

Research Paper

## Investigation of Entanglement in the Moshinsky Atom<sup>1</sup>

Hamdollah Salehi<sup>\*2</sup>, Mehrzad Ashrafpour<sup>3</sup> and  
Hamideh Arimashi<sup>4</sup>

Received: 2021.11.05

Revised: 2022.02.22

Accepted: 2022.05.22

### Abstract

One of the most critical aspects of studying entanglement states is quantifying the degree of entanglement. One of the entanglement measures for pure states is Van- Neumann entropy, which is why Van-Neumann entropy is also called entanglement entropy. In this work, to calculate the entanglement of a three-particle atom called the Moshinsky atom; first, the reduced density matrix was calculated and then using the coordinates of the three particles in the lithium atom, the entropy entanglement was calculated. We obtained the entropy of entanglement in terms of the frequency parameter related to the external coordinate field.

**Keywords:** *Entanglement, Density Functional Theory, Many-body Systems, Moshinsky Atom, Van-Neumann Entropy, Reduced Density Matrix.*

<sup>1</sup> DOI: 10.22051/ijap.2023.38413.1246

<sup>2</sup> Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. (Corresponding Author). Email: salehi\_h@scu.ac.ir.

<sup>3</sup> Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. Email: mehrzadashrafpour@yahoo.com

<sup>4</sup> M. Sc. Student, Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. Email: h.arimashi99@gmail.com

<https://jap.alzahra.ac.ir>



## مقاله پژوهشی

# بررسی درهم‌تنیدگی در اتم موشینسکی<sup>۱</sup>

حمدالله صالحی<sup>۲\*</sup>، مهرزاد اشرف‌پور<sup>۳</sup> و حمیده عربیمشی<sup>۴</sup>

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۰۸/۱۴

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۰/۱۲/۰۳

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۰۳/۰۱

سال سیزدهم، پیاپی ۳۴، پاییز ۱۴۰۲

صفحه ۱۶۲ - ۱۶۰

### چکیده:

یکی از جنبه‌های مهم در مطالعهٔ حالت‌های درهم‌تنیده، کمی کردن میزان درهم‌تنیدگی است. از جمله سنجه‌های درهم‌تنیدگی برای حالت‌های خالص، آنتروپی فون-نیومن است و به همین دلیل آنتروپی فون-نیومن را آنتروپی درهم‌تنیدگی نیز می‌نامند. در کار حاضر به منظور محاسبهٔ درهم‌تنیدگی یک اتم سه ذره‌ای به نام اتم موشینسکی، ابتدا ماتریس چگالی کاهش یافته حساب شده و سپس با استفاده از مختصات سه ذره در اتم لیتیوم، آنتروپی درهم‌تنیدگی سامانه‌ی مورد مطالعه محاسبه و آنتروپی درهم‌تنیدگی را برابر حسب پارامتر بسامد مربوط به میدان هماهنگ خارجی به دست آمد.

**واژگان کلیدی:** درهم‌تنیدگی، نظریه‌ی تابعی چگالی، سامانه‌های بس‌ذره‌ای، اتم موشینسکی، آنتروپی فون-نیومن، ماتریس چگالی کاهش یافته.

<sup>۱</sup> DOI: 10.22051/ijap.2023.38413.1246

\* استاد، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران. (نویسنده مسئول)  
Email: salehi\_h@scu.ac.ir

<sup>۲</sup> استادیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.  
Email: mehrzadashrafpour@yahoo.com

<sup>۳</sup> دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.  
Email: h.arimashi99@gmail.com



## ۱. مقدمه

فیزیک ماده چگال و نظریه‌ی اطلاعات کوانتومی دو شاخه بسیار مهم از فیزیک می‌باشد. این دو شاخه از فیزیک برای سال‌های طولانی به صورت جداگانه بررسی می‌شدند. هدف فیزیکدانان ماده چگال توجیه ویژگی‌های مواد و پیش‌بینی حالت‌های جدیدی از مواد است. در مکانیک کوانتومی نیز بیشتر سامانه‌های بس‌ذره‌ای متشكل از تعداد بسیار زیادی الکترون‌ها و هسته‌های اتمی بررسی می‌شود. مفهوم درهم‌تنیدگی برای اولین بار در سال ۱۹۳۵ در مقاله‌ی معروف EPR<sup>۱</sup> مطرح و همبستگی‌های غیرموضعی بین سامانه‌های کوانتومی را توصیف می‌کند که هیچ همتای کلاسیکی ندارند [۱،۲].

حل معادله‌ی شرودینگر بس‌ذره‌ای کاری دشوار می‌باشد و حل آن برای  $N$  الکترون در محاسبات کلاسیکی بسیار پیچیده است. اگرچه، روشی مهم و قدرتمند وجود دارد که محاسبات کلاسیکی برای سامانه‌های الکترونی بس‌ذره‌ای را با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی ساده می‌نماید. نظریه‌ی تابعی چگالی تنها به یک ویژگی وابسته بوده و از این رو با به کار گرفتن آن به جای استفاده از تابع موج بس‌ذره‌ای برای یافتن ویژگی‌های سامانه‌های بس‌ذره‌ای از جمله درهم‌تنیدگی مفید‌تر خواهد بود. در فرمول‌بندی این نظریه، متغیرهای حالت پایه‌ی سامانه‌ی الکترونی اندرکنشی، تابع چگالی حالت‌پایه تعريف می‌شود. چگالی حالت‌پایه‌ی تابع موج بس‌ذره‌ای، از نظریه‌ی هوهنبرگ-کوهن به دست می‌آید. قضایای هوهنبرگ-کوهن را می‌توان برای تعريف معیار درهم‌تنیدگی بر حسب کمیت‌های فیزیکی، چون مقادیر مورد انتظار مشاهده‌پذیرها به جای پارامترهای هدایت خارجی استفاده کرد [۲].

درهم‌تنیدگی را می‌توان با تقریب‌های ویژه در نظریه‌ی تابعی چگالی جای داد. دقت درهم‌تنیدگی با استفاده از این تقریب‌ها برای الگوسازی مناسب سامانه‌ی الکترونی که ابزاری برای اطلاعات کوانتومی است مهم می‌باشد. بررسی این دقت می‌توان اطلاعات دیگری در مورد یک تقریب و شاید راه‌های آسان‌سازی آن را در اختیار قرار دهد. در نظریه‌ی تابعی چگالی، هر سنجه‌ی درهم‌تنیدگی، تابعی از مقادیر مورد انتظار مشاهده‌پذیرها است. این رویه ارتباط مستقیمی را بین درهم‌تنیدگی و مشتق اثرباری حالت‌پایه‌ی سامانه‌ی کوانتومی نسبت به ضرایب میدان معرفی می‌کند که موجب ارتباط عمیقی بین درهم‌تنیدگی و گذارهای فاز کوانتومی می‌باشد. الگوی پیشنهادی در

<sup>۱</sup> Einstein- Podolsky- Rosen (EPR)

این پژوهش برگرفته از سامانه‌ی چند الکترونی الگوی موشینسکی<sup>۱</sup> در مقاله‌ی "بورویه و همکاران در سال ۲۰۱۳" می‌باشد [۳].

در سال‌های اخیر سامانه‌هایی شامل ذرات اندرکنشی که درون پتانسیل هماهنگ محصور شده‌اند بسیار مورد توجه قرار گرفته است. این سامانه‌ها در فرآیند اطلاعات کوانتمی به کار می‌آیند. در این جا ابتدا برهم‌کنش‌های کوانتمی برای الگوی موشینسکی N ذره‌ای در حالت پایه بررسی می‌شود. این الگوی اتمی تشکیل یافته از برهم‌کنش الکترون-الکترون، با اعمال پتانسیل هماهنگ مشخص می‌شود. سپس به صورت ویژه اتم موشینسکی سه ذره‌ای را در نظر گرفته و درهم‌تنیدگی با استفاده از آنتروپی فون-نیوم و آنتروپی خطی محاسبه می‌شود.

در سال ۲۰۱۰ واینتز<sup>۲</sup> و همکاران؛ ویژگی‌های درهم‌تنیدگی کوانتمی در الگوی دوالکترونی حل پذیر، اتم موشینسکی<sup>۳</sup>، را بررسی نمودند [۴]. در سال ۲۰۱۲ ماجتی<sup>۴</sup> و همکاران ارتباط بین درهم‌تنیدگی، انرژی و تبهگنی ترازها در سامانه‌های دوالکترونی چون هلیوم را مورد مطالعه قراردادند [۵]. لین<sup>۵</sup> و همکاران در سال ۲۰۱۳ درهم‌تنیدگی فضایی در سامانه‌های اتم‌های هلیوم و B-Splin یون‌های هلیوم گونه را با استفاده از توابع موج دوالکترونی معروفی شده توسط پایه‌های بررسی نمودند [۶]. همچنین در سال ۲۰۱۵ ایسکویل و همکاران نشان دادند که برای سامانه‌های هلیم گونه با تغییر Z یک تناظر یک به یک بین درهم‌تنیدگی و انرژی همبستگی وجود دارد [۷]. در همین سال نیز اندازه گیری آنتروپی در هم‌تنیدگی در سامانه‌های بس‌ذره‌ای نیز انجام شده است [۸]. افرون بر این، در سال ۲۰۲۰ درهم‌تنیدگی کوانتمی در اتم‌ها و ملکول‌ها نیز انجام شده است [۹]. بنابر اطلاعات موجود تاکنون درهم‌تنیدگی با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی برای سامانه‌های چند الکترونی در ایران مورد بررسی قرار نگرفته است. از این رو، با توجه به سنجه‌ی مورد استفاده (آنتروپی) در کار پیش‌رو برای بررسی درهم‌تنیدگی اتم موشینسکی تاکنون محاسباتی انجام نگرفته است. همچنین، با استفاده از مختصات سه ذره در اتم لیتیوم، آنتروپی درهم‌تنیدگی سامانه‌ی مورد مطالعه محاسبه و آنتروپی درهم‌تنیدگی را بر حسب پارامتر بسامد مربوط به میدان هماهنگ خارجی را به دست آوردیم.

<sup>1</sup> Moshinesky Atom

<sup>2</sup> R. J. Yanez

<sup>3</sup> Moshinsky atom

<sup>4</sup> A. P. Majtey

<sup>5</sup> Y. C. Lin



اتم موشینسکی با برهمنش هماهنگ ذرات با پتانسیل هماهنگ مشخص می‌گردد و برای تقریب در سامانه‌های حقیقی از آن استفاده می‌شود. همچنین، این الگوی اتمی به عنوان معیاری برای روش‌های تقریبی در سامانه‌های بس‌ذره‌ای به شمار می‌آید. اتم موشینسکی سامانه‌ای است متشکل از ذراتی با همبستگی هماهنگ که به صورت یکسان در پتانسیل هماهنگ همسانگرد خارجی محصور شده‌اند. در کار حاضر، ابتدا اتم موشینسکی و نظریه‌ی تابعی چگالی معرفی شده و سپس توصیفی از تابع موج سامانه بس‌ذره‌ای ارائه می‌شود. در ادامه، درهم‌تنیدگی برای ویژه‌حالاتی اتم موشینسکی محاسبه شده و در بخش آخر نتایج به دست آمده ارائه می‌شود.

## ۲. اتم موشینسکی و نظریه‌ی تابعی چگالی

هامیلتونی کلی یک اتم موشینسکی یک بعدی با سه الکترون داده می‌شود با [۱۰، ۱۱]:

$$H = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) + \frac{1}{2} \omega^2 (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) + \frac{1}{2} \lambda^2 [(x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + (x_3 - x_1)^2] \quad (1)$$

که در آن،  $x_1$ ،  $x_2$  و  $x_3$  مختصات سه ذره،  $\omega$  بسامد طبیعی میدان هماهنگ خارجی و  $\lambda$  بسامد طبیعی میدان هماهنگ متقابل می‌باشد. همچنین، علامت مثبت و منفی به ترتیب در آخرین عبارت نیز بیان کننده‌ی برهمنش جاذبه و دافعه‌ی بین الکترون‌ها است. همچنین، در اینجا از واحدهای اتمی ( $m_e = 1$ .  $h = 1$ ) استفاده شده است.

یکی از جنبه‌های مهم در مطالعه‌ی حالت‌های درهم‌تنیده، کمی کردن میزان درهم‌تنیدگی است. اگر درهم‌تنیدگی به عنوان یک منبع چون انرژی در نظر گرفته شود، مقدار درهم‌تنیدگی یک زوج درهم‌تنیده مهم می‌باشد. در نظریه‌ی اطلاعات کلاسیک برای توزیع احتمال یک متغیر تصادفی، کمیتی به نام آنتروپی شانون معرفی می‌شود. با افزایش بی‌نظمی در سامانه و پراکنده‌تر شدن احتمال، آنتروپی شانون هم بیشتر می‌شود و بیشینه‌ی آن زمانی است که همه‌ی رخدادها با احتمال یکسان رخ دهند. معادل این معیار در نظریه‌ی اطلاعات کوانتومی برای توزیع احتمال یک ماتریس چگالی، آنتروپی فون-نیومن است. آنتروپی فون-نیومن معیاری از درهم‌تنیدگی حالت‌های خالص می‌باشد و بهمین دلیل آنتروپی فون-نیومن را آنتروپی درهم‌تنیدگی نیز می‌نامند. از این‌رو، برای محاسبه‌ی درهم‌تنیدگی می‌توان آنتروپی فون-نیومن را محاسبه کرد. از

این رو، با درنظر گرفتن درهم‌تنیدگی تولید شده توسط درجه‌ی آزادی فضایی، درهم‌تنیدگی حالت پایه‌ی سامانه‌های بس-ذره‌ای با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی بررسی خواهد شد. برای حل درهم‌تنیدگی سامانه‌های بس-ذره‌ای، باید مسئله‌ی اندازه‌گیری درهم‌تنیدگی برای ذرات تمیزناپذیر حل شود. مشکل اصلی در کمی کردن درهم‌تنیدگی ناشی از متقارن بودن یا پادمتقارن بودن تابع موج برای بوزون‌ها و فرمیون‌ها است؛ از این رو، با توجه به آمار ذرات تمیزناپذیر می‌توان بین درهم‌تنیدگی و همبستگی تفاوت قائل شد. کاربرد روش‌های تقریبی برای مطالعه‌ی حالت‌های مانا شامل پیداکردن ویژه‌مقادیر انرژی و ویژه‌تابع هامیلتونی مستقل از زمان است که جواب‌های دقیقی ندارند. همچنین، ارتباط بین برخی ویژگی‌های فیزیکی یک ترکیب از جمله پیوندها را با استفاده از درهم‌تنیدگی توضیح داده و با بررسی یک پتانسیل تبادلی-همبستگی محاسبات انجام و نتایج به دست آمده با دیگر داده‌های موجود مقایسه و تفسیر می‌شود. از این رو، با توجه به این که میزان درهم‌تنیدگی بر اساس معیار آنتروپی مشخص می‌گردد، در این مقاله، آنتروپی فون-نیومن مورد نظر می‌باشد. همچنین، برای حل آن می‌توان از روش حل معادلات شرودینگر در سامانه‌های چند الکترونی و چگالی بار الکتریکی اتم موشینسکی در نظریه‌ی تابعی چگالی استفاده نمود.

نظریه‌ی تابعی چگالی همه‌ی ویژگی‌های حالت پایه را نشان می‌دهد. از این رو، درهم‌تنیدگی ممکن است به عنوان تابعی از حالت پایه‌ی چگالی تک ذره ( $n$ ) نوشته شود. متأسفانه، تابع به صورت صریح و روشن برای بسیاری از ویژگی‌های، از جمله درهم‌تنیدگی، ناشناخته است. با این حال برای این که به توان درهم‌تنیدگی را به عنوان تابعی از تابع موج برهمکنش بیان کرد، درهم‌تنیدگی مربوط به اتم موشینسکی را با استفاده از تقریب چگالی موضعی پتانسیل همبستگی-تبادلی محاسبه می‌شود. درادامه به محاسبات درهم‌تنیدگی اتم موشینسکی پرداخته و نتایج آن ارائه می‌شود.

### ۳. توصیف تابع موج سامانه‌ی بس-ذره‌ای

می‌توان برای توصیف یک سامانه‌ی بس-ذره‌ای، تابع موج سامانه را در معادلات شرودینگر جایگذاری و آن را حل نمود. سپس سامانه، متناسب با تعداد ذرات در نظر گرفته می‌شود. اگرچه این تابع موج معمولاً در برخی از مسائل از جمله بیان درهم‌تنیدگی سامانه‌ی بس-ذره‌ای وامی ماند. هم‌چنین در بسیاری از سنجه‌های درهم‌تنیدگی مانند تلاقی، منفیت و یا آنتروپی فون-نیومن از ماتریس چگالی سامانه استفاده می‌شود. پس این تابع موج بس-ذره‌ای خیلی به کار نمی‌آید [۱۲].



تابع موج سامانه‌ی بس-ذره‌ای به صورت دترمینان اسلیتر فرمول‌بندی می‌شود که به آن عملگر ماتریس چگالی گفته می‌شود و تفسیر فیزیکی روشنی را فراهم می‌نماید. بافرض این که ماتریس چگالی یک سامانه‌ی بس-ذره‌ای مشکل از  $W$  ذره، به صورت  $\Gamma(x_1, x_2, \dots, x_\omega | x'_1, x'_2, \dots, x'_{\omega'})$  در نظر گرفته شود که در آن  $x_1, x_2, \dots, x_\omega$  شامل درجه آزادی اسپین و فضایی ذرات می‌باشند. حال برای محاسبه‌ی ماتریس چگالی، دترمینان بر اساس ماتریس چگالی تک‌ذره به صورت زیر نوشته می‌شود [۱۳، ۱۴].

$$\Gamma(x_1, x_2, \dots, x_\omega | x'_1, x'_2, \dots, x'_{\omega'}) = \frac{1}{\omega!} \begin{vmatrix} \rho(x_1, x'_1) & \rho(x_1, x'_2) & \dots & \rho(x_1, x'_{\omega'}) \\ \rho(x_2, x'_1) & \rho(x_2, x'_2) & \dots & \rho(x_2, x'_{\omega'}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho(x_\omega, x'_1) & \rho(x_\omega, x'_2) & \dots & \rho(x_\omega, x'_{\omega'}) \end{vmatrix} \quad (2)$$

که در آن،  $\rho(x_i, x_j) = \rho^*(x_j, x_i)$  ماتریس چگالی کاهش‌یافته‌ی تک‌ذره بوده و هر میتی می‌باشد. رابطه‌ی ماتریس چگالی کاهش‌یافته‌ی تک‌ذره را می‌توان به صورت زیر نوشت:  $\rho_1 = Tr_{23}(|\psi\rangle\langle\psi|)$

حال برای محاسبه‌ی عناصر ماتریسی  $\rho_1$  به صورت زیر عمل می‌شود.

$$\langle r_1 | \rho_1 | r'_1 \rangle = \langle r_1 | Tr_{23}(|\psi\rangle\langle\psi|) | r'_1 \rangle = \int \langle r_1, r_2, r_3 | \psi \rangle \langle \psi | r'_1, r_2, r_3 \rangle dr_2 dr_3 \quad (4)$$

با داشتن  $\langle r_1, r_2, r_3 | \psi \rangle = \psi(r_1, r_2, r_3)$  و  $\langle \psi | r'_1, r_2, r_3 \rangle = \psi^*(r'_1, r_2, r_3)$  می‌توان  $\rho_1(r_1, r'_1)$  را به صورت زیر نوشت:

$$\rho_1(r_1, r'_1) = \int \psi(r_1, r_2, r_3) \psi^*(r'_1, r_2, r_3) dr_2 dr_3 \quad (5)$$

و برای  $\rho(r_1, r_2)$  از رابطه‌ی زیر استفاده می‌شود [۱۵].

$$\rho(r_1, r_2) = \int \psi(r_2, r_3) \psi^*(r_1, r_3) dr_3 \quad (6)$$

از جمله ویژگی‌های ماتریس چگالی این است که همواره مثبت است. افزون بر این، برای توصیف سامانه‌های کوانتومی از ماتریس چگالی کاهش‌یافته استفاده می‌شود.



سنجه‌ی مقدار درهم تنیدگی  $E(\Xi)$  حالت  $\Xi$ ، بر حسب آنتروپی فون-نیومن به صورت زیر

بیان می‌شود [۱۲]:

$$E(\Xi) = S(\rho_1) - 1 \quad (7)$$

که آنتروپی فون-نیومن به شکل زیر تعریف می‌شود [۱۵]:

$$S(\rho_1) = -\sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i \quad (8)$$

و در آن،  $\rho$  ماتریس چگالی کاهش یافته‌ی تک ذره و  $\{\lambda_i\}$  ویژه مقادیر  $\rho_1$  هستند.

تابع موج کل،  $\langle \Xi |$  را می‌توان با صرف نظر از بر همکنش اسپین-مدار به صورت ضرب تابع موج فضایی  $\psi$  و تابع موج  $\chi$  اسپینی نوشت:

$$\Xi_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_{\partial_3}}(r_1, r_2, r_3) = \psi(r_1, r_2, r_3) \chi_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_{\partial_3}} \quad (9)$$

این تابع موج در حالت کلی پادمتقارن است.

برای محاسبه‌ی درهم تنیدگی باید ماتریس چگالی (تک الکترونی) کاهش یافته را محاسبه کرد. بعد از محاسبه‌ی ماتریس چگالی کاهش یافته، با تغییر پایه‌ها آن را قطري و ویژگی‌های درهم تنیدگی اتم موشینسکی با استفاده از ویژه‌مقادیر ماتریس چگالی کاهش یافته بررسی می‌شود. این بررسی به حالت پایه و برخی از ویژه‌حالت‌های برانگیخته‌ی اتم موشینسکی محدود می‌شود.

#### ۴. محاسبه‌ی درهم تنیدگی ویژه‌حالت‌های اتم موشینسکی

با توجه به این که یکی از جنبه‌های مهم در مطالعه‌ی حالت‌های درهم تنیده، کمی کردن میزان درهم تنیدگی است. از این رو، باید برای محاسبه میزان درهم تنیدگی، آنتروپی فون-نیومن را محاسبه و برای محاسبه آنتروپی فون-نیومن، باید ماتریس چگالی (کاهش یافته) را محاسبه نمود. با درنظر گرفتن درهم تنیدگی تولید شده توسط درجه‌ی آزادی فضایی، درهم تنیدگی حالت پایه‌ی سامانه‌های بس‌ذره‌ای با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی بررسی می‌شود. در نظریه‌ی تابعی چگالی، اندازه‌گیری درهم تنیدگی تابعی از مقدار میانگین مشاهده‌پذیر است. این روش رابطه‌ی مستقیمی بین درهم تنیدگی و انرژی حالت پایه‌ی سامانه‌ی کوانتمومی با استفاده از ضرایب میدان برقرار می‌کند که به یک رابطه‌ی قابل توجهی بین درهم تنیدگی و گذار فاز کوانتمومی منجر می‌شود. بر اساس رابطه‌ی (۲)، برای محاسبه‌ی درهم تنیدگی برخی از ویژه‌حالت‌های اتم موشینسکی که متشکل از سه ذره



می باشد، یک ماتریس  $3 \times 3$  خواهیم داشت که در اینجا تک تک آرایه های ماتریس به صورت زیر به دست می آیند:

$$\Gamma(x_1, x_2, x_3 | x'_1, x'_2, x'_3) = \frac{1}{3!} \begin{vmatrix} \rho(x_1, x'_1) & \rho(x_1, x'_2) & \rho(x_1, x'_3) \\ \rho(x_2, x'_1) & \rho(x_2, x'_2) & \rho(x_2, x'_3) \\ \rho(x_3, x'_1) & \rho(x_3, x'_2) & \rho(x_3, x'_3) \end{vmatrix} \quad (10)$$

تابع موج اتم موشینسکی بر حسب مختصات ژاکوبی با رابطه‌ی زیر داده می شود [۳]:

$$\psi(r_1, r_2, r_3) = \psi(R_1, R_2, R_3) = \psi_{nR_1}(R_1) \psi_{nR_2}(R_2) \psi_{nR_3}(R_3) \quad (11)$$

که در آن،

$$\psi_{nR_i}(R_i) = \left( \frac{\beta_i^{3/4}}{2^n R_{i_{nR_2}}} \right)^{1/2} \exp \left[ \frac{-1}{2} \sqrt{\beta_i} R_i^2 \right] H_{nR_i}(R_i^2 \beta_i^{1/4}) \quad (12)$$

که در آن،  $H_{nR_i}(R_i^2 \beta_i^{1/4})$  توابع هرمیت می باشند.

با استفاده از این رابطه و مقادیر  $\beta_2 = \beta_3 = \Lambda^2 = \omega^2 \pm 3\lambda^2$  و  $\beta_1 = \omega^2$  خواهیم داشت:

(13)

$$\psi(R_1, R_2, R_3) = \frac{e^{-\frac{1}{2}(\sqrt{\omega^2 R_1^2 + \sqrt{\omega^2 \pm \lambda^2} R_2^2 + \sqrt{\omega^2 \pm \lambda^2} R_3^2)}}}{\pi^{3/4}} \left( \frac{2^{-(n_{R_1} + n_{R_2} + n_{R_3})} \omega^{3/2} \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)}}{n_{R_1}! n_{R_2}! n_{R_3}!} \right) \left( H_{n_{R_1}}(\sqrt{\omega} R_1) \left( H_{n_{R_2}}(\sqrt{\omega^2 \pm \lambda^2} R_2) \right) \left( H_{n_{R_3}}(\sqrt{\omega^2 \pm \lambda^2} R_3) \right) \right)$$

حال برای محاسبه‌ی چگالی کاهش یافته تک ذره خواهیم داشت [۳، ۱۵]:

$$\rho(R_1, R_2) = \frac{1}{\sqrt{\omega} \sqrt{1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}}} \left( \frac{2^{-(n_{R_1} + n_{R_2} + n_{R_3})} \omega^{3/2} \sqrt{1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}}}{n_{R_1}! n_{R_2}! n_{R_3}!} \right) (H_{n_{R_1}}(\sqrt{\omega} R_1))^2 \\ \iint \frac{e^{-\frac{1}{2}(\sqrt{\omega^2 R_1^2 + \sqrt{\omega^2 \pm \lambda^2 R_2^2 + \sqrt{\omega^2 \pm \lambda^2 R_3^2}})}}{\pi^{3/4}} \left( H_{n_{R_2}}(\sqrt{\omega^2 \pm \lambda^2} R_2) \right)^2 \left( H_{n_{R_3}}(\sqrt{\omega^2 \pm \lambda^2} R_3) \right)^2 \quad (14) \\ d \left( (\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_2 \right) d \left( (\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_3 \right) = \left( \frac{2^{-(n_{R_1})} \omega}{n_{R_1}! \pi^{1/2}} \right) (H_{n_{R_1}}(\sqrt{\omega} R_1))^2 e^{-\omega R_1^2}$$

و به همین ترتیب برای دیگر آرایه‌های قطری ماتریس می‌توان نوشت:  
(15)

$$\rho(R_2, R_2) = \int \psi(R_1, R_2, R_3) \psi^*(R_1, R_2, R_3) dR_1 dR_3 \\ = \frac{1}{\sqrt{\omega} \sqrt{1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}}} \left( \frac{2^{-(n_{R_1} + n_{R_2} + n_{R_3})} \omega^{3/2} \sqrt{1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}}}{n_{R_1}! n_{R_2}! n_{R_3}!} \right) \left( H_{n_{R_2}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_2 \right)^2 \\ \iint \frac{e^{-\frac{1}{2}(\omega R_1^2 + \sqrt{\omega^2 \pm \lambda^2} R_2^2 + \sqrt{\omega^2 \pm \lambda^2} R_3^2)}}{\pi^{3/4}} (H_{n_{R_1}}(\sqrt{\omega} R_1))^2 \left( H_{n_{R_3}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_3 \right)^2 \\ d \left( (\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_1 \right) d \left( (\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_3 \right) \\ = \pi^{1/4} e^{\left( -\omega \sqrt{1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}} R_2^2 \right)} \left( \frac{2^{-(n_{R_2})} \omega}{n_{R_2}! \pi^{1/2}} \right) (H_{n_{R_2}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_2)^2$$



(۱۶)

$$\begin{aligned} \rho(R_1, R_2) &= \int \psi(R_1, R_2, R_3) \psi^*(R_1, R_2, R_3) dR_1 dR_2 = \frac{e^{-\left(\sqrt{\omega^2 + \lambda^2} R_3^2\right)}}{\sqrt{\omega} \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)}} \\ &\left( \frac{2^{-(n_{R_1} + n_{R_2} + n_{R_3})} \omega^{3/2} \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)}}{n_{R_1}! n_{R_2}! n_{R_3}!} \right) \left( H_{n_{R_3}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_3 \right)^2 \iint e^{-\left(\omega R_1^2 + \sqrt{\omega^2 + \lambda^2} R_2^2\right)} (H_{n_{R_1}}(\sqrt{\omega} R_1))^2 \\ &\left( H_{n_{R_2}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_2 \right)^2 d\left(\left(\omega^2 \pm \lambda^2\right)^{1/4} R_1\right) d\left(\left(\omega^2 \pm \lambda^2\right)^{1/4} R_2\right) \\ &= \pi^{1/4} e^{\left(-\omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_3^2\right)} \left( \frac{2^{-(n_{R_3})} \omega}{n_{R_3}!} \right) (H_{n_{R_3}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_3)^2 \end{aligned}$$

همچنین، برای محاسبه  $\rho(R_1, R_2)$  با توجه به رابطه (۶) ابتدا باید روابط زیر را محاسبه نمود.

(۱۷)

$$\psi(R_1, R_3) = e^{\frac{-\omega R_1^2}{2}} e^{\frac{-\sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_3^2}{2}} \sqrt{\frac{2^{-(n_{R_1} + n_{R_3})} \omega \left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)^{1/4}}{n_{R_1}! n_{R_3}! \pi}} \left( H_{n_{R_1}}(\omega R_1) (H_{n_{R_3}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_3) \right)$$

۶

(۱۸)

$$\begin{aligned} \psi(R_2, R_3) &= e^{\frac{-\sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_2^2}{2}} e^{\frac{-\sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_3^2}{2}} \sqrt{\frac{\omega \left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)^{1/4}}{2^{(n_{R_2} + n_{R_3})} n_{R_2}! n_{R_3}! \pi}} \\ &\left( H_{n_{R_2}}((\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_2) (H_{n_{R_3}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_3) \right) \end{aligned}$$

حال خواهیم داشت [۱۳]:



$$\begin{aligned} \rho(R_1, R_2) &= \int \psi(R_2, R_3) \psi^*(R_1, R_3) dR_3 \\ &= \frac{1}{\sqrt{\omega} \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)^{1/2}}} \left( \frac{2^{-(n_{R_1} + n_{R_3})} \omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)^{1/4}}}{n_{R_1}! n_{R_3}! \pi} \right) \left( \frac{\omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)}}{2^{(n_{R_2} + n_{R_3})} n_{R_2}! n_{R_3}! \pi} \right) \\ &\quad (H_{n_{R_1}}(\sqrt{\omega} R_1)) (H_{n_{R_2}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_2) \end{aligned} \quad (۱۹)$$

$$\begin{aligned} &\iint e^{\frac{-\omega R_1^2}{2}} e^{\frac{-\omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_3^2}{2}} e^{\frac{-\omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_2^2}{2}} \frac{e^{\frac{-1}{2}(\omega R_1^2 + \sqrt{\omega^2 \pm \lambda^2} R_2^2 + \sqrt{\omega^2 \pm \lambda^2} R_3^2)}}{\pi^{3/4}} (H_{n_{R_3}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_3)^2 \\ &d((\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_3) \\ &= e^{\frac{-\omega}{2} \left( R_1^2 + \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_2^2 \right)} \sqrt{\frac{2^{-(n_{R_1} + n_{R_2})} \omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)^{1/4}}}{n_{R_1}! n_{R_2}! \pi}} (H_{n_{R_1}}(\sqrt{\omega} R_1)) (H_{n_{R_2}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_2) \end{aligned}$$

با استفاده از رابطه‌ی (۱۲) و محاسبه‌ی  $\rho(R_1, R_3)$  می‌توان  $\psi(R_1, R_2)$  را به دست آورد.

(۲۰)

$$\psi(R_1, R_2) = e^{\frac{-\omega R_1^2}{2}} e^{\frac{-\sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_2^2}{2}} \sqrt{\frac{2^{-(n_{R_1} + n_{R_2})} \omega \left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)^{1/4}}{n_{R_1}! n_{R_2}! \pi}} (H_{n_{R_1}}(\omega R_1)) (H_{n_{R_2}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_2)$$



(۲۱)

$$\rho(R_1, R_3) = \int \psi(R_2, R_3) \psi^*(R_1, R_2) dR_2 = \frac{1}{\sqrt{\omega} \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)^{1/2}}} e^{\frac{-\omega R_1^2}{2}} e^{\frac{-\omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_2^2}{2}}$$

$$= \left( \frac{\omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)^{1/4}}}{2^{(n_{R_2} + n_{R_3})} n_{R_2}! n_{R_3}! \pi} \right)^{1/2} \left( \frac{2^{-(n_{R_2} + n_{R_3})} \omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)^{1/4}}}{n_{R_2}! n_{R_3}! \pi} \right)^{1/2} (H_{n_{R_1}}(\sqrt{\omega} R_1)) (H_{n_{R_3}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_3)$$

$$\iint e^{\frac{-\omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_2^2}{2}} (H_{n_{R_2}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_2)^2 d\left((\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_2\right)$$

$$= e^{\frac{-\omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_3^2}{2}} \sqrt{\frac{2^{-(n_{R_1} + n_{R_3})} \omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)^{1/4}}}{n_{R_1}! n_{R_3}! \pi}} (H_{n_{R_1}}(\sqrt{\omega} R_1)) (H_{n_{R_3}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_3)$$

همچنین، برای محاسبه  $\rho(R_2, R_3)$  خواهیم داشت:

(۲۲)

$$\rho(R_2, R_3) = \int \psi(R_2, R_1) \psi^*(R_1, R_3) dR_1 = \frac{1}{\sqrt{\omega}} e^{\frac{-\omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_2^2}{2}} e^{\frac{-\omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_3^2}{2}}$$

$$= \left( \frac{2^{-(n_{R_1} + n_{R_2})} \omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)^{1/4}}}{n_{R_1}! n_{R_2}! \pi} \right)^{1/2} \left( \frac{2^{-(n_{R_1} + n_{R_3})} \omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)^{1/4}}}{n_{R_1}! n_{R_3}! \pi} \right)^{1/2} (H_{n_{R_2}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_2)$$

$$(H_{n_{R_3}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_3) \iint e^{\frac{-\omega R_1^2}{2}} (H_{n_{R_1}}(\sqrt{\omega} R_1))^2 d(\sqrt{\omega} R_1)$$

$$= \left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2^{-(n_{R_2} + n_{R_3})} \omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} (R_2^2 + R_3^2)}{n_{R_2}! n_{R_3}! \pi}} (H_{n_{R_2}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_2) (H_{n_{R_3}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_3)$$



با توجه به ویژگی هرمیتی بودن ماتریس چگالی کاهش یافته‌ی تک ذره  $\rho(x_i, x_j) = \rho^*(x_i, x_j)$  برای دیگر آرایه‌ها خواهیم داشت.

$$\rho(R_1, R_2) = \rho(R_2, R_1), \quad \rho(R_1, R_3) = \rho(R_3, R_1), \quad \rho(R_2, R_3) = \rho(R_3, R_2) \quad (۲۳)$$

روابط (۱۸) تا (۲۲) آرایه‌های ماتریس چگالی را تشکیل می‌دهند. حال با به کار گیری این روابط و تشکیل ماتریس چگالی می‌توان آنتروپی فون-نیومن را برای حالت‌های مورد نظر حساب کرد. همچنین، می‌توان  $\tau = \lambda/\omega$  را در محاسبات به کار برد. در نهایت ماتریس چگالی مورد نظر بر حسب مختصات ژاکوبی را به صورت زیر خواهیم داشت:

$$\Gamma(R_1, R_2, R_3 | R'_1, R'_2, R'_3) = \frac{1}{3!} \begin{vmatrix} \rho(R_1, R'_1) & \rho(R_1, R'_2) & \rho(R_1, R'_3) \\ \rho(R_2, R'_1) & \rho(R_2, R'_2) & \rho(R_2, R'_3) \\ \rho(R_3, R'_1) & \rho(R_3, R'_2) & \rho(R_3, R'_3) \end{vmatrix} \quad (۲۴)$$

### بررسی حالت‌های ویژه:

با استفاده از محاسبات بالا و مقادیر توابع هرمیتی خواهیم داشت:

برای حالت  $|010\rangle$ ، با قراردادن  $n_{R_3} = 0, n_{R_1} = 0, n_{R_2} = 1$  هریک از آرایه‌ها به دست می‌آید.

$$\begin{aligned} \rho(R_1, R_2) &= \left( \frac{2^{-n_{R_1}} \omega}{n_{R_1}! \pi^{1/2}} \right) \left( H_{n_{R_1}} (\sqrt{\omega} R_1)^2 e^{-\omega R_1^2} \right) = \left( \frac{\omega}{\pi^{1/2}} \right) \left( H_0 (\sqrt{\omega} R_1)^2 e^{-\omega R_1^2} \right) = \left( \frac{\omega e^{-\omega R_1^2}}{\pi^{1/2}} \right) \\ \rho(R_2, R_2) &= \pi^{1/4} e^{-\frac{\omega \sqrt{(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}) R_2^2}}{2}} \left( \frac{2^{-n_{R_2}} \omega}{n_{R_2}! \pi^{1/2}} \right) \left( H_{n_{R_2}} (\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_2 \right) = \\ &\quad \left( 2\pi^{1/4} \omega^2 \sqrt{1 - \tau^2} \right) R_2^2 e^{-\frac{\omega \sqrt{(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}) R_2^2}}{2}} \end{aligned}$$



$$\rho(R_3, R_3) = \pi^{1/4} e^{-\frac{\omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_3^2}{2}} \left( \frac{2^{-n_{R_3}} \omega}{n_{R_3}! \pi^{1/2}} \right) \left( H_{n_{R_3}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_3 \right) = \pi^{1/4} \omega e^{-\omega \sqrt{1 \pm \tau^2} R_3^2}$$

$$\rho(R_1, R_2) = \rho(R_2, R_1) = e^{-\frac{-\omega \left[ R_1^2 + \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_2^2 \right]}{2}} \left( \frac{2^{-(n_{R_1}+n_{R_2})} \omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)^{1/4}}}{n_{R_1}! n_{R_2}! \pi} \right)$$

$$(H_{n_{R_1}}(\sqrt{\omega} R_1)) \left( H_{n_{R_2}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_2 \right) = \omega (1 \pm \tau^2)^{1/4} \left( \frac{2 \omega \sqrt{(1 \pm \tau^2)^{1/4}}}{\pi} \right) R_2 e^{-\frac{-\omega \left[ R_1^2 + \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_2^2 \right]}{2}}$$

$$\rho(R_1, R_3) = \rho(R_3, R_1) = e^{-\frac{-\omega \left[ R_1^2 + \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_3^2 \right]}{2}} \left( \frac{2^{-(n_{R_1}+n_{R_3})} \omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)^{3/4}}}{n_{R_1}! n_{R_3}! \pi} \right) (H_{n_{R_1}}(\sqrt{\omega} R_1))$$

$$(H_{n_{R_3}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_3) = \left( \frac{\sqrt{(1 \pm \tau^2)^{3/4}}}{\pi} \right) e^{-\frac{-\omega \left[ R_1^2 + \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} R_3^2 \right]}{2}}$$

$$\rho(R_2, R_3) = \rho(R_3, R_2) = \left( 1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2} \right)^{1/4} \left( \frac{2^{-(n_{R_2}+n_{R_3})} \omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)^{1/4}}}{n_{R_2}! n_{R_3}! \pi} \right) e^{-\frac{-\omega \sqrt{\left(1 \pm \frac{\lambda^2}{\omega^2}\right)} [R_2^2 + R_3^2]}{2}}$$

$$(H_{n_{R_2}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_2) \left( H_{n_{R_3}}(\omega^2 \pm \lambda^2)^{1/4} R_3 \right) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} R_2 \sqrt{(1 \pm \tau^2)} R_3 e^{-\frac{-\omega \sqrt{(1 \pm \tau^2)} [R_2^2 + R_3^2]}{2}}$$

و با جایگذاری این درایه‌ها برای ماتریس چگالی مورد نظر بر حسب مختصات ژاکوبی داریم:

$$\Gamma(R_1, R_2, R_3 | R'_1, R'_2, R'_3) = \frac{1}{3!} \begin{vmatrix} \frac{\alpha e^{-\omega R_1^2}}{\sqrt{\pi}} & \alpha(1 \pm \tau^2)^{1/4} \left( \frac{2\alpha \sqrt{(1 \pm \tau^2)^{1/4}}}{\pi} \right) R_2 e^{-\frac{\omega}{2} [R_1^2 + \sqrt{\frac{1 \pm \tau^2}{\omega^2}} R_2^2]} & \left( \frac{\sqrt{(1 \pm \tau^2)^{3/4}}}{\pi} \right) e^{-\frac{\omega}{2} [R_1^2 + \sqrt{\frac{1 \pm \tau^2}{\omega^2}} R_3^2]} \\ \alpha(1 \pm \tau^2)^{1/4} \left( \frac{2\alpha \sqrt{(1 \pm \tau^2)^{1/4}}}{\pi} \right) R_2 e^{-\frac{\omega}{2} [R_1^2 + \sqrt{\frac{1 \pm \tau^2}{\omega^2}} R_2^2]} & \left( 2\pi^{1/4} \alpha^2 \sqrt{1 - \tau^2} \right) R_2^2 e^{-\frac{\omega}{2} \sqrt{\frac{1 \pm \tau^2}{\omega^2}} R_2^2} & \sqrt{\frac{2}{\pi}} R_2 \sqrt{(1 \pm \tau^2)} R_3 e^{-\frac{\omega}{2} \sqrt{\frac{1 \pm \tau^2}{\omega^2}} [R_2^2 + R_3^2]} \\ \left( \frac{\sqrt{(1 \pm \tau^2)^{3/4}}}{\pi} \right) e^{-\frac{\omega}{2} [R_1^2 + \sqrt{\frac{1 \pm \tau^2}{\omega^2}} R_3^2]} & \sqrt{\frac{2}{\pi}} R_2 \sqrt{(1 \pm \tau^2)} R_3 e^{-\frac{\omega}{2} \sqrt{\frac{1 \pm \tau^2}{\omega^2}} [R_2^2 + R_3^2]} & \pi^{1/4} \alpha e^{-\omega \sqrt{\frac{1 \pm \tau^2}{\omega^2}} R_3^2} \end{vmatrix}$$

همان طور که می دانیم، در حالت غیر جفت شدگی سامانه،  $0 \rightarrow \tau$  (برای نمونه متناظر با  $\lambda \rightarrow 0$

یا معادل با  $\lambda \rightarrow \Lambda$ ) و در حالت جفت شدگی گرفته شد. از این رو، جفت شدگی سامانه به صورت زیر خواهد بود.

$$\Gamma(R_1, R_2, R_3 | R'_1, R'_2, R'_3) = \frac{1}{3!} \begin{vmatrix} \frac{\omega e^{-\omega R_1^2}}{\sqrt{\pi}} & \omega \sqrt{\frac{2\omega}{\pi}} R_2 e^{-\frac{\omega}{2} [R_1^2 + R_2^2]} & \sqrt{\frac{1}{\pi}} e^{-\frac{\omega}{2} [R_1^2 + R_3^2]} \\ \omega \sqrt{\frac{2\omega}{\pi}} R_2 e^{-\frac{\omega}{2} [R_1^2 + R_2^2]} & \left( 2\pi^{1/4} \omega^2 \right) R_2^2 e^{-\frac{\omega R_2^2}{2}} & \sqrt{\frac{2}{\pi}} R_2 e^{-\frac{\omega}{2} [R_2^2 + R_3^2]} \\ \sqrt{\frac{1}{\pi}} e^{-\frac{\omega}{2} [R_1^2 + R_3^2]} & \sqrt{\frac{2}{\pi}} R_2 e^{-\frac{\omega}{2} [R_2^2 + R_3^2]} & \pi^{1/4} \omega e^{-\omega R_3^2} \end{vmatrix}$$

برای دیگر حالت ها نیز به همین صورت می توان آرایه های ماتریس چگالی را محاسبه کرد:  
برای حالت  $|011\rangle$ ، با جایگذاری  $1$  و  $n_{R_3} = 1, n_{R_1} = 0, n_{R_2} = 0$  هریک از آرایه ها به دست می آید.



$$\Gamma(R_1, R_2, R_3 | R'_1, R'_2, R'_3) = \frac{1}{3!} \left| \begin{array}{ccc} \frac{\alpha e^{-\alpha R_1^2}}{\sqrt{\pi}} & \omega \left( \frac{2\alpha \sqrt{(1 \pm \tau^2)^{5/4}}}{\pi} \right) R_2 e^{\frac{-\alpha [R_1^2 + \sqrt{1 \pm \tau^2} R_2^2]}{2}} & \sqrt{\frac{(1 \pm \tau^2)^{5/4}}{\pi}} R_2 e^{\frac{-\alpha [R_1^2 + \sqrt{1 \pm \tau^2} R_3^2]}{2}} \\ \omega \left( \frac{2\alpha \sqrt{(1 \pm \tau^2)^{5/4}}}{\pi} \right) R_2 e^{\frac{-\alpha [R_1^2 + \sqrt{1 \pm \tau^2} R_2^2]}{2}} & \left( 2\pi^{1/4} \omega^2 \sqrt{1 - \tau^2} \right) R_2^2 e^{\frac{-\alpha \sqrt{\frac{1 - \tau^2}{\omega^2}} R_2^2}{2}} & \frac{2}{\sqrt{\pi}} \omega^{3/2} R_2 (1 \pm \tau^2)^{3/4} R_3 e^{\frac{-\alpha \sqrt{1 \pm \tau^2} [R_2^2 + R_3^2]}{2}} \\ \sqrt{\frac{2\alpha (1 \pm \tau^2)^{5/4}}{\pi}} e^{\frac{-\alpha [R_1^2 + \sqrt{1 \pm \tau^2} R_3^2]}{2}} & \frac{2}{\sqrt{\pi}} \omega^{3/2} R_2 (1 \pm \tau^2)^{3/4} R_3 e^{\frac{-\alpha \sqrt{1 \pm \tau^2} [R_2^2 + R_3^2]}{2}} & 2\alpha \pi^{1/4} \sqrt{1 \pm \tau^2} R_3^2 e^{-\alpha \sqrt{1 \pm \tau^2} R_3^2} \end{array} \right|$$

$$= \frac{1}{3!} \left| \begin{array}{ccc} \frac{4\omega^2 e^{-\alpha R_1^2}}{\sqrt{\pi}} & \omega \sqrt{\frac{2}{\pi}} R_2 e^{\frac{-\alpha [R_1^2 + R_2^2]}{2}} & \sqrt{\frac{2\omega}{\pi}} R_3 e^{\frac{-\alpha [R_1^2 + R_3^2]}{2}} \\ \omega \sqrt{\frac{2}{\pi}} R_2 e^{\frac{-\alpha [R_1^2 + R_2^2]}{2}} & \left( 2\pi^{1/4} \omega^2 \right) R_2^2 e^{-\alpha R_2^2} & \frac{2}{\sqrt{\pi}} \omega^{3/2} R_2 R_3 e^{\frac{-\alpha [R_2^2 + R_3^2]}{2}} \\ \sqrt{\frac{2\omega}{\pi}} R_3 e^{\frac{-\alpha [R_1^2 + R_3^2]}{2}} & \frac{2}{\sqrt{\pi}} \omega^{3/2} R_2 R_3 e^{\frac{-\alpha [R_2^2 + R_3^2]}{2}} & \left( 2\pi^{1/4} \omega^2 \right) R_3^2 e^{-\alpha R_3^2} \end{array} \right|$$

برای حالت  $|110\rangle$ ، با جایگذاری  $n_{R_1} = 1, n_{R_2} = 1$  و  $n_{R_3} = 0$  هریک از آرایه‌ها به دست می‌آید.

$$\Gamma(R_1, R_2, R_3 | R'_1, R'_2, R'_3) = \frac{1}{3!}$$

$$= \frac{1}{3!} \begin{vmatrix} \frac{4\omega^2 e^{-\omega R_1^2}}{\sqrt{\pi}} & 2\omega^{3/2} \sqrt{\frac{(1\pm\tau^2)^{5/4}}{\pi}} R_1 R_2 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + \sqrt{1\pm\tau^2} R_2^2]} & \sqrt{\frac{2\omega(1\pm\tau^2)^{3/4}}{\pi}} R_1 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + \sqrt{1\pm\tau^2} R_3^2]} \\ 2\omega^{3/2} \sqrt{\frac{(1\pm\tau^2)^{5/4}}{\pi}} R_1 R_2 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + \sqrt{1\pm\tau^2} R_2^2]} & \left(2\pi^{1/4}\omega^2 \sqrt{1-\tau^2}\right) R_2^2 e^{\frac{-\omega\sqrt{1\pm\tau^2}}{2}[R_2^2 + R_3^2]} & \sqrt{\frac{2}{\pi}} \omega \sqrt{1\pm\tau^2} R_2 e^{\frac{-\omega\sqrt{1\pm\tau^2}}{2}[R_2^2 + R_3^2]} \\ \sqrt{\frac{2\omega(1\pm\tau^2)^{3/4}}{\pi}} R_1 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + \sqrt{1\pm\tau^2} R_3^2]} & \sqrt{\frac{2}{\pi}} \omega \sqrt{1\pm\tau^2} R_2 e^{\frac{-\omega\sqrt{1\pm\tau^2}}{2}[R_2^2 + R_3^2]} & \omega^2 \pi^{1/4} \sqrt{1\pm\tau^2} R_3^2 e^{-\omega\sqrt{1\pm\tau^2} R_3^2} \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{3!} \begin{vmatrix} \frac{4\omega^2 e^{-\omega R_1^2}}{\sqrt{\pi}} & 2\omega^{3/2} \pi^{-1/2} R_1 R_2 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + R_2^2]} & \sqrt{\frac{2\omega}{\pi}} R_1 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + R_3^2]} \\ 2\omega^{3/2} \pi^{-1/2} R_1 R_2 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + R_2^2]} & \left(2\pi^{1/4}\omega^2\right) R_2^2 e^{-\omega R_2^2} & \sqrt{\frac{2}{\pi}} \omega R_1 e^{\frac{-\omega}{2}[R_2^2 + R_3^2]} \\ \sqrt{\frac{2\omega}{\pi}} R_1 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + R_3^2]} & \sqrt{\frac{2}{\pi}} \omega R_1 e^{\frac{-\omega}{2}[R_2^2 + R_3^2]} & \omega^2 \pi^{1/4} R_3^2 e^{-\omega R_3^2} \end{vmatrix}$$

برای حالت  $|101\rangle$ ، با جایگذاری هر یک از آرایه‌ها به صورت زیر به دست می‌آید.

$$\Gamma(R_1, R_2, R_3 | R'_1, R'_2, R'_3) = \frac{1}{3!}$$

$$= \frac{1}{3!} \begin{vmatrix} \frac{4\omega^2 R_1^2 e^{-\omega R_1^2}}{\sqrt{\pi}} & \omega \sqrt{\frac{(1\pm\tau^2)^{5/4}}{\pi}} R_1 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + \sqrt{1\pm\tau^2} R_2^2]} & 2\omega \sqrt{\frac{(1\pm\tau^2)^{5/4}}{\pi}} R_1 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + \sqrt{1\pm\tau^2} R_3^2]} \\ \omega \sqrt{\frac{(1\pm\tau^2)^{5/4}}{\pi}} R_1 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + \sqrt{1\pm\tau^2} R_2^2]} & \left(\omega\pi^{1/4}\right) R_2^2 e^{\frac{-\omega\sqrt{1\pm\tau^2}}{2}[R_2^2 + R_3^2]} & \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\omega\sqrt{1\pm\tau^2}}{\sqrt{\pi}} R_2 e^{\frac{-\omega\sqrt{1\pm\tau^2}}{2}[R_2^2 + R_3^2]} \\ 2\omega \sqrt{\frac{(1\pm\tau^2)^{5/4}}{\pi}} R_1 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + \sqrt{1\pm\tau^2} R_3^2]} & \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\omega\sqrt{1\pm\tau^2}}{\sqrt{\pi}} R_2 e^{\frac{-\omega\sqrt{1\pm\tau^2}}{2}[R_2^2 + R_3^2]} & 2\omega^2 \pi^{1/4} \sqrt{1\pm\tau^2} R_2^2 e^{-\omega\sqrt{1\pm\tau^2} R_2^2} \end{vmatrix}$$



$$=\frac{1}{3!} \begin{vmatrix} \frac{4\omega^2 R_1^2 e^{-\omega R_1^2}}{\sqrt{\pi}} & \omega \sqrt{\frac{(1\pm\tau^2)^{3/4}}{\pi}} R_1 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + \sqrt{1\pm\tau^2} R_2^2]} & 2\omega \sqrt{\frac{(1\pm\tau^2)^{5/4}}{\pi}} R_1 R_2 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + \sqrt{1\pm\tau^2} R_3^2]} \\ \omega \sqrt{\frac{2(1\pm\tau^2)^{3/4}}{\pi}} R_1 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + \sqrt{1\pm\tau^2} R_2^2]} & (\omega\pi^{1/4}) R_2 e^{-\omega\sqrt{1\pm\tau^2} R_2^2} & \frac{\sqrt{2}}{\pi} \frac{\omega\sqrt{1\pm\tau^2}}{\sqrt{\pi}} R_3 e^{\frac{-\omega}{2}\sqrt{1\pm\tau^2}[R_2^2 + R_3^2]} \\ 2\omega \sqrt{\frac{(1\pm\tau^2)^{5/4}}{\pi}} R_1 R_3 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + \sqrt{1\pm\tau^2} R_3^2]} & \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\omega\sqrt{1\pm\tau^2}}{\sqrt{\pi}} R_3 e^{\frac{-\omega}{2}\sqrt{1\pm\tau^2}[R_2^2 + R_3^2]} & 2\omega^2 \pi^{1/4} \sqrt{1\pm\tau^2} R_3^2 e^{-\omega\sqrt{1\pm\tau^2} R_3^2} \end{vmatrix}$$

برای حالت  $|111\rangle$ ، با جایگذاری آرایه‌ها داریم:

$$\Gamma(R_1, R_2, R_3 | R'_1, R'_2, R'_3) = \frac{1}{3!} \begin{vmatrix} \frac{2R_1^2 \sqrt{1\pm\tau^2} e^{-\omega R_1^2}}{\sqrt{\pi}} & 2\omega^2 \sqrt{\frac{(1\pm\tau^2)^{3/4}}{\pi}} R_1 R_2 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + \sqrt{1\pm\tau^2} R_2^2]} & 2\omega^2 \sqrt{\frac{(1\pm\tau^2)^{5/4}}{\pi}} R_1 R_3 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + \sqrt{1\pm\tau^2} R_3^2]} \\ 2\omega^2 \sqrt{\frac{(1\pm\tau^2)^{5/4}}{\pi}} R_1 R_2 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + \sqrt{1\pm\tau^2} R_2^2]} & (2\omega^2 \pi^{1/4})(1\mp\tau^2) R_2^2 e^{\frac{-\omega\sqrt{1\pm\tau^2} R_2^2}{2}} & 2\omega^2 \frac{(1\pm\tau^2)^{3/4}}{\sqrt{\pi}} R_2 R_3 e^{\frac{-\omega}{2}\sqrt{1\pm\tau^2}[R_2^2 - R_3^2]} \\ 2\omega^2 \sqrt{\frac{(1\pm\tau^2)^{5/4}}{\pi}} R_1 R_3 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + \sqrt{1\pm\tau^2} R_3^2]} & 2\omega^2 \frac{(1\pm\tau^2)^{3/4}}{\sqrt{\pi}} R_2 R_3 e^{\frac{-\omega}{2}\sqrt{1\pm\tau^2}[R_2^2 - R_3^2]} & 2\omega^2 \pi^{1/4} (1+\tau^2) R_3^2 e^{-\omega\sqrt{1\pm\tau^2} R_3^2} \end{vmatrix}$$

$$=\frac{1}{3!} \begin{vmatrix} \frac{2R_1^2 e^{-\omega R_1^2}}{\sqrt{\pi}} & \frac{2\omega^2}{\sqrt{\pi}} R_1 R_2 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + R_2^2]} & \frac{2\omega^2}{\sqrt{\pi}} R_1 R_3 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + R_3^2]} \\ \frac{2\omega^2}{\sqrt{\pi}} R_1 R_2 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + R_2^2]} & (2\omega^2 \pi^{1/4}) R_2^2 e^{-\omega R_2^2} & \frac{2\omega^2}{\sqrt{\pi}} R_2 R_3 e^{\frac{-\omega}{2}[R_2^2 - R_3^2]} \\ \frac{2\omega^2}{\sqrt{\pi}} R_1 R_3 e^{\frac{-\omega}{2}[R_1^2 + R_3^2]} & \frac{2\omega^2}{\sqrt{\pi}} R_2 R_3 e^{\frac{-\omega}{2}[R_2^2 - R_3^2]} & 2\omega^2 \pi^{1/4} R_3^2 e^{-\omega R_3^2} \end{vmatrix}$$

همچنین، برای حالت  $|021\rangle$ ، با جایگذاری آرایه‌ها داریم:

$$\Gamma(R_1, R_2, R_3 | R'_1, R'_2, R'_3) = \frac{1}{3!} \left| \begin{array}{ccc} \frac{\omega \sqrt{1 \pm \tau^2} e^{-\omega R_i^2}}{\sqrt{\pi}} & \omega \sqrt{\frac{(1 \pm \tau^2)^{3/4}}{8\pi}} (-2 + 4\sqrt{1 \pm \tau^2} \omega R_i) e^{\frac{-\omega}{2} [R_i^2 - \sqrt{1 \pm \tau^2} R_i^2]} & \omega^{1/2} \sqrt{\frac{2(1 \pm \tau^2)^{3/4}}{\pi}} R_3 e^{\frac{-\omega}{2} [R_i^2 + \sqrt{1 \pm \tau^2} R_i^2]} \\ \omega \sqrt{\frac{(1 \pm \tau^2)^{3/4}}{8\pi}} (-2 + 4\sqrt{1 \pm \tau^2} \omega R_i) e^{\frac{-\omega}{2} [R_i^2 + \sqrt{1 \pm \tau^2} R_i^2]} & \frac{\omega \pi^{1/4} \sqrt{1 \pm \tau^2}}{8} (-2 + 4\sqrt{1 \pm \tau^2} \omega R_i) e^{\frac{-\omega}{2} [\sqrt{1 \pm \tau^2} R_i^2]} & \frac{\omega^{3/2}}{\pi^{1/2}} \sqrt{1 \pm \tau^2} (-1 + 2\sqrt{1 \pm \tau^2} \omega R_i^2) R_3 e^{\frac{-\omega}{2} \sqrt{1 \pm \tau^2} [R_i^2 + R_3^2]} \\ \omega^{3/2} \sqrt{\frac{2(1 \pm \tau^2)^{3/4}}{\pi}} R_3 e^{\frac{-\omega}{2} [R_i^2 - \sqrt{1 \pm \tau^2} R_i^2]} & \frac{\omega^{3/2}}{\pi^{1/2}} \sqrt{1 \pm \tau^2} (-1 + 2\sqrt{1 \pm \tau^2} \omega R_i^2) R_3 e^{\frac{-\omega}{2} \sqrt{1 \pm \tau^2} [R_i^2 + R_3^2]} & 2\omega^2 \pi^{1/4} (1 + \tau^2) R_3^2 e^{-\omega \sqrt{1 \pm \tau^2} R_3^2} \end{array} \right|$$

$$\Gamma(R_1, R_2, R_3 | R'_1, R'_2, R'_3) = \frac{1}{3!} \left| \begin{array}{ccc} \frac{\omega e^{-\omega R_1^2}}{\sqrt{\pi}} & \frac{\omega}{\sqrt{8\pi}} (-2 + 4\omega R_1) e^{\frac{\omega}{2} [R_1^2 - R_3^2]} & \omega^{3/2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} R_3 e^{\frac{\omega}{2} [R_1^2 - R_3^2]} \\ \frac{\omega}{\sqrt{8\pi}} (-2 + 4\omega R_2) e^{\frac{\omega}{2} [R_1^2 - R_3^2]} & \frac{\omega \pi^{1/4}}{8} (-2 + 4\omega R_2) e^{\frac{-\omega}{2} [R_1^2]} & \frac{\omega^{3/2}}{\pi^{1/2}} (-1 + 2\omega R_2) R_2 e^{\frac{-\omega}{2} [R_2^2 + R_3^2]} \\ \omega^{3/2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} R_3 e^{\frac{\omega}{2} [R_1^2 - R_3^2]} & \frac{\omega^{3/2}}{\pi^{1/2}} (-1 + 2\omega R_2) R_2 e^{\frac{-\omega}{2} [R_1^2 + R_3^2]} & 2\omega^2 \pi^{1/4} (1 + \tau^2) R_3^2 e^{-\omega \sqrt{1 \pm \tau^2} R_3^2} \end{array} \right|$$

برای حالت  $|012\rangle$  ، نیز با قراردادن آرایه‌ها

داریم:

$$\Gamma(R_1, R_2, R_3 | R'_1, R'_2, R'_3) = \frac{1}{3!} \left| \begin{array}{ccc} \frac{\omega \sqrt{1 \pm \tau^2} e^{-\omega R_i^2}}{\sqrt{\pi}} & \omega^{3/2} \sqrt{\frac{2(1 \pm \tau^2)^{3/4}}{\pi}} R_2 e^{\frac{-\omega}{2} [R_i^2 - \sqrt{1 \pm \tau^2} R_i^2]} & \omega \sqrt{\frac{(1 \pm \tau^2)^{3/4}}{8\pi}} (-2 + 4\sqrt{1 - \tau^2} \omega R_i) e^{\frac{-\omega}{2} [R_i^2 + \sqrt{1 \pm \tau^2} R_i^2]} \\ \omega^{3/2} \sqrt{\frac{2(1 \pm \tau^2)^{3/4}}{\pi}} R_2 e^{\frac{-\omega}{2} [R_i^2 + \sqrt{1 \pm \tau^2} R_i^2]} & (2\pi^{1/4} \omega^2 (1 \pm \tau^2)) R_2 e^{-\omega \sqrt{1 \pm \tau^2} R_i^2} & \frac{\omega^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \sqrt{1 \pm \tau^2} (-1 + 2\sqrt{1 \pm \tau^2} \omega R_i^2) R_2 e^{\frac{-\omega}{2} \sqrt{1 \pm \tau^2} [R_i^2 + R_3^2]} \\ \omega \sqrt{\frac{(1 \pm \tau^2)^{3/4}}{8\pi}} (-2 + 4\sqrt{1 - \tau^2} \omega R_i) e^{\frac{-\omega}{2} [R_i^2 - \sqrt{1 \pm \tau^2} R_i^2]} & \frac{\omega^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \sqrt{1 \pm \tau^2} (-1 + 2\sqrt{1 \pm \tau^2} \omega R_i^2) R_2 e^{\frac{-\omega}{2} \sqrt{1 \pm \tau^2} [R_i^2 + R_3^2]} & \frac{\omega \pi^{1/4} \sqrt{1 \pm \tau^2}}{4} (-1 + 2\sqrt{1 \pm \tau^2} \omega R_i^2)^2 e^{-\omega \sqrt{1 \pm \tau^2} R_3^2} \end{array} \right|$$

$$= \frac{1}{3!} \left| \begin{array}{ccc} \frac{\omega e^{-\omega R_1^2}}{\sqrt{\pi}} & \omega^{3/2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} R_2 e^{\frac{\omega}{2} [R_1^2 - R_3^2]} & \frac{\omega}{8\pi} (-2 + 4\omega R_3) e^{\frac{-\omega}{2} [R_1^2 - R_3^2]} \\ \omega^{3/2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} R_2 e^{\frac{\omega}{2} [R_1^2 - R_3^2]} & 2\pi^{1/4} \omega^2 R_2^2 e^{-\omega R_2^2} & \frac{\omega^{3/2}}{\sqrt{\pi}} (-1 + 2\omega R_3) R_2 e^{\frac{-\omega}{2} [R_2^2 + R_3^2]} \\ \frac{\omega}{8\pi} (-2 + 4\omega R_3) e^{\frac{-\omega}{2} [R_1^2 - R_3^2]} & \frac{\omega^{3/2}}{\sqrt{\pi}} (-1 + 2\omega R_3) R_2 e^{\frac{-\omega}{2} [R_2^2 + R_3^2]} & \frac{\omega \pi^{1/4}}{4} (-1 + 2\omega R_3)^2 e^{-\omega R_3^2} \end{array} \right|$$



برای حالت  $|210\rangle$ ، با قراردادن  $n_{R_3} = 0$  و  $n_{R_1} = 2, n_{R_2} = 1$  می‌محاسبه‌ی آرایه‌ها داریم:

$$\Gamma(R_1, R_2, R_3 | R'_1, R'_2, R'_3) = \frac{1}{3!} \begin{vmatrix} \frac{\omega\sqrt{1\pm\tau^2}}{8\sqrt{\pi}} (-2+4\alpha R_i^2) e^{-\alpha R_i^2} & \omega^{3/2} \sqrt{\frac{(1\pm\tau^2)^{3/4}}{\pi}} (-1+2\alpha R_i^2) e^{\frac{-\alpha}{2}[R_i^2 - \sqrt{(1\pm\tau^2)R_i^2}]} & \omega \sqrt{\frac{(1\pm\tau^2)^{3/4}}{8\pi}} (-2+4\alpha R_i^2) e^{\frac{-\alpha}{2}[R_i^2 - \sqrt{(1\pm\tau^2)R_i^2}]} \\ \omega^{3/2} \sqrt{\frac{(1\pm\tau^2)^{3/4}}{\pi}} (-1+2\alpha R_i^2) e^{\frac{-\alpha}{2}[R_i^2 - \sqrt{(1\pm\tau^2)R_i^2}]} & (2\pi^{1/4}\omega^2(1\pm\tau^2)) R_2^2 e^{-\alpha\sqrt{1\pm\tau^2}R_2^2} & \frac{\sqrt{2}}{\pi} \omega^{3/2} \sqrt{1\pm\tau^2} R_2 e^{2\frac{\omega\sqrt{1\pm\tau^2}}{\pi}[-R_2^2 + R_3^2]} \\ \omega \sqrt{\frac{(1\pm\tau^2)^{3/4}}{8\pi}} (-2+4\alpha R_i^2) e^{\frac{-\alpha}{2}[R_i^2 - \sqrt{(1\pm\tau^2)R_i^2}]} & \frac{\sqrt{2}}{\pi} \omega^{3/2} \sqrt{1\pm\tau^2} R_2 e^{2\frac{\omega\sqrt{1\pm\tau^2}}{\pi}[-R_2^2 + R_3^2]} & \omega\pi^{1/4} \sqrt{1\pm\tau^2} e^{-\alpha\sqrt{1\pm\tau^2}R_3^2} \end{vmatrix}$$
  

$$= \frac{1}{3!} \frac{\omega^{3/2}}{\sqrt{\pi}} (-1+2\alpha R_i^2) e^{\frac{-\alpha}{2}[R_i^2 + R_3^2]} \begin{vmatrix} \frac{\omega}{8\sqrt{\pi}} (-2+4\alpha R_i^2) e^{-\alpha R_i^2} & \frac{\omega^{3/2}}{\sqrt{\pi}} (-1+2\alpha R_i^2) e^{\frac{-\alpha}{2}[R_i^2 + R_3^2]} & \frac{\omega}{\sqrt{8\pi}} (-2+4\alpha R_i^2) e^{\frac{-\alpha}{2}[R_i^2 - R_3^2]} \\ \frac{\omega^{3/2}}{\sqrt{\pi}} (-1+2\alpha R_i^2) e^{\frac{-\alpha}{2}[R_i^2 + R_3^2]} & (2\pi^{1/4}\omega^2) R_2^2 e^{-\alpha R_2^2} & \frac{\sqrt{2}}{\pi} \omega^{3/2} R_2 e^{\frac{\omega}{2}[-R_2^2 + R_3^2]} \\ \frac{\omega}{\sqrt{8\pi}} (-2+4\alpha R_i^2) e^{\frac{-\alpha}{2}[R_i^2 - R_3^2]} & \frac{\sqrt{2}}{\pi} \omega^{3/2} R_2 e^{\frac{\omega}{2}[-R_2^2 + R_3^2]} & \omega\pi^{1/4} e^{-\alpha R_3^2} \end{vmatrix}$$

بعد از محاسبه‌ی ماتریس چگالی، آن را قطری کرده، ویژه مقادیر را به دست آورده و سپس با استفاده از رابطه‌ی (۸) می‌توان آنتروپی فون-نیومن را به صورت زیر محاسبه کرد:

$$\begin{vmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow S(\rho) = -\sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i = \lambda_1 \log_2 \lambda_1 - \lambda_2 \log_2 \lambda_2 - \lambda_3 \log_2 \lambda_3$$

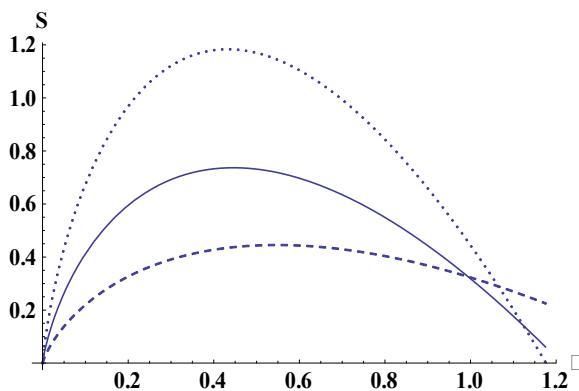
برای محاسبه‌ی ماتریس چگالی، مقادیر  $R_1, R_2$  و  $R_3$  که بر حسب مختصات سه ذره می‌باشد را می‌توان برای یک اتم سه ذره‌ای مانند لیتیوم به صورت زیر در نظر گرفت. اتم لیتیوم، عنصر شیمیایی است با نشان  $\text{Li}$  و عدد اتمی ۳ که در جدول تناوبی به همراه فلزات قلیایی در گروه ۱ قرار دارد. ساختار الکترونی آن به صورت  $1s^2, 2s^1$  می‌باشد و در بیرونی ترین لایه‌ی خود یک الکترون دارد. شعاع اتمی آن ۱۶۷ پیکومتر می‌باشد.



$R_1 = 0.025114 \times 10^{-5}$ ,  $R_2 = 0.01183 \times 10^{-5}$ ,  $R_3 = -0.01555 \times 10^{-5}$   
 حال با استفاده از مقادیر بالا می‌توان آنتروپی را برای حالت‌های مختلف بر حسب  $\omega$  به دست آورد، که در زیر آمده است.

$$\begin{aligned} |010\rangle &\Rightarrow 0.44427\omega - 1.89552\omega \log_2 \omega \\ |011\rangle &\Rightarrow 0.32292\omega - 0.56418\omega \log_2 \omega \\ |210\rangle &\Rightarrow 0.31831\omega(-1.14472 + \log_2 \omega) \end{aligned}$$

همان‌طور که مشاهده می‌شود درهم تنیدگی هر کدام از سه حالت معروفی شده در بالا وابسته به بسامد میدان هماهنگ خارجی است. در شکل (۱)، چگونگی تغییرات آنتروپی درهم تنیدگی بر حسب بسامد رسم شده است.



شکل ۱ تغییرات آنتروپی بر حسب بسامد میدان هماهنگ خارجی، نقطه چین حالت  $|010\rangle$ ، خط چین حالت  $|011\rangle$  و خط توپر حالت  $|210\rangle$  است.

## ۵. نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از ماتریس چگالی، و محاسبه‌ی آنتروپی ون-نیومن، میزان درهم تنیدگی حالت‌های معروفی شده محاسبه شد. ماتریس چگالی دارای تمام اطلاعاتی است که می‌توان از دستگاه کوانتومی کسب نمود. آنتروپی فون-نیومن برای سامانه‌های حالت خالص کارایی بیشتری



نسبت به حالت‌های آمیخته دارد. با درنظر گرفتن درهم‌تندی<sup>گ</sup> تولید شده توسط درجه‌ی آزادی فضایی، درهم‌تندی<sup>گ</sup> حالت پایه سامانه‌های بس-ذره‌ای با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی بررسی شد. در نظریه‌ی تابعی چگالی اندازه‌گیری درهم‌تندی<sup>گ</sup> تابعی از مقدار میانگین مشاهده‌پذیر است. این روش یک رابطه‌ی مستقیمی را بین درهم‌تندی<sup>گ</sup> و انرژی حالت پایه‌ی سامانه‌ی کوانتمی با استفاده از ضرایب میدان برقرار می‌کند که به یک رابطه‌ی قابل توجهی بین درهم‌تندی<sup>گ</sup> و گذار فاز کوانتمی منجر می‌شود. با توجه به سنجه‌ی مورد استفاده (آنتروپی) در این کار برای بررسی درهم‌تندی<sup>گ</sup> اتم موشینسکی تاکنون محاسباتی انجام نگرفته است. همچنین، آنتروپی اتم لیتیوم برای حالت‌های مختلف بر حسب<sup>(۷)</sup> محاسبه شد و مشاهده شد که درهم‌تندی<sup>گ</sup> هر کدام از سه حالت معرفی شده وابسته به بسامد میدان هماهنگ خارجی است.

## ۶. تقدیر و تشکر

این تحقیق توسط دانشگاه شهید چمران اهواز، ایران [SCU.SP1400.490] پشتیبانی شد.

## منابع

- [1] De Greef, Jacqueline, "Entanglement and Energy Level Crossing of Spin and Fermi Hamilton Operators", *University of Johannesburg (South Africa)*, 2013.
- [2] H. salehi and N. Binandeh "An Investigation of Entanglement in Helium and Helium-like Atoms", *Iranian Journal of Applied Physics* **11**(1), 71-81, 2021, <https://doi.org/10.22051/ijap.2021.30106.1145>
- [3] P. A. Bouvrie et al. "Quantum entanglement in exactly soluble atomic models: the Moshinsky model with three electrons, and with two electrons in a uniform magnetic field", *The European Physical Journal D* **66**.1, 2012, <https://doi.org/10.1140/epjd/e2011-20417-4>
- [4] R. J. Yanez, A. R. Plastino and J. S. Dehesa, "Quantum entanglement in a soluble two-electron model atom", *The European Physical Journal D* **56**, 141-150, 2010, <https://doi.org/10.1140/epjd/e2009-00270-x>
- [5] A. P. Majtey, A. R. Plastino, and J. S. Dehesa, "The Relationship between entanglement, energy, and level degeneracy in two-electron systems", *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **45**, 115309-115310, 2012, <https://doi.org/10.1088/1751-8113/45/11/115309>
- [6] Y. C. Lin, C. Y. Lin, and K. Ho, "Spatial entanglement in two-electron atomic systems", *Physical Review A* **87**, 022316-022321, 2013, <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.87.022316>
- [7] R. O. Esquivel, S. L'opez-Rosa and J. S. Dehesa, "Correlation energy as a measure of non-locality: Quantum entanglement of helium-like systems", *Europhysics Letters*, 111- 116, 2015, <https://doi.org/10.1209/0295-5075/111/40009>



- [8] R. Islam•R.Ma• P. Preiss •M.Eric • A. Lukin•M.Rispoli and M. Greiner, " Measuring entanglement entropy in quantum many-body system", *Nature*, 528 ,77-83, 2015, <https://doi.org/10.1038/nature15750>
- [9] Y. Lin“ D. R. Leibrandtm• D. Leibfried•and C.Wen Chou," Quantum entanglement between an atomand a molecule", *Nature* **581** ,253-278, 2020, <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2257-1>
- [10] J.H.Warner, M.H. Rummeli, A. Bachmatiuk, and B. Buchner, "Atomic resolution imaging and topography of boron nitride sheets produced by chemical exfoliation", *ACS nano* **4**(3), 1299-1304, 2010, <https://doi.org/10.1021/nn901648q>
- [11] J. P. Dahi," Moshinsky atom and density functional theory — A phase space view1", *Canadian Journal of Chemistry* **87**(7), 784-789, 2009, <https://doi.org/10.1139/V09-002>
- [12] H. Y. Yuan ,and•M.H.Yung, "Anomalous spin entanglement in nonequilibrium systems" *Phy.Rev A*, **98**, 022125, 2018, <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.98.022125>
- [13] P.-O. Löwdin, "Quantum Theory of Many-Particle Systems. II. Study of the Ordinary Hartree-Fock Approximation ", *Phys. Rev.*, **97**, 1490, 1955, <https://doi.org/10.1103/PHYSREV.97.1490>
- [14] C. N. Yang, "Concept of Off-Diagonal Long-Range Order and the Quantum Phases of Liquid He and of Superconductors", *Rev. Mod. Phys.* **34**, 694-704, 1964, <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.34.694>
- [15] M. Gharib naseri, and H. Salehi, "The effect on entanglement potential using the density-functional theory", *Journal of modern Research physics* **2**(1) ,63-72, 2017, <http://dx.doi.org/10.52547/jmrph.2.1.63>



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).

