

## 2. ТЕОРИЯ НАНОСИСТЕМ

УДК 538.91+94

Оригинальная статья

### МОДЕЛЬ ТРЕХКУБИТНОГО КЛАСТЕРА В ТЕРМОСТАТЕ

Э. Андре<sup>1,2</sup>, А.Н. Цирулев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Faculty of Sciences, Agostinho Neto University  
Avenida 4 de Fevereiro 7, Luana, Angola*

<sup>2</sup>*ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»,  
170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35  
tsirulev.an@tversu.ru*

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.223

**Аннотация:** В работе изучается математическая модель квантового кластера, состоящего из трех кубитов и находящегося в тепловом равновесии с окружением. Эффективный гамильтониан инвариантен относительно перестановок кубитов и состоит из двух частей. Первая часть подобна XYZ-модели Гейзенберга с внутренним двухкубитным взаимодействием, а вторая включает трехкубитное взаимодействие с термостатом. Такая квантовая система допускает полностью аналитическое исследование и рассматривается в контексте математического моделирования квантовых метаматериалов, в которых нанокластеры являются элементарными структурными единицами с сильным внутренним взаимодействием кубитов и относительно слабой связью со средой. Построен ортонормированный базис собственных векторов гамильтониана, включающий максимально запутанное  $W$ -состояние, получен в явном виде оператор плотности состояния кластера и изучены температурные зависимости его термодинамических характеристик: статистической суммы, энтропии и свободной энергии. Показано, что условия теплового равновесия в такой квантовой системе выполняются при температурах от 0,2 К до микрокельвинов, что соответствует рабочему диапазону современных квантовых логических элементов и квантовых симуляторов.

**Ключевые слова:** кластер кубитов, гамильтониан, базис Паули, операторная экспонента, оператор плотности состояния, состояние Гиббса – фон Неймана, статистическая сумма, энтропия, свободная энергия.

### 1. Введение

В широком смысле квантовые метаматериалы – это искусственные композитные структуры, которые обладают эффективными свойствами, не встречающимися у природных материалов. Квантовые эффекты отчетливо проявляются или доминируют в метаматериалах, которые построены из нанокластеров с сильной внутренней связью, при относительно слабой связи каждого кластера с соседями. В природе такие системы встречаются повсеместно, в том числе и в предельных случаях; например, энергия связи нуклонов в ядре атома в кристалле намного порядков выше его энергии связи с окружением. Однако интерес к моделям квантовых метаматериалов связан, в основном, с созданием искусственных образований (кубитов) типа кристаллов ультрахолодных атомов, квантовых точек, искусственных атомов на основе джозефсоновских переходов, двумерных топологических систем, предназначенных для квантовой электроники и оптики, а также

© Э. Андре, А.Н. Цирулев, 2023

для квантовых вычислительных устройств и симуляторов квантовой динамики в физике конденсированного состояния [1-3].

Отличительной особенностью квантовых метаматериалов [4, 5] является выполнение двух условий: во-первых, рабочий диапазон должен быть низкотемпературным, ниже 1К, а во-вторых, взаимодействие нанокластеров с окружением должно быть слабым, но не пренебрежимо слабым, по сравнению с энергией связи кубитов внутри кластера. Окружающая тепловая среда может, в принципе, иметь любое происхождение, совершенно не похожее на природу нанокластера, но при соблюдении указанных условий. Так, например, в работе [6], в которой впервые были введены термины «квантовый метаматериал» и «квантовый нанокластер», в качестве среды использовался оптический резонатор, а нанокластер был представлен набором зарядовых кубитов (кулоновская энергия много больше энергии джозефсоновской связи). Отметим, что с математической точки зрения термодинамические характеристики нанокластеров удобно рассматривать не на основе метода вторичного квантования, когда гамильтониан представлен в терминах операторов рождения и уничтожения, а на основе взаимодействующих кубитов; переход от первого способа описания ко второму всегда возможен посредством преобразования Йордана-Вигнера.

Целью данной работы является изучение термодинамических свойств трехкубитного кластера в рамках математической модели, в которой гамильтониан включает, помимо дипольного взаимодействия, также и взаимодействие всех трех кубитов с термостатом; в частности, трехкубитный гамильтониан может описывать и управляющее воздействие. Используя базис Паули и метод, развитый в работе [7], мы вычислили операторные экспоненты, оператор плотности, статистическую сумму и свободную энергию такой системы как функции параметра взаимодействия. В разделе 2 построен модельный гамильтониан системы и вычислены соответствующие операторные экспоненты. Раздел 3 посвящен исследованию температурной зависимости термодинамических характеристик кластера. Мы используем, если не оговорено другое, систему единиц, в которой постоянная Планка, скорость света и постоянная Больцмана равны единице ( $\hbar = c = k_B = 1$ ), так что частота имеет размерность длины, а энергия и температура измеряются в обратных единицах длины.

## **2. Модельный гамильтониан кластера в термостате**

Выбор вычислительного базиса для математического моделирования наноматериалов и нанокластеров достаточно произволен. Однако, если возникает задача вычисления операторных экспонент, то наиболее удобным является базис Паули, причем модельный гамильтониан следует

представить (насколько это возможно) в виде сумм коммутирующих частичных гамильтонианов, а затем, в каждом из них провести разбиение на попарно антикоммутирующие части. Базисные элементы базиса Паули одновременно эрмитовы и унитарны, а коэффициенты разложения гамильтониана – эрмитова оператора – вещественны. Выражения

$$\sigma_0 = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|, \sigma_1 = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|, \sigma_2 = -i|0\rangle\langle 1| + i|1\rangle\langle 0|, \sigma_3 = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| \quad (1)$$

определяют операторы Паули для одного кубита. Они удовлетворяют обычным соотношениям композиции и коммутации:

$$\sigma_1\sigma_2 = i\sigma_3, \sigma_2\sigma_3 = i\sigma_1, \sigma_3\sigma_1 = i\sigma_2, \sigma_0\sigma_k = \sigma_k\sigma_0 = \sigma_k, \sigma_k\sigma_l = -\sigma_l\sigma_k, k, l = 1, 2, 3. \quad (2)$$

Для системы  $n$  кубитов базис Паули в соответствующем гильбертовом пространстве состоит из  $4^n$  тензорных произведений  $\sigma_{ij\dots k} = \sigma_i \otimes \sigma_j \otimes \dots \otimes \sigma_k$ , в которых расположение однокубитных операторов (1) соответствует номерам кубитов. Композиция базисных элементов определяется поэлементно на основе формул (2), так что, например,  $\sigma_{303}\sigma_{122} = \sigma_{221}$ . Общие свойства базиса Паули и некоторые его применения рассмотрены в деталях в работах [8, 9].

Рассмотрим кластер, состоящий из трех кубитов и находящийся в равновесии с термостатом. Система в термостате не может описываться чистыми состояниями, но если равновесие достигнуто, то система с гамильтонианом  $H$  находится в состоянии Гиббса–фон Неймана и описывается оператором плотности ( $\beta = 1/T$  – обратная температура):

$$\rho = \exp(-\beta H) / Z, Z = \text{tr} \exp(-\beta H). \quad (3)$$

В состоянии теплового равновесия полный гамильтониан имеет вид:

$$H = H_c \otimes I_t + I_c \otimes H_t + eH_i \otimes H_t, \quad (4)$$

где  $H_c$  и  $H_t$  обозначают, соответственно, частичные гамильтонианы кластера и термостата, если рассматривать их как изолированные системы, третье слагаемое – это гамильтониан взаимодействия между кластером и термостатом,  $e \ll 1$  – малый параметр, а  $I_c$  и  $I_t$  – тождественные операторы в подпространствах кластера и термостата соответственно.

Для конкретизации модели необходимо сделать ряд предположений. Во-первых, интенсивность взаимодействия, в смысле операторной нормы, предполагается малой по сравнению с первым и вторым гамильтонианами (при этом гамильтониан  $H_t$  можно считать управляющим воздействием). Во-вторых, если кинетическая стадия перехода к равновесию завершена, то вместо обычной модели термостата как бесконечного числа осцилляторов можно рассматривать эффективный гамильтониан с единственным вырожденным собственным значением  $E$ , удовлетворяющий условию  $H_t^2 = EH_t$ , а в предельном случае изолированных подсистем  $H_t = E I_t$ . Далее мы принимаем естественное

(приближенное) требование инвариантности базовых гамильтонианов  $H_c$  и  $H_i$  относительно любой перестановки кубитов, причем гамильтониан кластера соответствует XYZ-модели Гейзенберга с двухкубитным взаимодействием, в то время как гамильтониан взаимодействия включает трехкубитное [10-12] взаимодействие. Тогда все три слагаемых в (4) коммутируют, причем второе можно не учитывать, а гамильтониан термостата  $H_i$  даст, в конечном счете, только несущественный постоянный множитель  $\exp(-\beta E_i)$  в статистическую сумму эффективного гамильтониана  $H_e = H_c + eH_i$ , так что оператор плотности (3) не изменится. Эти условия определяют оба частичных гамильтониана почти однозначно, с точностью до числовых коэффициентов слагаемых, которые качественно не изменяют характерные состояния кластера и выбраны равными единице для простоты вычислений:

$$H_i = (\omega/12)(F_1 + F_2 + F_3 + 3S), \quad H_c = (\omega/12)(G_1 + G_2 + G_3 + 3I_c),$$

где  $S = -\sigma_{333}$  и  $F_1 = \sigma_{113} + \sigma_{131} + \sigma_{311}$ ,  $F_2 = \sigma_{223} + \sigma_{232} + \sigma_{322}$ ,  $G_1 = \sigma_{022} + \sigma_{202} + \sigma_{220}$ ,  $G_2 = \sigma_{011} + \sigma_{101} + \sigma_{110}$ ,  $F_3 = \sigma_{003} + \sigma_{030} + \sigma_{300}$ ,  $G_3 = -\sigma_{033} - \sigma_{303} - \sigma_{330}$ .

Учитывая симметрию гамильтонианов, получаем соотношения

$$\{F_i, S\} = 2G_i, \quad \{G_i, S\} = 2F_i, \quad i = 1, 2, 3, \quad \{F_i, F_j\} = 2G_k, \quad G_i, G_j = 2G_k, \quad \{F_i, G_j\} = 2F_k, \\ i \neq j \neq k,$$

$$\{F_i, G_1\} = 6S + 4F_1, \quad \{F_2, G_2\} = 6S + 4F_2, \quad \{F_3, G_3\} = 6S - 4F_3.$$

Квадраты операторов равны  $S^2 = I_c$  и  $F_1^2 = G_1^2 = 3I_c + 2G_1$ ,  $F_2^2 = G_2^2 = 3I_c + 2G_2$ ,  $F_3^2 = G_3^2 = 3I_c - 2G_3$ . Из этих равенств легко увидеть, что  $H_c$  и  $H_i$  коммутируют,  $[H_i, H_c] = 0$ , и  $H_i H_c = \omega H_i$ ,  $H_i^2 = H_c^2 = \omega H_c$ , так что  $H_i^3 = \omega^2 H_i$ ,  $H_i^4 = \omega^3 H_c$ ,  $H_i^5 = \omega^4 H_i$ , ...,  $H_c^3 = \omega^2 H_c$ ,  $H_c^4 = \omega^3 H_c$ , ...

Используя полученные соотношения и представление операторной экспоненты рядом Тейлора, найдем:

$$\exp(-e\beta H_i) = I_c - e\beta H_i + \frac{e^2 \beta^2}{2!} H_i^2 - \frac{e^3 \beta^3}{3!} H_i^3 + \frac{e^4 \beta^4}{4!} H_i^4 - \frac{e^5 \beta^5}{5!} H_i^5 + \dots = \\ = I_c - \left( e\beta + \frac{\omega^2 e^3 \beta^3}{3!} + \frac{\omega^4 e^5 \beta^5}{5!} + \dots \right) H_i + \left( \frac{\omega e^2 \beta^2}{2!} + \frac{\omega^3 e^4 \beta^4}{4!} + \dots \right) H_c = I_c - \frac{\text{sh} \omega_i \beta}{\omega} H_i + \frac{\text{ch} \omega_i \beta - 1}{\omega} H_c,$$

где  $\omega_i = e\omega \ll \omega$ . Аналогично,  $\exp(-\beta H_c) = I_c + (1/\omega)(e^{-\omega\beta} - 1)H_c$ .

Таким образом, для эффективного гамильтониана получим:

$$\exp\{-\beta(H_c + eH_i)\} = \exp(-\beta H_c) \exp(-\beta eH_i) = I_c - \frac{e^{-\omega\beta} \text{sh} \omega_i \beta}{\omega} H_i + \frac{e^{-\omega\beta} \text{ch} \omega_i \beta - 1}{\omega} H_c. \quad (5)$$

Вследствие коммутирования эффективный гамильтониан кластера  $H_e = H_c + eH_i$  и гамильтонианы  $H_c$  и  $H_i$  имеют одинаковые собственные векторы, но, разумеется, различные собственные значения энергии. Во-

первых, вследствие симметрии гамильтонианов относительно любых перестановок кубитов, собственными являются чистые состояния:

$$S_0 = |000\rangle, S_1 = |111\rangle, W = (|001\rangle + |010\rangle + |100\rangle) / \sqrt{3}, \bar{W} = (|011\rangle + |101\rangle + |110\rangle) / \sqrt{3},$$

где  $W$  – максимально запутанное состояние, отличное от  $GHZ$ -состояния (состояние Гринбергера-Хорна-Цайлингера) и принадлежащее ко второму из двух классов максимально запутанных состояний, а  $\bar{W}$  – дуальное ему состояние (псевдо- $W$ ). Остальные четыре собственных вектора удобно выбрать в виде:

$$V_1 = (2|001\rangle - |010\rangle - |100\rangle) / \sqrt{6}, V_2 = (|010\rangle - |100\rangle) / \sqrt{2},$$

$$V_3 = (2|011\rangle - |101\rangle - |110\rangle) / \sqrt{6}, V_4 = (|101\rangle - |110\rangle) / \sqrt{2},$$

чтобы в совокупности получить ортонормированный базис в трехмерном гильбертовом пространстве кластера. Вводя обозначения  $[S] = \{S_0, S_1\}$  и  $[V] = \{V_1, V_2, V_3, V_4\}$ , мы можем записать спектр гамильтонианов как:

$$Spec(H_i) = \{(-\omega_i, \bar{W}), (0, [S], [V]), (\omega_i, W)\}, Spec(H_c) = \{(0, [S], [V]), (\omega, W, \bar{W})\}, \\ Spec(H_e) = \{(0, [S], [V]), (\omega + \omega_i, W), (\omega - \omega_i, \bar{W})\}.$$

Таким образом,  $W$ -состоянию соответствует высшее возбужденное состояние с энергией  $\omega + \omega_i$ . Кроме того, можно показать, что построенный ортонормированный базис собственных векторов кластера обладает максимально возможной усредненной запутанностью.

### 3. Статистическая сумма, энтропия и свободная энергия

Как отмечено выше, гамильтониан  $H_e = H_c + eH_i$  имеет структуру  $XYZ$ -модели Гейзенберга [13, 14] с парным взаимодействием спинов и внешним воздействием общего вида. Однако, вследствие конечности кластера, его термодинамические характеристики будут иными, чем в  $XYZ$ -модели в термодинамическом пределе [15, 16].

Учитывая, что  $trH_i = 0$ ,  $trH_c = 2\omega$  (поскольку  $trI_c = tr\sigma_{000} = 8$ ), для статистической суммы эффективного гамильтониана из (5) получим:

$$Z = tr \exp(-\beta H_e) = 6 + 2e^{-\omega\beta} ch\omega_i\beta, \quad (6)$$

поэтому оператор плотности состояния имеет вид

$$\rho = (I_c - \omega^{-1} e^{-\omega\beta} sh\omega_i\beta H_i + \omega^{-1} (e^{-\omega\beta} ch\omega_i\beta - 1) H_c) / Z.$$

Отметим, что статистическая сумма (6) расходится при  $\omega_i > \omega$  и  $\beta \rightarrow \infty$ , что соответствует принципиальной недостижимости теплового равновесия, если энергия связи кластера с окружением превышает энергию внутренней связи кубитов [17, 18]. Для средней энергии кластера, энтропии и свободной энергии, соответственно,

$$E = tr(\rho H) = -\partial_\beta \ln Z, S = \ln Z + \beta E, F = E - TS = -\beta^{-1} \ln Z,$$

находим, что в низкотемпературном пределе,  $\beta \rightarrow \infty$ ,

$$E = 2e^{-\omega\beta} (\omega ch \omega_i \beta - \omega_i sh \omega_i \beta) \rightarrow 0, S \rightarrow \ln 6, F \sim -\ln 6 / \beta.$$

В высокотемпературном пределе исходные условия для модельного гамильтониана не выполняются. Характерное поведение статистической суммы и свободной энергии при значении параметра  $\omega_i = 0,25$ , что соответствует  $e = 0,25 / \omega$  (см. рис. 1).

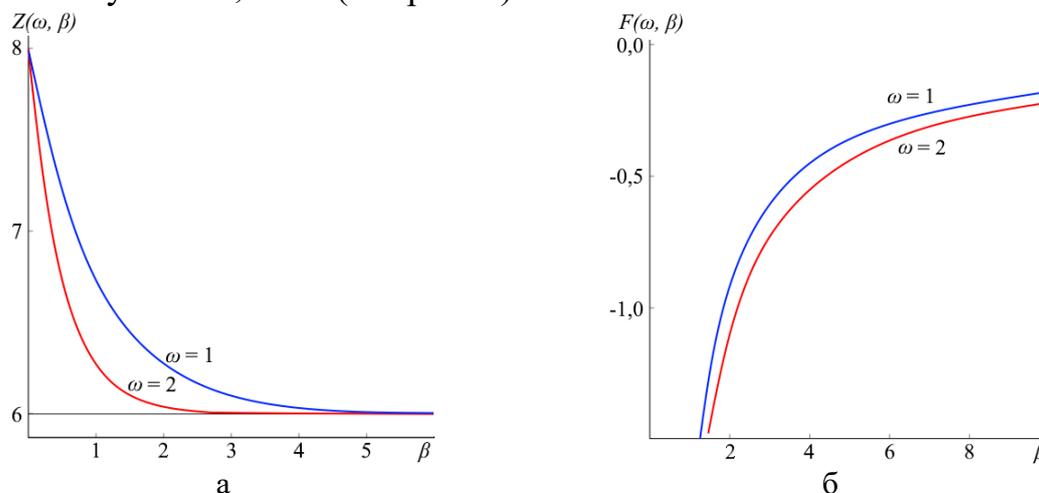


Рис. 1. Статистическая сумма  $Z(\omega, \beta)$  (а), свободная энергия  $F(\omega, \beta)$  (б).

Для перехода к обычным единицам необходимо сделать замену  $\beta \rightarrow \beta / (ch)$ ,  $\omega \rightarrow ch\omega$ . Таким образом, значению  $\beta = 1$  соответствует обратная температура  $1/T \approx 3 \cdot 10^{16}$  эрг<sup>-1</sup>, т.е.  $T \approx 3 \cdot 10^{-17}$  эрг  $\approx 0,2$  К. Отметим, что эта температура является рабочей для большинства современных элементов квантовых вычислительных устройств и симуляторов.

#### 4. Заключение

В работе рассмотрена модель трехкубитного кластера в термостате. Сформулированы условия, при которых кластер может находиться в состоянии Гиббса–фон Неймана и изучены термодинамические характеристики системы. Установлено, что рабочая температура системы, при которой выполнены условия теплового равновесия для модельного гамильтониана, находится в области ниже 0,2 К и при подходящих значениях параметров может достигать микрокельвинов.

#### Библиографический список:

1. **Boudreault, C.** Universal quantum computation with symmetric qubit clusters coupled to an environment / C. Boudreault, H. Eleuch, M. Hilke, R. MacKenzie // *Physical Review A*. – 2022. – V. 106. – I. 6. – P. 062610-1-062610-23. DOI: 10.1103/PhysRevA.106.062610.
2. **Климов, В.В.** Управление излучением элементарных квантовых систем с помощью метаматериалов и нанометачастиц / В.В. Климов // *Успехи физических наук*. – 2021. – Т. 191. – Вып. 10. – С. 1044-1076. DOI: 10.3367/UFNr.2021.01.038910.
3. **Jung, P.** Progress in superconducting metamaterials / P. Jung, A.V. Ustinov, S.M. Anlage // *Superconductor Science and Technology*. – 2014. – V. 27. – № 7. – Art. № 073001. – 13 p. DOI: 10.1088/0953-2048/27/7/073001.
4. **Forrester, D.M.** Whispering galleries and the control of artificial atoms / D.M. Forrester, F.V. Kusmartsev //

- Scientific Reports. – 2016. – V. 6. – Art. № 25084. – 8 p. DOI: 10.1038/srep25084.
5. **Chitambar, E.** Quantum resource theories / E. Chitambar, G. Gour // *Reviews of Modern Physics*. – 2019. – V. 91. – I. 2. – P. 025001-1-025001-48. DOI: 10.1103/RevModPhys.91.025001.
6. **Rakhmanov, A.L.** Quantum metamaterials: Electromagnetic waves in a Josephson qubit line / A.L. Rakhmanov, A.M. Zagoskin, S. Savel'ev, F. Nori // *Physical Review B*. – 2008. – V. 77. – I. 14. – P. 144507-1-144507-7. DOI: 10.1103/PhysRevB.77.144507.
7. **Андре, Э.** Моделирование запутанных состояний в кластерах кубитов / Э. Андре, А.Н. Цирулев // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2022. – Вып. 14. – С. 342-351. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.342.
8. **Tsirulev, A.N.** A geometric view on quantum tensor networks / A.N. Tsirulev // *European Physical Journal Web of Conferences*. – 2020. – V. 226. – Art. № 02022. – 4 p. DOI: 10.1051/epjconf/202022602022.
9. **Nikonov, V.V.** Pauli basis formalism in quantum computations / V.V. Nikonov, A.N. Tsirulev // *Mathematical modelling and geometry*. – 2020. – V. 8. – № 3. – P. 1-14. DOI: 10.26456/mmg/2020-831.
10. **Takeda, K.** Quantum tomography of an entangled three-qubit state in silicon / K. Takeda, A. Noiri, T. Nakajima et al. // *Nature Nanotechnology*. – 2021. – V. 16. – P. 965-969. DOI: 10.1038/s41565-021-00925-0.
11. **Menke, T.** Demonstration of tunable three-body interactions between superconducting qubits / T. Menke, W.P. Banner, T.R. Bergamaschi et al. // *Physical Review Letters*. – 2022. – V. 129. – I. 22. – P. 220501-1-220501-6. DOI: 10.1103/PhysRevLett.129.220501.
12. **Kim, M.** Quantum-Ising Hamiltonian programming in trio, quartet, and sextet qubit systems / M. Kim, Y. Song, J. Kim, J. Ahn // *PRX Quantum*. – 2020. – V. 1 – I. 2. – P. 020323-1-020323-9. DOI: 10.1103/PRXQuantum.1.020323.
13. **Briegel, H.J.** Persistent entanglement in arrays of interacting particles / H.J. Briegel, R. Raussendorf // *Physical Review Letters*. – 2001. – V. 86. – I. 5. – P. 910-915. DOI: 10.1103/PhysRevLett.86.910.
14. **McCoy B.M.** *Advanced statistical mechanics*, International series of monographs on physics, Oxford, Oxford University Press, 2010, 640 p.
15. **Deçordi, G.L.** Two coupled qubits interacting with a thermal bath: A comparative study of different models / G.L. Deçordi, A. Vidiella-Barranco // *Optics Communications*. – 2017. – V. 387. – P. 366-376. DOI: 10.1016/j.optcom.2016.10.017.
16. **Cassidy, A.M.** Threshold for chaos and thermalization in one-dimensional mean-field bose-hubbard model / A.M. Cassidy, D. Mason, V. Dunjko, M. Olshaniy // *Physical Review Letters*. – 2009. – V. 102. – I.2. – P. 025302-1-025302-4. DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.025302.
17. **Rigol, M.** Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems / M. Rigol, V. Dunjko, M. Olshaniy // *Nature*. – 2008. – V. 452. – P. 854-858. DOI: 10.1038/nature06838.
18. **Волович, И.В.** О термализации квантовых состояний / И.В. Волович, О.В. Иноземцев // *Труды МИАН РАН*. – 2021. – Т. 313. – С. 285-295. DOI: 10.4213/tm4169.

#### References:

1. Boudreault C., Eleuch C., Hilke M., MacKenzie R. Universal quantum computation with symmetric qubit clusters coupled to an environment, *Physical Review A*, 2022, vol. 106, issue 6, pp. 062610-1-062610-23. DOI: 10.1103/PhysRevA.106.062610.
2. Klimov V.V. Control of the emission of elementary quantum systems using metamaterials and nanometaparticles, *Physics-Uspekhi*, 2021, vol. 64, issue 10, pp. 990–1020. DOI: 10.3367/UFNr.2021.01.038910.
3. Jung P., Ustinov A.V., Anlage S.M. Progress in superconducting metamaterials, *Superconductor Science and Technology*, 2014, vol. 27, no. 7, art. no. 073001, 13 p. DOI: 10.1088/0953-2048/27/7/073001.
4. Forrester D.M., Kusmartsev F.V. Whispering galleries and the control of artificial atoms, *Scientific Reports*, 2016, vol. 6, art. no. 25084, 8 p. DOI: 10.1038/srep25084.
5. Chitambar E., Gour G. Quantum resource theories, *Reviews of Modern Physics*, 2019, vol. 91, issue 2, pp. 025001-1-025001-48. DOI: 10.1103/RevModPhys.91.025001.
6. Rakhmanov A.L., Zagoskin A.M., Savel'ev S., Nori F. Quantum metamaterials: Electromagnetic waves in a Josephson qubit line, *Physical Review B*, 2008, vol. 77, issue 14, pp. 144507-1-144507-7. DOI: 10.1103/PhysRevB.77.144507.
7. Andre E., Tsirulev A.N. Modelirovanie zaputannykh sostoyanij v klasterakh kubitov [Modeling of entangled states in qubit clusters], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov* [*Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*], 2022, issue 14, pp. 143-146. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.342. (In Russian).
8. Tsirulev A.N. A geometric view on quantum tensor networks, *European Physical Journal Web of*

- Conferences*, 2020, vol. 226, art. № 02022, 4 p. DOI: 10.1051/epjconf/202022602022.
9. Nikonov V.V., Tsirulev A.N. Pauli basis formalism in quantum computations, *Mathematical modelling and geometry*, 2020, vol. 8, no. 3, pp. 1-14. DOI: 10.26456/mmg/2020-831.
10. Takeda K., Noiri A., Nakajima T. et al. Quantum tomography of an entangled three-qubit state in silicon, *Nature Nanotechnology*, 2021, vol. 16, pp. 965-969. DOI: 10.1038/s41565-021-00925-0.
11. Menke T., Banner W.P., Bergamaschi T.R. et al. Demonstration of tunable three-body interactions between superconducting qubits, *Physical Review Letters*, 2022, vol. 129, issue 22, pp. 220501-1-220501-6. DOI: 10.1103/PhysRevLett.129.220501.
12. Kim M., Song Y., Kim J., Ahn J. Quantum-Ising Hamiltonian programming in trio, quartet, and sextet qubit systems, *PRX Quantum*, 2020, vol. 1, issue 2, pp. 020323-1-020323-9. DOI: 10.1103/PRXQuantum.1.020323.
13. Briegel H.J., Raussendorf R. Persistent entanglement in arrays of interacting particles, *Physical Review Letters*. 2001, vol. 86, issue 5, pp. 910-915. DOI: 10.1103/PhysRevLett.86.910.
14. McCoy B.M. *Advanced statistical mechanics*, International series of monographs on physics, Oxford: Oxford University Press, 2010, 640 p.
15. Deçordi G.L., Vidiella-Barranco A. Two coupled qubits interacting with a thermal bath: A comparative study of different models, *Optics Communications*, 2017, vol. 387, pp. 366-376. DOI: 10.1016/j.optcom.2016.10.017.
16. Cassidy A.M., Mason D., Dunjko V., Olshani M. Threshold for chaos and thermalization in one-dimensional mean-field Bose-Hubbard model, *Physical Review Letters*, 2009, vol. 102, issue 2, pp. 025302-1-025302-4. DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.025302.
17. Rigol M., Dunjko V., Olshani M. Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems, *Nature*, 2008, vol. 452, pp. 854-858. DOI: 10.1038/nature06838.
18. Volovich I.V., Inozemcev O.V. On the thermalization hypothesis of quantum states, *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics*, 2021, vol. 313, issue 1, pp. 268-278. DOI: 10.1134/S0081543821020255.

*Original paper*

### MODEL OF A THREE-QUBIT CLUSTER IN A THERMAL BATH

E. Andre<sup>1,2</sup>, A.N. Tsirulev<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Faculty of Sciences, Agostinho Neto University, Luana, Angola*

<sup>2</sup>*Tver State University, Tver, Russia*

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.223

**Abstract:** This work studies a mathematical model of a quantum cluster consisting of three qubits and being in thermal equilibrium with the environment. The effective Hamiltonian is invariant under permutations of qubits and consists of two parts. The first part is similar to the Heisenberg XYZ-model with internal two-qubit interaction, while the second includes three-qubit interaction with the thermostat. Such a quantum system admits a fully analytical investigation and is considered in the context of mathematical modeling of quantum metamaterials, in which nanoclusters are elementary structural units with the strong internal interaction of qubits and the relatively weak coupling with the environment. For the Hamiltonian, we construct an orthonormal basis of eigenvectors, which includes the maximally entangled  $W$ -state. We also obtain the density operator of the cluster state in explicit form, and study the temperature dependences of the thermodynamic characteristics of the cluster: the partition function, entropy, and free energy. It is shown that the conditions of thermal equilibrium in this quantum system are satisfied at temperatures from 0,2 K to microkelvins, which correspond to the operating range of modern quantum logic elements and quantum simulators.

**Keywords:** *cluster of qubits, Hamiltonian, Pauli basis, operator exponential, density operator of a state, Gibbs-von Neumann state, partition function, entropy, free energy.*

*Эдуард Андре – аспирант 4 года обучения кафедры прикладной физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», факультет естественных наук университета имени Агостиньо Нето  
Цирулев Александр Николаевич – д.ф.-м.н., профессор кафедры общей математики и математической физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»*

*Eduardo Andre – 4<sup>th</sup> year postgraduate student, Applied Physics Department, Tver State University and of Faculty of Sciences, Agostinho Neto University  
Alexander N. Tsirulev – Dr. Sc., Professor, Department of General Mathematics and Mathematical Physics, Tver State University*

Поступила в редакцию/received: 06.09.2023; после рецензирования/revised: 10.10.2023; принята/accepted: 12.10.2023.