بیست و یکمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و هفتمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۲۳ تا ۲۵ دی ماه ۱۳۹۳، دانشگاه شهید بهشتی

Downloaded from opsi.ir at 13:09 +0330 on Wednesday November 14th 2018

سهم دست‌سانی اتم در پتانسیل کازیمیر-پولدر در حضور کره‌ی دی‌الکتریک

سعیده اسفندیارپور و حسن صفری

گروه فیزیک و فوتونیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، ماهان، کرمان

چکیده – در مقاله‌ی حاضر، مولفه‌ی دست‌سانی پتانسیل کازیمیر-پولدر برای سیستمی شامل یک اتم دست‌سان و یک کره‌ی دی‌الکتریک بررسی شده است. نشان داده شده است که دست‌سان بودن اتم سهمی در پتانسیل کازیمیر-پولدر سیستم اتم دست‌سان-کره‌ی دی‌الکتریک، ندارد. این نتیجه به نوبه‌ی خود اشاره به این دارد که دست‌سانی یک اتم سهمی در برهمکنش وان‌دروالس آن با یک اتم نادست‌سان ندارد.

کلید واژه- اتم دست‌سان، پتانسل کازیمیر-پولدر، برهمکنش وان‌دروالس، تانسور گرین، کره‌ی دی‌الکتریک.

Chirality contribution to the Casimir-Polder potentail of an atom in the presence of a dielectric sphere

Saideh Esfandiarpour and Hassan Safari

Physics and Photonic Department, Graduate University of Advanced Technology, Mahan, Kerman

Abstract- In this paper, the chiral components of the Casimir-Polder potential of an atomic system in the presence of a dielectric sphere is investigated. It is shown that the chirality of the atom does not contribute to its interaction with a dielectric sphere. This, in turn, implies that the van der Waals interaction between two atoms is not affected by the chirality of one of them with the other one being achiral.

Keywords: Casimir-Polder potential, Chiral atom, Dielectric sphere, Green tensor, van der Waals interaction.

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

Downloaded from opsi.ir at 13:09 +0330 on Wednesday November 14th 2018

۱- مقدمه

نیروی کازیمیر-پولدر (CP) که حاصل افت و خیزهای خلاء کوانتومی (میدان الکترومغناطیسی در حالت پایه) است، عبارت است از نیروی وارد بر سیستم اتمی (یا مولکولی) فاقد قطبش و بار الکتریکی خالص در حضور اجسام مغناطوالکتریک. این نیرو می‌تواند از شیب پتانسیلی نرده‌ای به همین نام به دست آید و اهمیتی اساسی در علم سطوح، زیست‌شناسی، و فناوری نانو دارد؛ با توجه به کوچک شدن روزافزون ابزار و ادوات در عصر حاضر، اهمیت وجود این نیروها (چه مفید و چه مزاحم) با گذشت زمان، همواره بیشتر از پیش آشکار می‌شود. اولین محاسبه از این دست، پیش از فرمول‌بندی توسط کازیمیر و پولدر، محاسبه‌ی نیروی کوتاه‌برد بین یک اتم و یک دیواره‌ی رسانای تخت بود که توسط لنارد-جونز انجام گرفت [۱]. این نیرو، برهمکنش دوقطبی القا شده در اتم توسط میدان افت و خیزی خلاء با تصویر دوقطبی اتم در دیواره در نظر گرفته شد. اهمیت اصلی کار کازیمیر و پولدر، محاسبات کاملا کوانتومی و به‌کارگیری نظریه‌ی اختلال (مرتبه دوم) بود که آنان را قادر ساخت فرمول لنارد-جونز را به فاصله دلخواه اتم-دیواره تعمیم دهند [۲].

محاسبه اختلالی کازیمیر و پولدر به اتم‌های الکتریکی محدود می‌شد که در آن‌ها، گذارهای اتمی تنها از حیث دوقطبی الکتریکی مجاز هستند (اتم‌های الکتریکی). به دست آوردن فرمول پتانسیل CP در حضور آرایش دلخواهی از محیط دی‌الکتریک پیرامون اتم [۳]، و سپس در مورد اتم‌های پارامغناطیس که در آن‌ها گذارهای دوقطبی مغناطیسی نیز مجاز می‌شوند [۴]، از جمله تلاش‌های بعدی برای کلی‌تر کردن فرمول پتانسیل CP می‌باشند. در اتم‌های دارای مرکز تقارن هندسی (اتم‌های نادست‌سان)، هر یک از گذارهای اتمی یا دوقطبی الکتریکی-مجاز هستند یا دوقطبی مغناطیسی-مجاز. در نتیجه، پتانسیل CP به قسمت‌های الکتریکی و مغناطیسی تفکیک می‌شود. اما در اتم‌های دست‌سان همچون آمینواسیدها و قندها که خواص منحصر به فرد، و فراوانی بالایی در ترکیبات زیستی و شیمیایی دارند، هر یک از گذارهای اتمی می‌تواند دارای هر دو گشتاور دوقطبی الکتریکی و مغناطیسی باشد. از این رو، علاوه بر قسمت‌های الکتریکی و مغناطیسی، قسمتی نیز سهم دست‌سانی اتم در پتانسیل CP خواهد بود که یک فرمول کلی برای آن در مرجع [۵] داده شده است.

در این مقاله، پس از معرفی رابطه‌ی پتانسیل CP یک اتم دست‌سان در حضور آرایش دلخواهی از اجسام دی‌الکتریک، سهم دست‌سانی اتم در این پتانسیل را در حضور یک کره دی‌الکتریک بررسی می‌کنیم. با در دست داشتن این پتانسیل، می‌توان برهمکنش اتم-اتم (وان‌درووالس) بین یک اتم الکتریکی و یک اتم دست‌سان را با یک حدگیری مناسب از اندازه‌ی کره به دست آورد.

۲- فرمول پتانسیل CP مولکول‌های دست‌سان

اتم همسانگرد A را که در حالت پایه‌ی انرژی خود و در موقعیت $\vec{r}_A$ قرار دارد در نظر می‌گیریم. سهم دست‌سانی اتم در پتانسیل پاشندگی‌اش، در حضور آرایش دلخواهی از اجسام دی‌الکتریک، با استفاده از نظریه اختلال مرتبه دوم، به صورت زیر حاصل می‌شود [۵]

$$U(\vec{r}_A) = -\frac{\mu_0\hbar}{\pi}\int_0^\infty d\xi\,\xi\,X(\mathrm{i}\xi)\mathrm{tr}\Big[\nabla\times\vec{G}^{(1)}(\vec{r},\vec{r}_A,\mathrm{i}\xi)\Big]_{\vec{r}=\vec{r}_A} \quad (۱)$$

که در آن، تمام ویژگی‌های الکتریکی و هندسی محیط مادیِ پیرامون اتم از طریق تانسور $\vec{G}^{(1)}$ که قسمت پراکندگی تانسور گرین $\vec{G}$ است، وارد محاسبات می‌شوند. تانسور گرین $\vec{G}$ از معادله دیفرانسیل

$$\nabla\times\nabla\times\vec{G}(\vec{r},\vec{r}',\omega) - \varepsilon(\vec{r},\omega)\frac{\omega^2}{c^2}\vec{G}(\vec{r},\vec{r}',\omega) = \vec{I}\delta(\vec{r}-\vec{r}') \quad (۲)$$

پیروی می‌کند که در آن c سرعت نور و $\varepsilon(\vec{r},\omega)$ پذیرفتاری الکتریکی نسبی محیط است. در رابطه (۱)، $X(\omega)$ قطبش‌پذیری متقاطع الکتریکی-مغناطیسی اتم در حالت پایه است و با رابطه‌ی

$$X(\omega) = \frac{2}{3\hbar}\sum_k \frac{(\omega+\mathrm{i}\varepsilon)\left|\vec{d}_{k0}\cdot\vec{m}_{0k}\right|}{(\omega+\mathrm{i}\varepsilon)^2-\omega_{k0}^2} \quad (۳)$$

تعریف می‌شود که در آن $\vec{d}_{ij}$، $\vec{m}_{ij}$ و ω_{ij}، به‌ترتیب، گشتاور دوقطبی الکتریکی، گشتاور دوقطبی مغناطیسی و فرکانس گذار اتمیِ $|j\rangle\to|i\rangle$ هستند ($\hbar$، ثابت پلانک

Downloaded from opsi.ir at 13:09 +0330 on Wednesday November 14th 2018

بخش بر 2π).

برای محاسبه سهم دست‌سانی در پتانسیل CP یک اتم در حضور جسمی با شکل هندسی معین، نیاز به در اختیار داشتن شکل صریح تانسور گرین جهت قرار دادن در رابطه (۱) داریم. در بخش بعد این پتانسیل را در حضور یک کره‌ی دی‌الکتریک بررسی می‌کنیم.

۳- پتانسیل CP اتم دست‌سان در حضور کره‌ی دی‌الکتریک

با در نظر گرفتن اتم دست‌سان A در فاصله r از مرکز کره‌ای دی‌الکتریک و همگن با ضریب گذردهی $\varepsilon(\omega)$ و شعاع R $(r>R)$ و با انتخاب مرکز کره به عنوان مبدأ دستگاه مختصات کروی، قسمت پراکندگی تانسور گرین به صورت

$$\vec{G}^{(1)}(\vec{r},\vec{r}',\omega)=\frac{\mathrm{i}k_0}{4\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{2n+1}{n(n+1)}\sum_{m=0}^{n}\frac{(n-m)!}{(n+m)!}(2-\delta_{0m})$$
$$\times\sum_{p=\pm1}\Big[B_n^M(\omega)\vec{M}_{n,m,p}(\vec{r},k_0)\vec{M}_{n,m,p}(\vec{r}',k_0)$$
$$+B_n^N(\omega)\,\vec{N}_{n,m,p}(\vec{r},k_0)\vec{N}_{n,m,p}(\vec{r}',k_0)\Big] \qquad (۴)$$

نوشته می‌شود [۶]. در رابطه (۴)، $k_0=\omega/c$ و

$$B_m^M=\frac{[z_1j_m(z_1)]'\,j_m(z_0)-[z_0j_m(z_0)]'\,j_m(z_1)}{[z_0h_m^{(1)}(z_0)]'\,j_m(z_1)-[z_1j_m(z_1)]'\,h_m^{(1)}(z_0)}, \qquad (۵)$$

$$B_m^N=\frac{[z_1j_m(z_1)]'\,j_m(z_0)-\varepsilon[z_0j_m(z_0)]'\,j_m(z_1)}{\varepsilon[z_0h_m^{(1)}(z_0)]'\,j_m(z_1)-[z_1j_m(z_1)]'\,h_m^{(1)}(z_0)}, \qquad (۶)$$

که در آن‌ها، $j_m(z)$ تابع بسل کروی نوع اول، $z_0=Rk_0$ و $z_1=\sqrt{\varepsilon}\,z_0$، و علامت پریم به معنای مشتق نسبت به شناسه است. بردارهای $\vec{M}_{n,m,p}$ و $\vec{N}_{n,m,p}$ بردار موج‌های کروی زوج $(p=1)$ و فرد $(p=-1)$ هستند که با معرفی تابع $\psi_{p,m,n}$ بر حسب تابع هنکل کروی $h_n^{(1)}(x)$ و توابع لژاندر $P_n^m(x)$ به صورت

$$\psi_{p,m,n}=h_n^{(1)}(k_0r)P_n^m(\cos\theta)$$
$$\times\left[\delta_{p,1}\cos(m\varphi)+\delta_{p,-1}\sin(m\varphi)\right], \qquad (۷)$$

به شکل زیر تعریف می‌شوند:

$$\vec{M}_{n,m,p}(\vec{r},k_0)=\nabla\times\left(\vec{r}\psi_{p,m,n}\right), \qquad (۸)$$

$$\vec{N}_{n,m,p}(\vec{r},k_0)=\frac{1}{k_0}\nabla\times\nabla\times\left(\vec{r}\psi_{p,m,n}\right). \qquad (۹)$$

به سادگی می‌توان دید که این توابع با روابط زیر به هم مربوط می‌شوند:

$$\vec{N}_{n,m,p}(\vec{r},k)=\frac{1}{k}\nabla\times\vec{M}_{n,m,p}(\vec{r},k), \qquad (۱۰)$$

$$\vec{M}_{n,m,p}(\vec{r},k)=\frac{1}{k}\nabla\times\vec{N}_{n,m,p}(\vec{r},k). \qquad (۱۱)$$

در محاسبه‌ی پتانسیل با استفاده از رابطه (۱) به عناصر قطری تانسور $\nabla\times\vec{G}^{(1)}$ نیاز داریم. به این منظور نمایش ماتریسی این تانسور را در پایه‌های $\tilde{e}_r$، $\tilde{e}_\theta$ و $\tilde{e}_\varphi$ که به‌ترتیب، بردارهای واحد شعاعی، قطبی و سمتی هستند، در نظر می‌گیریم. برای مثال، برای عنصر ماتریسی $\theta\theta$، با استفاده از روابط (۱۰) و (۱۱) و انجام عملیات جبری طولانی ولی سرراست، به دست می‌آوریم:

$$\left[\nabla_1\times\vec{G}^{(1)}(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\omega)\right]_{\theta\theta}=\frac{\mathrm{i}k_0}{4\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{2n+1}{n(n+1)}\sum_{m=0}^{n}C_{nm}$$
$$\times\Big\{B_n^N(\omega)\frac{m}{\sin\theta_1}\frac{1}{\beta}\left[\beta h_n^{(1)}(\beta)\right]'h_n^{(1)}(\alpha)P_n^m(x)P_n^{m\prime}(y)$$
$$-B_n^M(\omega)\frac{m}{\sin\theta_2}\frac{1}{\alpha}\left[\alpha h_n^{(1)}(\alpha)\right]'h_n^{(1)}(\beta)P_n^{m\prime}(x)P_n^m(y)\Big\}\sin(m\bar{\varphi}) \qquad (۱۲)$$

که در آن $\bar{\varphi}=\varphi_1-\varphi_2$، $x=\cos\theta_1$، $y=\cos\theta_2$، $\alpha=k_0r_1$، $\beta=k_0r_2$. اگرچه می‌توان جمع روی m موجود در رابطه (۱۲) را با استفاده از قضیه‌ی جمع برای هماهنگ‌های کروی به صورت بسته نوشت، ولی برای آن چه مورد نظر ماست، کافی است، طبق رابطه‌ی (۱)، قرار دهیم $\vec{r}_1=\vec{r}_2=\vec{r}_A$. با این کار $\bar{\varphi}=0$ و در نتیجه، این عنصر ماتریسی صفر می‌شود. به تعویق انداختن اِعمالِ شرط $\vec{r}_1=\vec{r}_2=\vec{r}_A$ تنها حجم محاسبات را بالا می‌برد و نکته آموزنده‌ای ندارد. به سادگی می‌توان دید که دو عنصر ماتریسی قطری دیگر نیز صفر هستند و بنابراین، خاصیت دست‌سانی اتم، هنگامی که اتم در حضور یک کره‌ی دی‌الکتریک قرار دارد، سهمی در پتانسیل پاشندگی آن ندارد.

این نتیجه‌ی جالب، مستقل از شعاع کره و فاصله اتم تا مرکز کره است. البته، در حد فاصله‌ی نزدیک، این نتیجه تا جایی معتبر است که توصیف ماکروسکوپی از ساختار مولکولی کره همچنان اعتبار داشته باشد. به ویژه این که، در حد شعاع بزرگ برای کره، که می‌توان کره را با یک نیم‌فضای دی‌الکتریک جایگزین کرد، و نیز در حد کره کوچک که با استفاده‌ی مناسب از رابطه‌ی کلاوسیوس-ماساتی می‌توان کره را با یک اتم الکتریکی جایگزین کرد

Downloaded from opsi.ir at 13:09 +0330 on Wednesday November 14th 2018

(برای مقایسه مرجع [۷] را ببینید) این نتیجه همچنان پابرجاست است.

۴- نتیجه‌گیری

با به‌کارگیری فرمول سهم دست‌سانی یک اتم در پتانسیل کازیمیر-پولدر، به این نتیجه رسیدیم که خاصیت دست‌سانی اتم تاثیری در این پتانسیل در حضور یک کره دی‌الکتریک ندارد. از آن‌جا که فاصله اتم از مرکز کره و نیز اندازه‌ی شعاع کره در نتیجه به‌دست آمده تاثیری ندارد، دریافتیم که در پتانسیل برهمکنش دو اتم، هنگامی که یکی از اتم‌ها نادست‌سان است، دست‌سان بودن دیگری تاثیری در مقدار نیروی برهمکنش آن‌ها (پتانسیل وان‌دروالس) نخواهد داشت.

آن چه می‌تواند در پتانسیل یک اتم دست‌سان با یک کره مورد بررسی بعدی قرار گیرد، پتانسیل حاصل از دست‌سانی در حضور کره‌ای است که پاسخ آن به بخش‌های الکتریکی و مغناطیسی میدان، پاسخی متقاطع باشد؛ به این معنی که پاسخ آن به میدان الکتریکی(مغناطیسی)، یک میدان مغناطیسی(الکتریکی) باشد. در این صورت، باید تحقیق کرد که آیا قرار دادن تانسور گرین مربوط به چنین کره‌ای در سمت چپ رابطه (۱۲) و همچنین محاسبه دیگر عناصر قطری آن، به نتیجه‌ای غیر صفر خواهد انجامید یا خیر.

مراجع

[1] Lennard–Jones J. E., *Processes of Adsorption and Diffusion on Solid Surfaces*, **Trans. Faraday Society** 28, (1932) 333.

[2] Casimir H. B. G. and Polder D., *The Influence of Retardation on the London-van der Waals Forces*, **Phys. Rev.** 73 (1948) 360.

[3] McLachlan A. D.,*Three Body Dispersion Forces*, **Mol. Phys.** 6, (1963) 423.

[4] Feinberg G. and Sucher J.,*General Theory of The van der Waals Interaction*, **Phys. Rev. A** 2 (1970) 2395.

[۵] صفری ح.، عزیزی س.، کریم‌پور ر. و بومان ا. ی.، *سهم دست‌سانی در پتانسیل پاشندگی یک اتم حالت پایه در حضور یک ماده مغناطواکتریک*، **هفدهمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران**، ۱۳۸۹

[6] Safari H., et al., *Van der Waals Potentials of Paramagnetic Atoms*, **Phys. Rev. A**, 78 (2008) 062901.

[7] Safari H. et al., *Interatomic van der Waals Potential in the Presence of a Magnetoelectric Sphere*, **Phys Rev. A** 77 (2008) 053824.