2008).
80. F.F. Fanchini, T. Werlang, C.A. Brasil, L.G.E. Arruda, and A.O. Caldeira, *Phys. Rev. A* **81**, 052107 (2010).
81. M. Ali, A.R.P. Rau, and G. Alber, *Phys. Rev. A* **81**, 042105 (2010); Erratum in: *Phys. Rev. A* **82**, 069902 (2010).
82. M. Ali, *J. Phys. A: Math. Theor.* **43**, 495303 (2010).
83. B. Li, Z.-X. Wang, and S.-M. Fei, *Phys. Rev. A* **83**, 022321 (2011).
84. D. Girolami and G. Adesso, *Phys. Rev. A* **83**, 052108 (2011).
85. M.A. Yurishchev, *arXiv:1302.5239 [quant-ph]*.
86. J.R. Weaver, *Am. Math. Mon.* **92**, 711 (1985).
87. Х.Д. Икрамов, *ЖБММФ* **33**, 620 (1993).
88. A. Andrew, *SIAM Rev.* **40**, 697 (1998).
89. D.A. Tennant, S.E. Nagler, A.W. Garrett, T. Barnes, and C.C. Torardi, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4998 (1997).
90. J.T. Haraldsen, T. Barnes, and J.L. Musfeldt, *Phys. Rev. B* **71**, 064403 (2005).
91. M.B. Stone, W. Tian, M.D. Lumsden, G.E. Granroth, D. Mandrus, J.-H. Chung, N. Harrison, and S.E. Nagler, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 087204 (2007).
92. G. Xu, C. Broholm, D.H. Reich, and M.A. Adams, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4465 (2000).
93. S.A. Friedberg and C.A. Raquet, *J. Appl. Phys.* **39**, 1132 (1968).
94. J.C. Bonner, S.A. Friedberg, H. Kobayashi, D.L. Meier, and H.W.J. Blöte, *Phys. Rev. B* **27**, 248 (1983).
95. М.Е. Фишер, *Природа критического состояния*, Мир, Москва (1968).
96. L. Berger, S.A. Friedberg, and J.T. Schriempf, *Phys. Rev.* **132**, 1057 (1963).
97. B.N. Figgis and R.L. Martin, *J. Chem. Soc. London*, 3837 (1956).
98. M. Fondo, A.M. García-Deibe, J. Sanmartin, M.R. Bermejo, L. Lezama, and T. Rojo, *Eur. J. Inorg. Chem.*, 3703 (2003).
99. E.I. Kuznetsova and M.A. Yurishchev, *Quant. Inf. Proc.* **12**, 3587 (2013).
100. G.E. Pake, *J. Chem. Phys.* **16**, 327 (1948).
101. А. Абрагам, *Ядерный магнетизм*, ИИЛ, Москва (1963).
102. R. Auccaise, J. Maziero, L.C. Céleri, D.O. Soares-Pinto, E.R. de Azevedo, T.J. Bonagamba, R.S. Sarthour, I.S. Oliveira, and R.M. Serra, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 070501 (2011).
103. G. Passante, O. Moussa, D.A. Trotter, and R. Laflamme, *Phys. Rev. A* **84**, 044302 (2011).
104. H. Katiyar, S.S. Roy, T.S. Mahesh, and A. Patel, *Phys. Rev. A* **86**, 012309 (2012).
105. H.S. Gutowsky, G.B. Kistiakowsky, G.E. Pake, and E.M. Purcell, *J. Chem. Phys.* **17**, 972 (1949).
106. Х. Гюнтер, *Введение в курс спектроскопии ЯМР*, Мир, Москва (1984).
107. Д. Бауместер, А. Экерт, А. Цайлингер, *Физика квантовой информации*, Постмаркет, Москва (2002).
108. T.D. Ladd, F. Jelezko, R. Laflamme, Y. Nakamura, C. Monroe, and J.L. O'Brien, *Nature* **464**, 45 (2010).
109. М.Б. Менский, *УФН* **173**, 1199 (2003).
110. H.G. Krojanski and D. Suter, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 090501 (2004).
111. S.I. Doronin, E.B. Fel'dman, and A.I. Zenchuk, *J. Chem. Phys.* **134**, 034102 (2011).
112. L.M.K. Vandersypen and I.L. Chuang, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 1037 (2004).
113. I.S. Oliveira, T.J. Bonagamba, R.S. Sarthour, J.C.C. Freitas, and E.R. deAzevedo, *NMR Quantum Information Processing*, Elsevier, Amsterdam (2007).
114. P. Cappellaro, C. Ramanathan, and D.G. Cory, *Phys. Rev. A* **76**, 032317 (2007).
115. J.J.L. Morton, A.M. Tyryshkin, A. Ardavan, K. Porfyakis, S.A. Lyon, and G.A.D. Briggs, *J. Chem. Phys.* **124**, 014508 (2006).
116. E.M. Gauger, E. Rieper, J.J.L. Morton, S.C. Benjamin, and V. Vedral, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 040503 (2011).
117. G. Balasubramanian, P. Neumann, D. Twitchen, M. Markham, R. Kolesov, N. Mizuochi, J. Isoya, J. Achard, J. Beck, J. Tisler, V. Jacques, P.R. Hemmer, F. Jelezko, and J. Wrachtrup, *Nature Mater.* **8**, 383 (2009).

Quantum entanglement and quantum discord
in magnetoactive materials
(Review Article)

S.M. Aldoshin, E.B. Fel'dman, and M.A. Yurishchev

The conceptions of quantum entanglement and quantum discord are reviewed. The entropic measures for these informational correlations are presented. The examples which demonstrate the presence of quantum information correlations in different paramagnetic materials with ferro- and antiferromagnetic couplings are given. The temperature behavior of the discord for atomic nuclear spins is considered. The decoherence of quantum states with electron and nuclear spins is discussed.

PACS: 03.65.Ud Entanglement and quantum nonlocality;
03.67.Mn Entanglement measures, witnesses, and other characterizations;
75.10.Jm Quantum spin models;
75.50.Xx Molecular magnets.

Keywords: qubit, decoherence time, density matrix, entropy, information correlation.