

Research Paper

An Investigation of Entanglement in Helium and Helium-like Atoms¹

Hamdollah Salehi^{*2} and Norallah Binandeh³

Received:2020.01.30

Revised:2020.08.06

Accepted:2021.02.13

Abstract

The entanglement of the helium and helium-like atoms has been studied. The calculations are performed considering the radial wave function as a linear combination of exponential functions and making use of Von Neumann entropy, Linear entropy, and reduced density matrix. The coefficients and powers of the wave function were calculated using the variational method and the energy and entanglement are obtained considering the optimized wave function. The results show that the entanglement tends to increase with increasing energy. The results also show that with increasing atomic number (in helium-like atoms), the electron-electron interaction becomes weaker and as a result, the entanglement decreases.

Keywords: Entanglement Ground State, Helium Atom, Helium-like Atoms, Variational Method.

¹ DOI: 10.22051/ijap.2021.30106.1145

² Associate Professor, Department of physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. (Corresponding Author). Email: salehi_h@scu.ac.ir.

³ M. Sc. in Physics, Department of physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. Email: norallah.binandeh@yahoo.com

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران، دانشگاه الزهرا

سال یازدهم، پیاپی ۲۴، بهار ۱۴۰۰

مقاله پژوهشی

بررسی درهم‌تنیدگی در اتم‌های هلیوم و هلیوم‌گونه^۱

حمدالله صالحی*^۲ و نورالله بیننده^۳

تاریخ دریافت: ۱۳۹۸/۱۱/۱۰

تاریخ بازنگری: ۱۳۹۹/۰۵/۱۶

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۹/۱۱/۲۵

چکیده

در این مقاله، درهم‌تنیدگی حالت پایه اتم هلیوم و برخی اتم‌های هلیوم‌گونه بررسی شده است. محاسبات با در نظر گرفتن تابع موج شعاعی به صورت ترکیب خطی از توابع نمایی و استفاده از آنتروپی فون نیومن و آنتروپی خطی و ماتریس چگالی کاسته انجام شده است. ضرایب و توان‌های این تابع موج را با استفاده از روش وردشی محاسبه کرده و انرژی و درهم‌تنیدگی را با توجه به تابع موج بهینه به دست آورده‌ایم. نتایج نشان‌دهنده آن است که درهم‌تنیدگی با افزایش انرژی تمایل به افزایش دارد. همچنین، نتایج بیانگر آن است که با افزایش عدد اتمی (در اتم‌های هلیوم‌گونه) برهم‌کنش الکترون-الکترون ضعیف‌تر شده و در نتیجه درهم‌تنیدگی کمتر می‌شود.

واژگان کلیدی: درهم‌تنیدگی حالت پایه، اتم هلیوم، اتم‌های هلیوم‌گونه، روش وردشی.

1 DOI: 10.22051/ijap.2021.30106.1145

2 دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران. (نویسنده مسئول). Email: salehi_h@scu.ac.ir

3 دانش آموخته کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.

Email: norallah.binandeh@yahoo.com

۱. مقدمه

درهم‌تنیدگی یکی از ویژگی‌های اصلی مکانیک کوانتومی است که تفاوت اساسی بین فیزیک کلاسیک و کوانتومی را تعیین و مشخص می‌کند. همچنین، یکی از دلایل برتری دستگاه اطلاعات کوانتومی بر دستگاه‌های کلاسیک است و در حال حاضر به‌عنوان منبعی استفاده می‌شود که می‌تواند برای انتقال حالت‌های کوانتومی و توزیع امن رمزنگاری استفاده شود. در این رابطه، بسیاری از سامانه‌های حالت جامد (برای مثال، نقاط کوانتومی) نامزد مناسبی برای استفاده در پردازنده‌های اطلاعات کوانتومی است. در حال حاضر توجه به بررسی درهم‌تنیدگی سامانه‌های بس‌الکترونی، به‌خصوص دوالکترونی، توجه زیادی را به خود جلب کرده است [۱-۳]. درهم‌تنیدگی حالت‌های همدوس برهم‌نهاده اولین بار در مقاله آهارانوف در سال ۱۹۶۷ مطرح شد و تاکنون کاربردهای فراوانی در فرآیندهای اطلاعات کوانتومی پیدا کرده است. این حالت‌ها به‌عنوان یک منبع برای انتقال حالت کوانتومی کاربرد دارد. علاوه بر این‌ها، درهم‌تنیدگی چندذره‌ای از جمله موضوعات مورد علاقه فیزیک‌دانان است. حالت‌های درهم‌تنیده بیانگر نوعی همبستگی کوانتومی غیرموضعی بین زیرسامانه‌ها بوده و شالوده‌ی اساسی برای بسیاری از کاربردهای علوم اطلاعات کوانتومی را فراهم می‌کند، که شامل برنامه‌نویسی متراکم کوانتومی، انتقال حالت کوانتومی، محاسبات کوانتومی و رمزنگاری کوانتومی است [۴-۶]. وقتی دو سامانه فیزیکی با هم برهم‌کنش دارند، همبستگی خاصی که ماهیت کوانتومی دارد، بین آن دو ایجاد می‌شود که حتی وقتی برهم‌کنش را قطع و آن‌ها را از هم جدا کنیم ممکن است این همبستگی بین آن‌ها باقی بماند. این همبستگی غیرموضعی فقط وقتی که حالت کوانتومی کل سامانه درهم‌تنیده باشد اتفاق می‌افتد [۷]. در واقع، اگر یک اندازه‌گیری موضعی بر روی مشاهده‌پذیر اول انجام دهیم می‌توانیم بدون اندازه‌گیری بر سامانه دوم اطلاعاتی را از آن به دست آوریم. در این حالت، می‌گویند این دو سامانه درهم‌تنیده هستند و به چنین خاصیتی درهم‌تنیدگی گفته می‌شود [۸].

در سال‌های اخیر درهم‌تنیدگی اتم‌های هلیوم و هلیوم‌گونه با استفاده از روش‌های وردشی، اختلال و ... بررسی شدند، همچنین خواص این اتم‌ها با در نظر گرفتن توابع موج مختلف از جمله تابع موج نوسانگر هماهنگ و توابع موج شبه گاوسی محاسبه شده‌اند [۶، ۹]. در بررسی درهم‌تنیدگی این نوع از سامانه‌ها، ابتدا باید درهم‌تنیده بودن یا نبودن را با استفاده از معیارهایی نظیر شاهد درهم‌تنیدگی مشخص کرد [۱۰]. به‌طور کلی، این سامانه‌ها دارای درهم‌تنیدگی هستند اما میزان درهم‌تنیدگی برای این اتم‌ها ممکن است متفاوت باشد.

درهم تنیدگی کوانتمی یکی از جالب‌ترین وجه‌های غیر کلاسیک مکانیک کوانتمی است که اساس نظریه اطلاعات کوانتمی را تشکیل می‌دهد. برای مثال، حالت‌هایی که دارای بیشینه درهم تنیدگی هستند، حالت‌های کلیدی برای ترابرد کوانتمی به شمار می‌روند. لذا با توجه به نقشی که حالت‌های درهم تنیده در نظریه اطلاعات کوانتمی ایفا می‌کنند، شناسایی و کمی کردن و تعیین مقدار درهم تنیدگی حالت‌های کوانتمی نیز اهمیت بسزایی دارد. زیرا اگر به درهم تنیدگی به عنوان یک منبع مانند انرژی نگاه کنیم، این مسئله که یک زوج درهم تنیده چه مقدار درهم تنیدگی دارند اهمیت می‌یابد. تاکنون سنج‌های زیادی برای تعیین مقدار درهم تنیدگی آن‌ها معرفی شده است، که از میان آن‌ها می‌توان آنتروپی فون نیومن، ماتریس چگالی کاسته، درهم تنیدگی تشکیل، تلاقی، آنتروپی نسبی درهم تنیدگی و نگاتیویته را نام برد. آنتروپی فون نیومن نسخه مناسبی از درهم تنیدگی برای حالت دویبخشی است [۱۱].

درهم تنیدگی کوانتمی به زبان ساده جفت شدن خواص مکانیکی دو ذره است، ذراتی که پیش‌تر با یکدیگر در اندرکنش بوده و سپس از یکدیگر جدا شده‌اند. درهم تنیدگی برای ذراتی چون فوتون‌ها و الکترون‌ها و حتی ملکول‌ها رخ می‌دهد. این اندرکنش فیزیکی مربوط به خواصی نظیر مکان، تکانه، اسپین، قطبش و... است به گونه‌ای که با تعیین هر یک از خواص برای یکی از دو ذره همان خاصیت در دیگری تعیین می‌شود. به عبارت دیگر، هر یک از ذرات جفت شده به خوبی توسط حالت کوانتمی مشابه توصیف می‌شوند [۱۲].

در این مقاله، ضمن محاسبه پارامترهای وردشی و انرژی، درهم تنیدگی اتم هلیوم و هلیوم گونه را نیز محاسبه کرده‌ایم. اهمیت بررسی این سامانه آن است که از این سامانه در مدل‌سازی نقاط کوانتمی استفاده می‌شود.

۲. توصیف روش

روش وردشی در تقریب ویژه مقادیر انرژی حالت پایه و چند حالت برانگیخته اول سامانه که تنها یک ایده کیفی درباره شکل تابع موج داریم، مفید است. همچنین، این روش را می‌توان در یافتن ویژه مقادیر انرژی و ویژه توابع هامیلتونی مستقل از زمان نیز به کار گرفت. سامانه‌های اتمی دارای دو الکترون و هسته‌های با بار $+Ze$ مانند Li^+ ، Be^{2+} ، B^{3+} را اتم‌های هلیوم گونه می‌گویند. اتم‌های هلیوم و هلیوم گونه، اتم‌های دو الکترونی هستند که دارای هامیلتونی غیر نسبیتی زیر هستند (برحسب واحد اتمی $(e = h = m = 1/4\pi\epsilon_0 = 1)$) [۱۳].

$$H = \frac{1}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{1}{2m_2} \nabla_2^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \rightarrow$$

$$-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{z}{r_1} - \frac{z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{2} p_1^2 + \frac{1}{2} p_2^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (1)$$

که در آن، نویسه‌های ۱ و ۲ برای دو الکترون اتم هلیوم ($Z = 2$) است. در حالت کلی می‌توان گفت که $Z = 2$ نشان‌دهنده بار هسته و p_i تکانه الکترون i ، r_i فاصله الکترون از هسته‌ها و r_{ij} فاصله نسبی بین الکترون‌های i و j است.

اهمیت بررسی این سامانه‌ها آن است که از این سامانه‌ها در مدل‌سازی نقاط کوانتومی استفاده می‌شود. شکل تابع موج تک‌الکترونی را می‌توان به صورت زیر نوشت [۱۴]،

$$u_{nlm}(x) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (2)$$

که در آن، $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ ها، هماهنگ‌های کروی هستند. با نوشتن تابع موج شعاعی به صورت ترکیب خطی از توابع نمایی داریم:

$$R_{nl}(r) = \sum_{i=1}^n c_i \exp^{-\lambda_i r} \quad (3)$$

در این رابطه، λ_i و c_i پارامترهای ورودی هستند. شرط بهنجارش برای تابع موج شعاعی به صورت زیر در می‌آید،

$$\int_0^{\infty} R_{nl}^2(r) r^2 dr = 1 \Rightarrow f(c_k, \lambda_k) = 1 - \sum_{i,j=1}^n c_i c_j \frac{2!}{(\lambda_i + \lambda_j)^3} = 0 \quad (4)$$

تابع موج حالت پایه اتم هلیوم بر حسب توابع موج تک‌الکترونی معادله (۲) به صورت زیر در می‌آید [۱۵]،

$$\Phi(x_1, x_2) = u_{nlm}(x_1) u_{nlm}(x_2) \quad (5)$$

که شرط $\langle \Phi | \Phi \rangle = 1$ در آن برقرار است؛ لذا انرژی حالت پایه اتم هلیوم را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$E = \sum_{i=1}^2 \langle \Phi | -\frac{\nabla_i^2}{2} - \frac{Z}{r_i} | \Phi \rangle + \langle \Phi | \frac{1}{r_{12}} | \Phi \rangle \quad (6)$$

در حالت پایه $Y_{00}(\theta, \varphi) = 1/\sqrt{4\pi}$ ، $1s1s$ می‌باشد. معادله (۶) را به صورت زیر بازنویسی می‌کنیم،

$$\langle \Phi | -\frac{\nabla_i^2}{2} - \frac{Z}{r_i} | \Phi \rangle = \sum_{i,j=1}^n c_i c_j \left(\frac{\lambda_i \lambda_j}{\lambda_i + \lambda_j} - Z \right) \frac{1}{(\lambda_i + \lambda_j)^2} \quad (7)$$

$$\langle \Phi | \frac{1}{r_{12}} | \Phi \rangle = 2 \sum_{i,j,l,m=1}^n \frac{c_i c_j c_l c_m}{(\lambda_j + \lambda_m)^2} \times \left[2 + \frac{3!(\lambda_j + \lambda_m)}{\lambda_j + \lambda_j + \lambda_l + \lambda_m} \right] \frac{1}{(\lambda_j + \lambda_j + \lambda_l + \lambda_m)^3}$$

با توجه به معادلات (۵) تا (۷) داریم:

$$E(c_k, \lambda_k) = \sum_{i,j=1}^n c_i c_j A(\lambda_i, \lambda_j) + \sum_{i,j,l,m=1}^n c_i c_j c_l c_m B(\lambda_i, \lambda_j, \lambda_l, \lambda_m) \quad (8)$$

که در آن،

$$A(\lambda_i, \lambda_j) = 2 \left(\frac{\lambda_i \lambda_j}{\lambda_i + \lambda_j} - Z \right) \frac{1}{(\lambda_i + \lambda_j)^2}$$

$$B(\lambda_i, \lambda_j, \lambda_l, \lambda_m) = \frac{4}{(\lambda_j + \lambda_m)^2} \left[1 + \frac{3(\lambda_j + \lambda_m)}{\lambda_i + \lambda_j + \lambda_l + \lambda_m} \right] \times \frac{1}{(\lambda_i + \lambda_j + \lambda_l + \lambda_m)^3} \quad (9)$$

با داشتن معادله زیر

$$F(c_k, \lambda_k, \eta) = E(c_k, \lambda_k) + \eta f(c_k, \lambda_k) \quad (10)$$

که η ضریب لاگرانژ است، با حل $\frac{\partial F}{\partial c_k} = 0$ می توان نوشت:

$$(11)$$

$$\sum_{i,j=1}^n (\delta_{ik} c_j + c_i \delta_{jk}) (A(\lambda_i, \lambda_j) - \eta D(\lambda_i, \lambda_j)) +$$

$$\sum_{i,j,l,m=1}^n (\delta_{ik} c_j c_l c_m + c_i \delta_{jk} c_l c_m + c_i c_j \delta_{lk} c_m + c_i c_j c_l \delta_{mk}) \times B(\lambda_i, \lambda_j, \lambda_l, \lambda_m) = 0$$

که در آن $D(\lambda_i, \lambda_j) = \frac{2!}{(\lambda_i + \lambda_j)^3}$ می باشد. از حل $\frac{\partial F}{\partial \lambda_k} = 0$ نیز به دست خواهیم

آورد:

$$\sum_{i,j=1}^n c_i c_j \frac{2}{(\lambda_i + \lambda_j)^3} \left[\delta_{ik} \lambda_j + \delta_{jk} \lambda_i + (\delta_{ik} + \delta_{jk})(2z + 3 \frac{\eta - \lambda_i \lambda_j}{\lambda_i + \lambda_j}) \right]$$

$$+ \sum_{i,j,l,m=1}^n c_i c_j c_l c_m \frac{4}{(\lambda_j + \lambda_m)^2 (\lambda_i + \lambda_j + \lambda_l + \lambda_m)^3} \times$$

$$\left\{ \frac{3(\delta_{jk} + \delta_{mk})}{\lambda_i + \lambda_j + \lambda_l + \lambda_m} - \frac{3(\lambda_i + \lambda_j)(\delta_{ik} + \delta_{jk} + \delta_{lk} + \delta_{mk})}{\lambda_i + \lambda_j + \lambda_l + \lambda_m} + \right.$$

$$\left. \left[1 + \frac{3(\lambda_i + \lambda_j)}{\lambda_i + \lambda_j + \lambda_l + \lambda_m} \right] \left[\frac{(-2)(\delta_{jk} + \delta_{mk})}{\lambda_j + \lambda_m} + \frac{(-3)(\delta_{ik} + \delta_{jk} + \delta_{lk} + \delta_{mk})}{\lambda_i + \lambda_j + \lambda_l + \lambda_m} \right] \right\} \quad (12)$$

و از حل $\frac{\partial F}{\partial \eta} = 0$ نتیجه می‌شود:

$$f(c_k, \lambda_k) = 0 \quad (13)$$

که همان معادله (۴) است.

۳. درهم‌تنیدگی

برای محاسبه درهم‌تنیدگی برای اتم هلیوم و برخی اتم‌های هلیوم گونه از آنتروپی فون نیومن و آنتروپی خطی استفاده می‌شود. آنتروپی فون نیومن را می‌توان به صورت زیر نوشت [۱۶]:

$$S_{VN} = -\text{Tr}(\rho \ln \rho) \quad (14)$$

با پیشینه آنتروپی برابر با $\ln 2$ در یک تراز دوتایی یا برای یک سامانه دودره ای.

درهم‌تنیدگی در حالت خالص معمولاً با آنتروپی ون- نیومن ماتریس چگالی کاهش یافته یا آنتروپی خطی تعیین می‌شود. بنابراین می‌توان معادله (۱۴) را به شکل زیر هم نوشت:

$$S_{VN} = -c \text{Tr}(\rho \ln \rho) = -\text{Tr}(\rho \log_2 \rho) \quad (15)$$

که در آن P ماتریس چگالی و $c = 1 / \ln(2)$ است. آنتروپی خطی به صورت زیر نیز تعریف می‌شود [۱۷].

$$S_L = 1 - \text{Tr}(\rho^2) \quad (16)$$

که می‌تواند به عنوان یک تقریب برای آنتروپی ون نیومن در نظر گرفته شود.

$$S_L = \text{Tr}(\rho(1-\rho)) = \text{Tr}(\rho - \rho^2) = \text{Tr}(\rho) - \text{Tr}(\rho^2) = 1 - \text{Tr}(\rho^2) \quad (17)$$

حال با جایگذاری P با P_{red} که در آن P_{red} ماتریس چگالی کاهش یافته یک ذره است.

لذا می توان برای محاسبه درهم تنیدگی اتم هلیوم و برخی اتم های هلیوم گونه از سنجشگر زیر استفاده نمود [۱۸]:

$$Q = 1 - 2\text{Tr}\rho_{\text{red}}^2 \quad (18)$$

که در آن عملگر چگالی کاهش یافته به صورت زیر است:

$$\rho_{\text{red}} = \int [\Psi(r_1, r_2)]^* \Psi(r_2, r_1) dr' \quad (19)$$

لذا می توان نوشت:

$$\rho_{\text{red}}^2(r_1, r_1) = \int \rho_{\text{red}}(r_1, r_2) \rho_{\text{red}}(r_2, r_1) dr_2 \quad (20)$$

با استفاده از معادلات (۱۹) و (۲۰) در نهایت می توان نوشت:

$$\begin{aligned} \text{Tr}\rho_{\text{red}}^2 &= \iint \rho_{\text{red}}(r_1, r_2) \rho_{\text{red}}(r_2, r_1) dr_2 dr_1 = \\ & \iint \left[\int \Psi^*(r_1, r_3) \Psi(r_2, r_3) dr_3 \right] \left[\int \Psi^*(r_2, r_4) \Psi(r_1, r_4) dr_4 \right] dr_1 dr_2 \\ &= \iiint \int \Psi^*(r_1, r_3) \Psi(r_2, r_3) \Psi^*(r_2, r_4) \Psi(r_1, r_4) dr_1 dr_2 dr_3 dr_4 \end{aligned} \quad (21)$$

جدول ۱ انرژی حالت پایه محاسبه شده برای اتم هلیوم.

n	۱	۲	۳
E	-۲/۸۴۷۶۵۶۵	-۲/۸۶۱۶۷۳	-۲/۸۶۱۶۷۳
c ₁	۴/۳۸۴۲۵۴	۲/۹۵۲۵۲۹	۰/۹۰۰۱۸
c ₂	-	۱/۷۹۹۳۱۱	۲/۹۵۲۱۰۷
c ₃	-	-	۰/۸۹۹۷۲۴
λ ₁	۱/۶۸۷۵۰۰	۱/۴۵۲۹۶۵	۲/۸۸۴۱۵۵
λ ₂	-	۲/۹۰۶۲۴۸	۱/۴۵۲۹۲۲
λ ₃	-	-	۲/۹۲۷۸۶۹
η	-۱/۷۹۲۶۹۶	-۱/۸۳۵۸۶۶	-۱/۸۳۵۸۶۶

برای اتم های Li^+ و Be^{2+} و B^{3+} به ازای $n=1$ و $n=2$ محاسبات انجام شده است و به ترتیب در جدول های (۲) و (۳) همراه با پارامترهای وردشی و انرژی مربوط به آن آمده است.

جدول ۲ انرژی محاسبه‌شده برای برخی اتم‌های هلیوم گونه به ازای $n = 1$.

	Li^+	Be^{2+}	B^{3+}
E	-۷/۲۲۲۶۵۶	-۱۳/۵۹۷۶۵۶	-۲۱/۹۷۲۶۵۶
c_1	۸/۸۱۱۵۵۸	۱۴/۱۶۲۱۱۳	۲۰/۲۹۷۴۷۰
λ_1	۲/۶۸۷۵۰۰	۳/۶۸۷۵۰۰	۴/۶۸۷۵۰۰
η	-۵/۵۴۲۹۶۹	-۱۱/۲۹۲۹۷۰	-۱۹/۰۴۲۶۹۶

جدول ۳ انرژی محاسبه‌شده برای برخی اتم‌های هلیوم گونه به ازای $n = 2$.

	Li^+	Be^{2+}	B^{3+}
E	-۷/۲۳۶۴۱۴	-۱۳/۶۱۱۲۹۸	-۲۱/۹۸۶۲۳۳
c_1	۲/۴۶۰۶۹۵	۳/۰۰۶۹۳۴	۳/۴۸۰۱۸۱
c_2	۶/۸۱۱۳۹۵	۱۱/۶۹۲۶۸۳	۱۷/۴۲۲۰۰۵
λ_1	۴/۵۷۵۵۲۲	۶/۲۴۰۰۶۲	۷/۹۰۲۶۸۳
λ_2	۲/۴۴۷۹۴۷	۳/۴۴۵۱۲۸	۴/۴۴۳۳۳۴
η	-۵/۵۸۴۷۱۶	-۱۱/۳۳۴۲۲۴	-۱۹/۰۸۳۹۵۱

مقادیر به دست آمده برای درهم‌تنیدگی حالت پایه را در جدول‌های (۴) تا (۶) برای اتم هلیوم و برخی اتم‌های هلیوم گونه آورده‌ایم.

جدول ۴ درهم‌تنیدگی حالت پایه هلیوم.

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$
درهم‌تنیدگی	۰/۹۱۵۶۱۶	۰/۸۹۶۴۵۵	۰/۸۹۶۴۵۴

نتایج این جدول نشان می‌دهد با افزایش عدد کوانتومی، درهم‌تنیدگی تمایل به کاهش یافتن دارد.

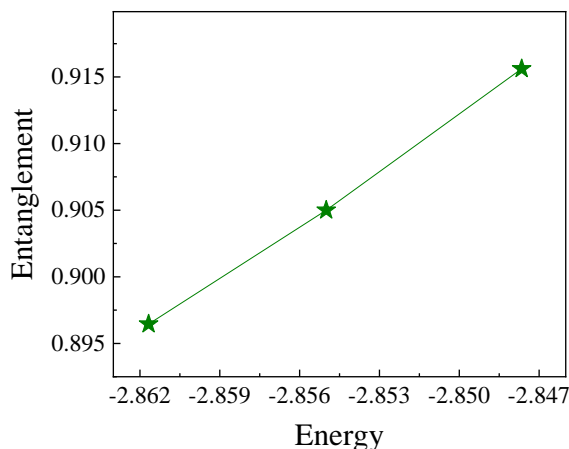
جدول ۵ درهم‌تنیدگی حالت پایه برخی اتم‌های هلیوم گونه به ازای $n = 1$.

پارامتر محاسباتی	n	Li^+	Be^{2+}	B^{3+}
درهم‌تنیدگی	۱	۰/۹۹۹۴۲۱	۰/۹۹۸۹۰۹	۰/۹۹۸۱۲۳۸

جدول ۶ درهم‌تنیدگی حالت پایه برخی اتم‌های هلیوم گونه به ازای $n = 2$.

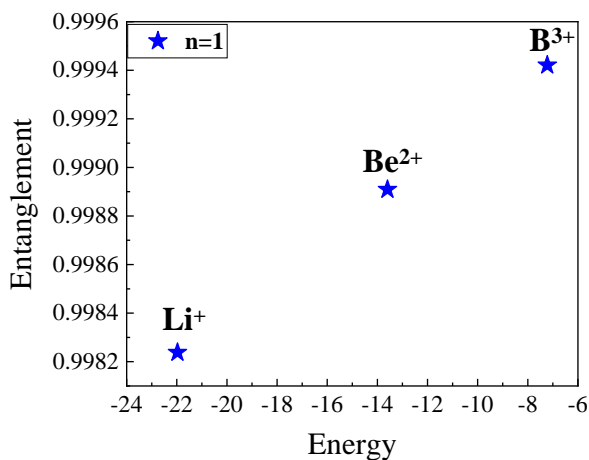
پارامتر محاسباتی	n	Li^+	Be^{2+}	B^{3+}
درهم‌تنیدگی	۲	۰/۹۸۳۳۵۲	۰/۹۸۳۱۱۰	۰/۹۸۲۵۳۲

داده‌های جدول‌های (۵) و (۶) بیانگر آن است که با افزایش عدد اتمی، درهم‌تنیدگی کاهش می‌یابد و با نتایج موجود در مرجع [۱۹] سازگاری دارد. نمودار درهم‌تنیدگی بر حسب انرژی برای حالت پایه اتم هلیوم در شکل (۱) نشان داده شده است.

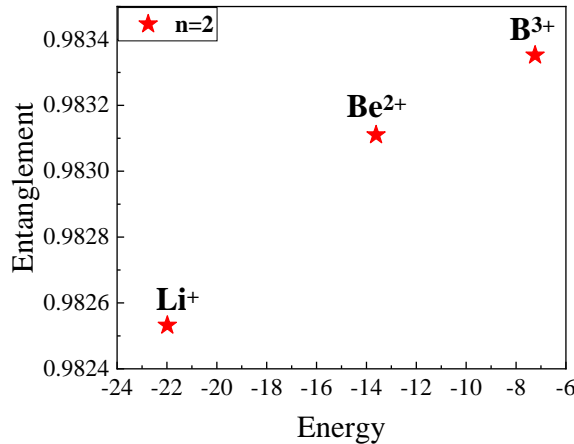


شکل ۱ درهم‌تنیدگی (بدون بعد) حالت پایه اتم هلیوم بر حسب انرژی (هارتری).

نمودار درهم‌تنیدگی اتم‌های هلیوم گونه بر حسب انرژی برای $n = 1$ و $n = 2$ به ترتیب در شکل‌های (۲) و (۳) نشان داده شده است. این نمودارها بیانگر افزایش درهم‌تنیدگی با افزایش انرژی است یعنی درهم‌تنیدگی با انرژی رابطه مستقیم دارد. علاوه بر این، افزایش در حالت پایه اتم هلیوم محسوس تر است. حالت‌های برانگیخته تمایل به نشان دادن درهم‌تنیدگی بیشتر دارند.



شکل ۲ درهم‌تنیدگی حالت پایه اتم‌های هلیوم گونه بر حسب انرژی (هارتری) برای $n = 1$.



شکل ۳ درهم‌تنیدگی (بدون بعد) حالت پایه اتم‌های هلیوم گونه بر حسب انرژی (هاتری) برای $n = 2$.

۴. نتیجه گیری

در این مقاله، محاسبه درهم‌تنیدگی اتم هلیوم و اتم‌های هلیوم گونه با استفاده از روش وردشی انجام شد. نتایج بیانگر آن است که درهم‌تنیدگی با افزایش انرژی، افزایش می‌یابد و این افزایش در حالت پایه اتم هلیوم محسوس‌تر است. همچنین درهم‌تنیدگی با افزایش عدد کوانتمی اصلی تمایل به کاهش یافتن دارد. در واقع، وقتی که عدد کوانتمی اصلی افزایش می‌یابد، برهم‌کنش الکترون-الکترون ضعیف‌تر می‌شود و در نتیجه درهم‌تنیدگی کمتر می‌شود.

۵. تقدیر و تشکر

این تحقیق توسط دانشگاه شهید چمران اهواز؛ ایران [SCU.SP^{۹۸}, ۴۹۰] پشتیبانی شد.

منابع

- [1] Kosciak, P., and H. Hassanabadi, "Entanglement in Hooke's law atoms: an effect of the dimensionality of the space", *Few-Body Systems* 52,189-192(2012).
- [2] Pipek, J., and I. Nagy, "Measures of spatial entanglement in a two-electron model atom", *Phys. Rev. A* 79, 052501 (2009).
- [3] Crandall R., R. Whitnell, and R. Bettgea, "Exactly soluble two-electron atomic model", *Am. J. Phys* 52,438-442 (1984).
- [4] Ludena, Eduardo V., *et al.* "Exact analytic total energy functional for Hooke's atom generated by local-scaling transformations", *International journal of quantum chemistry* 99, 297-307 (2004).
- [5] Taut, M., "Two electrons in an external oscillator potential: Particular analytic solutions of a Coulomb correlation problem", *Phys. Rev. A* 48, 3561 (1993).
- [6] Coe, J. P., A. Sudbery, and I. D'amico, "Entanglement and density-functional theory: Testing approximations on Hooke's atom", *Phys. Rev. B* 77, 205122, (2008).
- [7] Huang Z., Wang H., and Kais S., "Entanglement and electron correlation in quantum chemistry calculations, *Journal of Modern Optics*", 53, 2543-2558 (2006).

- [8] Valerie C., Kundu J., and Wootters K., "Distributed entanglement", Phys. Rev. A61.5,052306 (2000).
- [9] Moshinsky, M., "How Good is the Hartree-Fock Approximation", Am. J. Phys. 36, 763-763 (1968).
- [10] Man-Hong, Y., "Quantum Entanglement in Many-body Systems", Term essay for the course Physics 598: Emergent States of Matter, Fall 2004. Instructor, (2004).
- [11] Riera Graells, A., "Entanglement in many body quantum systems", Universitat de Barcelona, (2010).
- [12] Cirac, J. I., "Entanglement in many-body quantum systems", arXiv preprint arXiv: 1205.3742(2012).
- [13] Wang T. J., Song S. Y., Long G. L., "Quantum repeater based on spatial entanglement of photons and quantum-dot spins in optical microcavities", Phys. Rev. A 85, 062311 (2012).
- [14] Manzano, D., A. Plastino, J. Dehesa, and T. Koga, "Quantum entanglement in two-electron atomic models", Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical 43.27, 275301(2010).
- [15] Lin, Yen-Chang, Chih-Yuan Lin, and Yew Kam Ho, "Spatial entanglement in two-electron atomic systems", Phys. Rev. A 87, 022316 (2013).
- [16] Kosciuk, P., and A. Okopinska, "Entanglement entropies in the ground states of helium-like atoms", Few-Body Systems 55, 1151-1157(2014).
- [17] Lin. C. H., Y. C. Lin, Y. K. Ho, "Quantification of linear entropy for quantum entanglement in He, H and Ps ions using highly-correlated Hylleraas functions", Few-Body Systems, 54, 2147-2153(2013).
- [18] Lin, C.-H. and Y. K. Ho, "Quantification of entanglement entropy in helium by the Schmidt-Slater decomposition method", Few-Body Systems 55, 1141-1149(2014).