

## بررسی اثر پتانسیل بر روی درهم‌تنیدگی با استفاده از نظریه تابعی چگالی

مائده غریب ناصری، حمدالله صالحی\*؛

دانشگاه شهید چمران اهواز، گروه فیزیک

دریافت ۹۳/۵/۲۵ پذیرش ۹۵/۱/۲۵

### چکیده:

درهم‌تنیدگی، یکی از ویژگی‌های اصلی مکانیک کوانتومی است که می‌تواند برای انتقال حالات کوانتومی استفاده شود. در این رابطه بسیاری از سیستم‌های حالت جامد (به عنوان مثال نقاط کوانتومی) می‌توانند به عنوان پردازنده‌های اطلاعات کوانتومی استفاده شوند. با این حال، مدل‌سازی حالت جامد از سیستم‌های بس‌ذره‌ای دقیق اغلب محاسباتی سخت دارد، از این رو از تقریب استفاده می‌شود. در این کار روش محاسبه درهم‌تنیدگی حالت پایه سیستم‌های بس‌ذره‌ای را با استفاده از نظریه تابعی چگالی مطرح می‌کنیم، به همین منظور ابتدا چگالی بارالکتريکی را محاسبه و سپس درهم‌تنیدگی‌های مورد نظر را با محاسبه آنتروپی خطی بررسی می‌کنیم. سیستم مورد بررسی اتم هوک است که پس از محاسبه چگالی بارالکتريکی این سیستم به ازای فرکانس‌های مختلف، تغییرات درهم‌تنیدگی این سیستم را با فرکانس به دست آوردیم. نتایج نشان‌دهنده آن است که با کاهش فرکانس در مدل اتم هوک با توجه به کاهش پتانسیل، درهم‌تنیدگی نیز کاهش می‌یابد.

**واژگان کلیدی:** درهم‌تنیدگی کوانتومی، نظریه تابعی چگالی، آنتروپی خطی، چگالی بار الکترونی

### مقدمه:

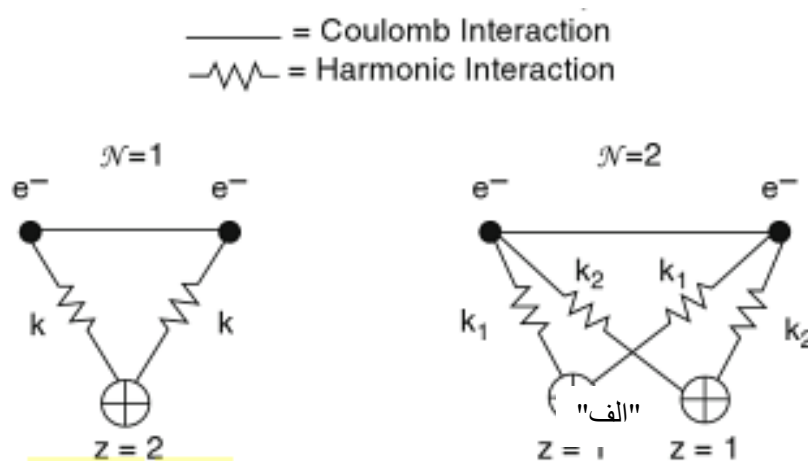
درهم‌تنیدگی، یکی از ویژگی‌های اصلی مکانیک کوانتومی است. هم‌چنین یکی از دلایل برتری دستگاه اطلاعات کوانتومی نسبت به دستگاه‌های کلاسیک است. در این رابطه بسیاری از سیستم‌های حالت جامد می‌توانند به عنوان پردازنده‌های اطلاعات کوانتومی استفاده شوند. لذا با توجه به محاسبات پیچیده سیستم‌های بس‌ذره‌ای دقیق، از تقریب استفاده می‌شود. یکی از روش‌های کارآمد نظریه تابعی چگالی (DFT) است که در آن خواص حالت پایه را می‌توان محاسبه کرد. با توجه به این‌که پتانسیل همبستگی-تبادلی در نظریه تابعی چگالی؛ تابعی ناشناخته از چگالی است، لذا از تقریب استفاده می‌کنیم. هم‌چنین با توجه به درهم‌تنیدگی حالت پایه، انتظار می‌رود که رابطه‌ای بین نظریه تابعی چگالی و درهم‌تنیدگی وجود داشته باشد. در این‌جا درهم‌تنیدگی ایجاد شده توسط درجه آزادی فضایی را در نظر گرفته و از اتم هوک به عنوان یک سیستم آزمایشی استفاده می‌کنیم. لذا درهم‌تنیدگی‌های خود را با محاسبه آنتروپی خطی محاسبه می‌کنیم. برای محاسبه درهم‌تنیدگی، لازم است؛ تابع موج برهم‌کنشی؛ به طور مناسب درون DFT تعریف شود. می‌خواهیم ببینیم چگونه این تقریب درهم‌تنیدگی سیستم را ایجاد می‌کند. درهم‌تنیدگی کوانتومی جفت شدن خواص مکانیکی دو ذره است؛ ذراتی که پس از اندرکنش، از یک‌دیگر جدا شده‌اند. درهم‌تنیدگی برای ذراتی هم‌چون فوتون‌ها، الکترون‌ها و حتی ملکول‌ها رخ می‌دهد. این اندرکنش فیزیکی مربوط به خواص نظیر مکان، اندازه حرکت، اسپین، قطبش و... است به گونه‌ای که با تعیین هر یک از خواص برای یکی از دو ذره همان خاصیت در دیگری تعیین می‌شود [۱].

امروزه موادی هم‌چون آرسنیک ایندیوم، گالیم آرسنید، سولفیدروی، سولفیدسرب، فسفات ایندیوم، تلوریدکادمیوم، سولفوریدکادمیوم، سیلیکون (نیم‌رسانای به‌کار رفته در ساخت مدارهای الکترونیکی) به‌عنوان نقاط کوانتومی که می‌توانند دارای خاصیت درهم‌تنیدگی باشند شناخته شده‌اند [۳؛۲].

در سال ۲۰۰۴ آتری و همکارانش با در نظر گرفتن دو مدل در اتم هوک با پتانسیل هماهنگ به بررسی تغییرات آنروپی اطلاعات با پتانسیل پرداخته‌اند [۴]. هم‌چنین در سال ۲۰۰۵ هانگ و همکارانش درهم‌تنیدگی برای ملکول هیدروژن را در مقاله‌ای با عنوان "درهم‌تنیدگی به‌عنوان اندازه‌گیری همبستگی الکترون- الکترون در محاسبات کوانتومی شیمی" محاسبه و تغییرات آنروپی ون- نیومن را بر حسب فاصله دو الکترون با مقادیر مختلف میدان مغناطیسی بررسی کردند [۵]. در سال ۲۰۰۷ درهم‌تنیدگی نقاط کوانتومی GaAs و CdSe با استفاده از دو روش حل تحلیلی دقیق و نظریه تابعی چگالی توسط کوو و همکارانش بررسی شد. در این تحقیق با محاسبه آنروپی خطی برای این دو ماده، تغییرات آنروپی بر حسب فاصله نقاط کوانتومی این مواد بررسی شده است [۶].

### توصیف روش و نتایج

سیستمی که در این‌جا بررسی می‌شود اتم هوک است و طرح آن در شکل (۱) نشان داده شده است [۷].



شکل ۱. تفاوت "الف" اتم هوک و "ب" ملکول هوک

اهمیت بررسی این سیستم به دلیل استفاده از این سیستم در مدل‌سازی نقاط کوانتومی یک‌بعدی است. هم‌چنین این سیستم برای توصیف نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان نیز مورد استفاده قرار می‌گیرد. دلیل انتخاب این سیستم این است که می‌توان آن را به طور دقیق حل کرد. در واحد اتمی ( $e = \hbar = m = 1/4\pi\epsilon_0 = 1$ ) هامیلتونی دو الکترون محصور شده با پتانسیل هماهنگ به صورت زیر است [۸].

$$H = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 + \frac{1}{2}\omega^2 r_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 + \frac{1}{2}\omega^2 r_2^2 + \frac{Z}{|r_1 - r_2|} \quad (1)$$

که در آن  $\omega$  فرکانس مشخصه پتانسیل محصورکننده است. در این سیستم برهم‌کنش الکترون- الکترون کامل است. می‌توان معادله (۱) را به صورت زیر بازنویسی کرد.

$$H = -\nabla_r^2 + \frac{1}{4}\omega^2 r^2 + \frac{Z}{r} - \frac{1}{4}\nabla_R^2 + \omega^2 R^2 \equiv H_r + H_R \quad (2)$$

که در آن  $H_r$  (مربوط به حرکت نسبی) و  $H_R$  (مربوط به مختصات مرکز جرم) هستند. جواب معادله (۲) به صورت زیر است [۶]:

$$\psi(r, R) = \varphi(r)\xi(R) \quad (3)$$

$$= (r^l e^{-\frac{r^2}{8(l+1)}}) \times \left[ 1 + \frac{r}{2(l+1)} \right] \left( \frac{1}{4(l+1)} \right)^{\frac{l+1}{2}} Y_{lm}(r) (e^{-\omega R^2})$$

$$E = \varepsilon + \eta = \frac{3}{2}\omega + \frac{5}{2}\omega = 4\omega \quad (4)$$

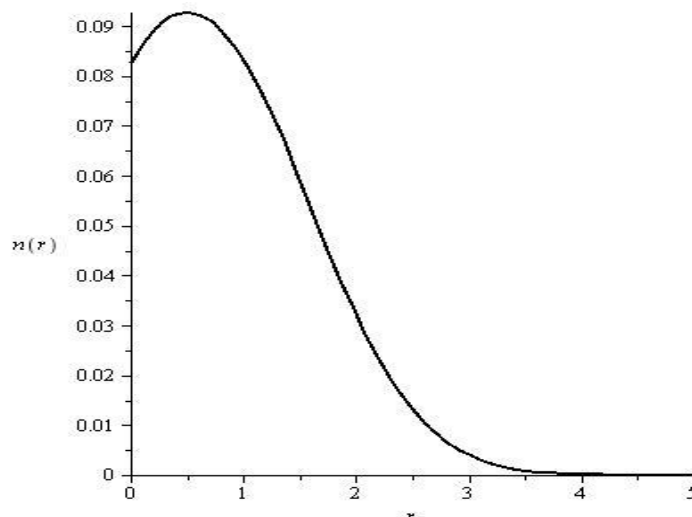
با داشتن  $\psi(r, R)$  از فرمول زیر برای به دست آوردن چگالی بار استفاده می‌کنیم.

$$n(r) = 2 \int |\varphi(r')|^2 \left| \xi\left(r + \frac{r'}{2}\right) \right|^2 d^3 r' \quad (5)$$

برای حل انتگرال (۵) باید مقداری برای  $l$  تعیین کنیم حل عددی چگالی بار برحسب فاصله  $r$  برای  $\omega = 0.5$  به صورت زیر به دست می‌آید:

$$n(r) = \frac{1}{8\pi(-8+5\pi)} \left( (-6re^{-\frac{1}{2}r^2} + r^2\sqrt{\pi}\sqrt{2} \operatorname{erf}\left(\frac{1}{2}\sqrt{2}r\right) + 16e^{-\frac{1}{2}r^2} \right. \\ \left. + 7\sqrt{\pi}\sqrt{2} \operatorname{erf}\left(\frac{1}{2}\sqrt{2}r\right) + 4r\sqrt{\pi}\sqrt{2} \operatorname{erf}\left(\frac{1}{2}\sqrt{2}r\right) \right) e^{-\frac{1}{2}r^2} \quad (6)$$

نمودار چگالی بار الکتریکی برحسب فاصله برای  $\omega = 0.5$  رسم و در شکل (۲) نشان داده شده است.



شکل ۲. تغییرات چگالی بارالکتریکی اتم هوک بر حسب فاصله برای  $\omega = 0.5$

بنا براین با انتخاب  $l$  برابر صفر، تابعیت تابع موج به  $\omega$  و  $r$  را می‌توانیم به صورت زیر بیان نمود:

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \varphi(\mathbf{r})\xi(\mathbf{R}) = \left( e^{-\frac{\omega r^2}{4}} e^{-\omega R^2} \sum a_n \left( \sqrt{\frac{\omega}{2\pi}} \right)^{3/4} \left( \sqrt{\frac{\omega}{2}} r \right)^n \right) \quad (7)$$

با توجه به فرمول (۷) اکنون می‌توان چگالی بارالکتریکی را به ازای فرکانس‌های مختلف که در واقع هر فرکانس مربوط به یک ماده خاص است، محاسبه نمود.

هم‌چنین انرژی کل اتم هوک را نیز می‌توان به صورت زیر تعیین کرد.

$$E = \frac{1}{2}\omega + \epsilon \quad (8)$$

که در آن  $\epsilon$  از حل معادله (۹) تعیین می‌شود [۹].

$$\frac{\sqrt{2\omega}\Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{\epsilon}{2\omega}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{\epsilon}{2\omega}\right)} = -1 \quad (9)$$

هم‌چنین می‌توان فرکانس هر ماده را با توجه به رابطه زیر و با داشتن جرم مؤثر آن ماده محاسبه کرد [۱۰].

$$\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{m^*\omega}} \quad (10)$$

نظریه تابعی چگالی تمام خواص حالت پایه را نشان می‌دهد، بنابراین درهم‌تنیدگی ممکن است به‌عنوان تابعی از حالت پایه چگالی تک ذره  $n(\Gamma)$  نوشته شود. در این بخش یک نمونه تابع موج در چارچوب نظریه تابعی چگالی تعریف می‌کنیم. لذا درهم‌تنیدگی مربوط به اتم هوک را محاسبه و از تقریب چگالی موضعی برای تقریب پتانسیل همبستگی-تبادلی استفاده می‌کنیم. با توجه به این نکته که معادلات کوهن شم به صورت خودسازگار حل می‌شوند، شروع به

محاسبه چگالی بار الکتریکی در تقریب چگالی موضعی برای اتم هوک می‌کنیم. بدین ترتیب با در نظر گرفتن یک تابع موج اولیه و با استفاده از معادله (۱۱) چگالی بار الکتریکی را محاسبه می‌کنیم.

$$\left( -\frac{1}{2}\nabla^2 + \frac{1}{2}\omega^2 r^2 + v_H + v_{xc}(r; [n]) \right) \phi(r) = \epsilon \phi(r) \quad (11)$$

در این‌جا درهم‌تنیدگی فرمیونی را در نظر می‌گیریم. برای دو الکترون، درهم‌تنیدگی روی اسپین و بخش فضایی از تابع موج پخش شده است. برای این‌کار حالت پایه از این سیستم را در نظر می‌گیریم، به طوری که سهم اسپینی یگانه است و در نتیجه همیشه بیشترین حالت درهم‌تنیدگی را داراست، از این‌رو بردرجه آزادی فضایی تمرکز می‌کنیم (در حالت اسپینی چون دو الکترون دارای اسپین  $\uparrow$  و  $\downarrow$  هستند، با توجه به اصل طرد پائولی فقط در یک حالت می‌توانند قرار بگیرند، پس در نتیجه همیشه حداکثر درهم‌تنیدگی را دارند). اکنون چگونگی تغییرات درهم‌تنیدگی فضایی با پارامترهای سیستم را مورد بررسی قرار می‌دهیم. در این‌جا درهم‌تنیدگی را با استفاده از اندازه‌گیری آنتروپی محاسبه می‌کنیم. آنتروپی خطی ماتریس چگالی کاهش یافته به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۱]

$$L = Tr \rho_{red} - Tr \rho_{red}^2 = 1 - Tr \rho_{red}^2 \quad (12)$$

در این‌جا درهم‌تنیدگی فضایی از الکترون‌ها را در سیستم مورد نظر با استفاده از  $L$  در حالت پیوسته تعیین می‌کنیم، که در آن ماتریس چگالی کاهش یافته با رابطه زیر تعریف می‌شوند [۱۲].

$$\rho_{red}(r_1, r_2) = \int \Psi^*(r_1, r_3) \Psi(r_2, r_3) dr_3 \quad (13)$$

که در آن

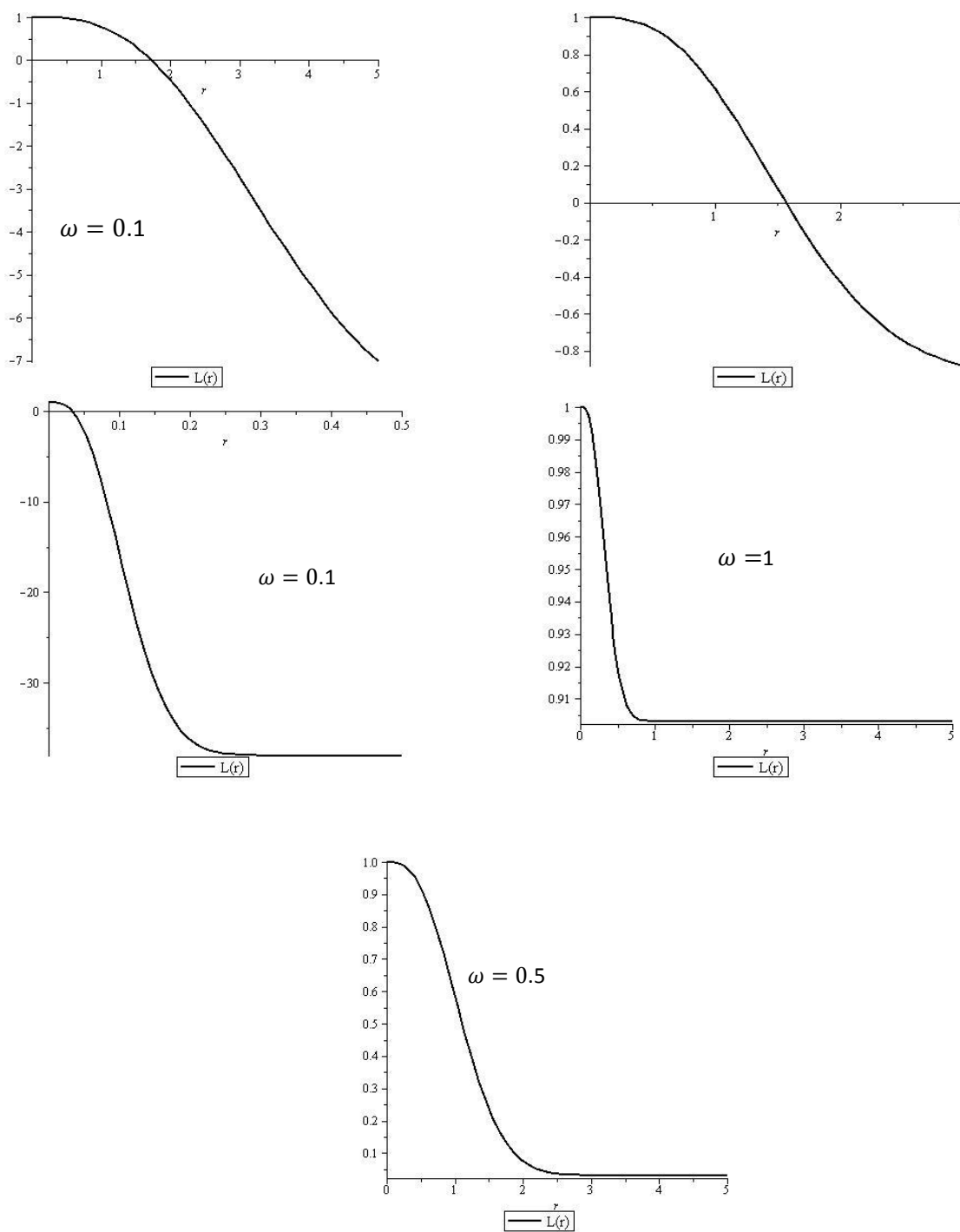
$$\rho_{red}^2(r_1, r_2) = \int \rho_{red}(r_1, r_3) \rho_{red}(r_3, r_2) dr_3 \quad (14)$$

هم‌چنین

$$Tr \rho_{red}^2 = \int \rho_{red}^2(r, r) dr \quad (15)$$

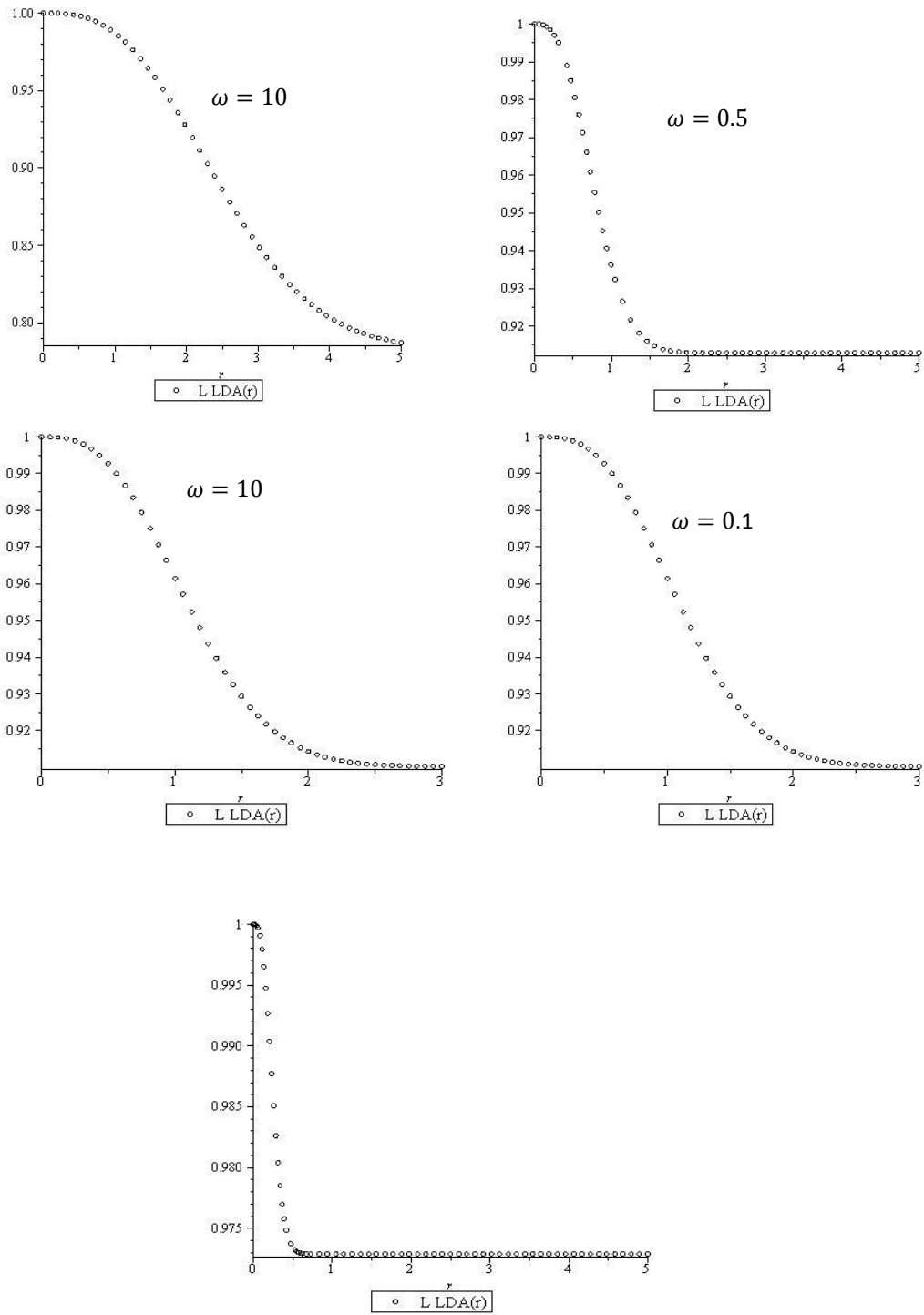
با توجه به تعاریف آنتروپی‌ها، در این‌جا از آنتروپی خطی برای محاسبه درهم‌تنیدگی سیستم مورد نظر (اتم هوک) استفاده می‌کنیم.

با توجه به چگالی‌های بار الکتریکی، در این‌جا به محاسبه و بررسی آنتروپی خطی چگالی‌های بار الکتریکی پرداخته و نتایج را با هم مقایسه می‌کنیم. محاسبه آنتروپی خطی در واقع همان محاسبه درهم‌تنیدگی برای چگالی‌های بار الکتریکی مورد نظر می‌باشد. با توجه به محاسبات چگالی بار الکتریکی، در اینجا نیز برای هر کدام از چگالی‌ها، درهم‌تنیدگی آن محاسبه و تغییرات این آنتروپی‌ها را مورد بررسی قرار داده که نمودارهای آن در شکل (۳) نشان داده شده است.



شکل ۳. تغییرات درهم‌تنیدگی اتم هوک بر حسب  $r$  به ترتیب افزایش فرکانس

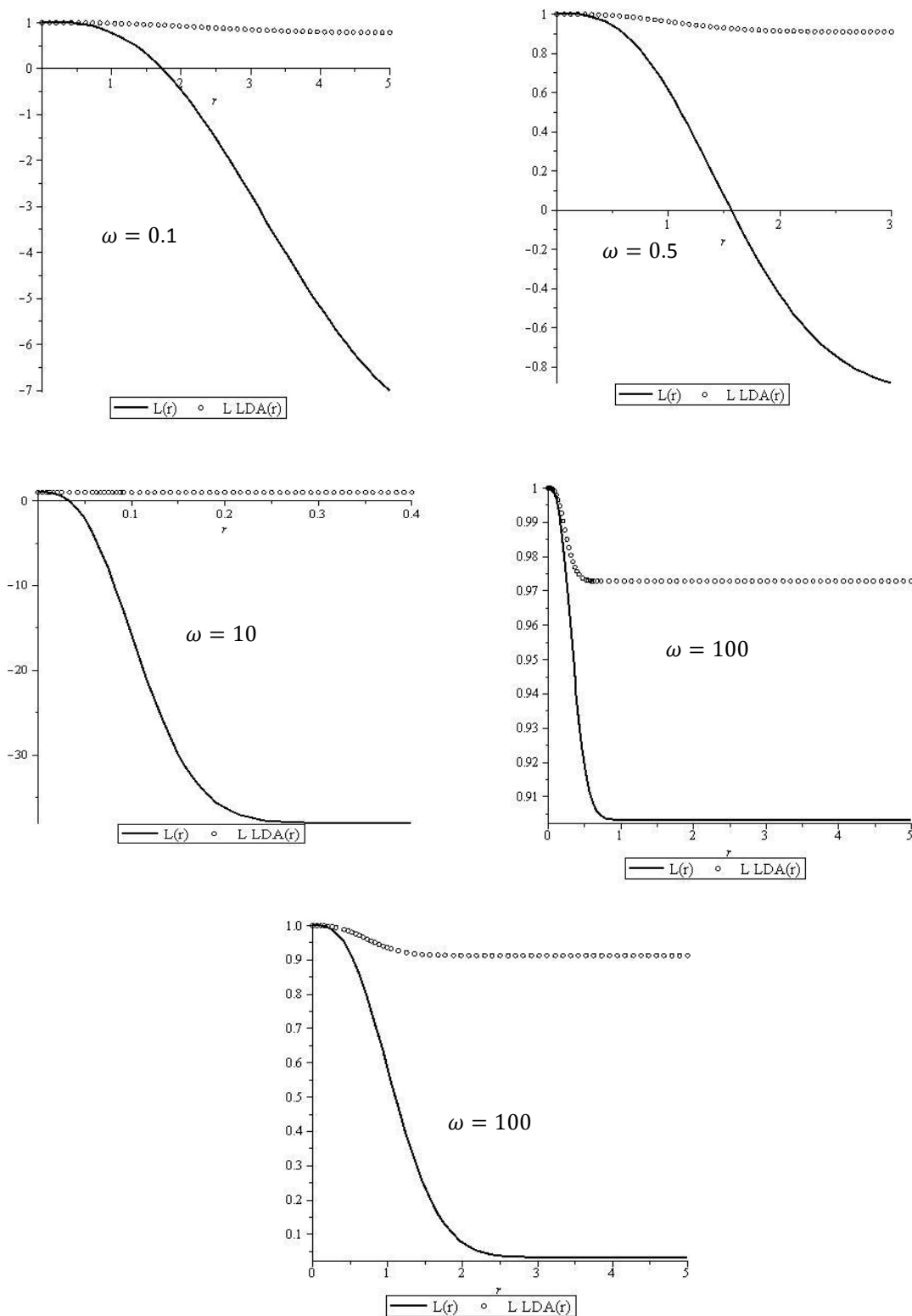
با توجه به شکل (۳) می‌توان نتیجه گرفت که درهم‌تنیدگی با افزایش فرکانس کاهش می‌یابد. در ادامه تغییرات درهم‌تنیدگی برای چگالی LDA اتم هوک نیز محاسبه شده؛ که نمودارهای مربوطه در شکل (۴) نشان داده شده است.



شکل ۴. تغییرات درهم‌تنیدگی چگالی LDA اتم هوک بر حسب  $r$  به ترتیب افزایش فرکانس

همان‌گونه که مشاهده می‌کنید درهم‌تنیدگی چگالی؛ با تقریب چگالی موضعی نیز با افزایش فرکانس شدیداً کاهش پیدا می‌کند. در واقع مشاهده می‌شود که با افزایش فرکانس سطح زیر نمودار به شدت کاهش یافته و بیشینه

درهم‌تنیدگی نیز به صفر می‌رسد. هم‌چنین تغییرات درهم‌تنیدگی هر دو چگالی را نیز با یکدیگر مقایسه کرده‌ایم که نتایج آن در شکل (۵) آورده شده است.



شکل ۵. مقایسه تغییرات درهم‌تنیدگی  $L(r)$  و  $L LDA(r)$  بر حسب  $r$  به ترتیب افزایش فرکانس

همان‌گونه که در نمودارها مشاهده می‌کنید این تقریب نتایج خیلی خوبی برای درهم‌تنیدگی ارائه نمی‌دهد. از این نمودارها نتیجه می‌گیریم که درهم‌تنیدگی با افزایش فرکانس کاهش می‌یابد که این مطلب بیان‌کننده این است که افزایش فرکانس و در نتیجه افزایش پتانسیل، می‌تواند باعث کاهش میزان درهم‌تنیدگی شود. علاوه بر این کاهش میزان درهم‌تنیدگی با افزایش فرکانس با نتایج به دست آمده توسط دیگران سازگاری خوبی دارد [۶،۱۱،۱۳].

### نتیجه‌گیری

در این‌جا به محاسبه و بررسی اثر پتانسیل بر روی درهم‌تنیدگی پرداختیم، بدین صورت که ابتدا یک مدل برای پتانسیل سیستم (اتم هوک) در نظر گرفته و چگالی بار الکتریکی این سیستم را هم به صورت تحلیلی دقیق و نیز با تقریب چگالی موضعی محاسبه کردیم. نتایج چگالی LDA با دقت خوبی با چگالی دقیق اتم هوک سازگار بود. پس از محاسبه چگالی بار الکتریکی به محاسبه درهم‌تنیدگی پرداختیم. درهم‌تنیدگی نیز برای هر دو چگالی محاسبه شد که با توجه به نمودار تغییرات درهم‌تنیدگی برای فرکانس‌های مختلف، می‌توان نتیجه گرفت که با کاهش فرکانس میزان درهم‌تنیدگی (سطح زیر نمودار) افزایش پیدا می‌کند. نتایج بیان‌کننده این مطلب است که چون با کاهش فرکانس پتانسیل نوسانی مربوط به این فرکانس نیز کاهش پیدا می‌کند، پس الکترون‌ها توانایی بیش‌تری برای درهم‌تنیده شدن دارند و در نتیجه میزان درهم‌تنیدگی افزایش می‌یابد. در مقابل با افزایش فرکانس پتانسیل نیز افزایش می‌یابد و در نتیجه الکترون‌ها محصورترند و لذا درهم‌تنیدگی آن‌ها کاهش می‌یابد. با توجه به نتایج حاصله از درهم‌تنیدگی در تقریب چگالی موضعی، نتیجه می‌گیریم که این تقریب علی‌رغم رضایت‌بخش بودن در محاسبه چگالی بار الکتریکی، دقت خوبی برای درهم‌تنیدگی ارائه نمی‌دهد. هم‌چنین کاهش میزان درهم‌تنیدگی با افزایش فرکانس با نتایج به دست آمده توسط دیگران کاملاً سازگار است.

### منابع

1. A. A. VandenBerg, " Time-bin entanglement with a single quantum dot," (2011).
2. A. Das, Y. Ronen, M. Heiblum, D. Mahalu, A. V. Kretinin, H. Shtrikman, "Entangling electrons by splitting Cooper pairs: Two-particle conductance resonance and time coincidence measurements," *Nature Comm.* 3, 1165, (2012).
3. Y. S. Liu, X. F. Yang, H. Chen, " Entanglement of an exciton in a quantum dot molecule in radiation pulses," *Physica E*, 1-5, (2004).
4. R. Atre, C. S. Mohapatra, P. K. Panigrahi, "Information entropy and correlation of the Hooke's Atom," *arXiv:quant-ph*, 1(0411016), (2004)

5. Z. Huang, S. Kais, " Entanglement as measure of electron–electron correlation in quantum chemistry calculations," *Chemical Physics Letters*, 413, pp.1-5, (2005).
6. J. P. Coe, A. Sudbery, I. D'Amico, "Entanglement in GaAs and CdSe quantum dots: Exact calculations and DFT approximations ", *Microelectronics Journal* 40 ,499–501, (2009).
7. L. A. Wu, M. S. Sarandy, D. A. Lidar, L. J. Sham, " Linking entanglement and quantum phase transitions via density functional theory" ,(2007)
8. J. P. Coe, A. Sudbery, I. D. Amico, " Entanglement and density -functional theory: testing approximations on Hooke's atom," *J. Phys.: Conf. Ser.* 254, 012010 (2010)
9. K. Kusakabe, N. Suzuki, S. Yamanaka, K. Yamaguchi, "A self- consistent first- principles calculation scheme for correlated electron systems", (2007).
10. K. C. Lam, F. G. Cruz, K. Burke, "Virial Exchange-Correlation Energy Density in Hooke's Atom", (1998).
11. M. Taut, "Two electrons in external oscillator potential: Particular analytic solutions of a Coulomb correlation problem", *Physical Review A* (1993).
12. W. Sandvik, " Numerical solutions of the schrodinger equation" ,PY 502, *Computational physics*, (2012), 1-26.
13. S. Ivanov, K. Burke, M. Levy, "Exact high-density limit of correlation potential for two electron density, " *Journal of chemical physics*, 110(21), (1999).