

پتانسیل برهم‌کنش وان‌دروالس دو مولکول دست‌سان در حضور محیط مغناطو الکتریک

حسن صفری و محمدجواد فقیهی

گروه فوتونیک، دانشکده علوم و فناوری‌های نوین، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، ماهان، کرمان

چکیده - رابطه‌ی پتانسیل برهم‌کنش بین دو مولکول دست‌سان که پیش‌تر در محیطی تهی از ماده مغناطو الکتریکی داده شده بود، در کار حاضر، با به‌کارگیری نظریه‌ی اختلال مرتبه‌ی چهارم، به حالتی که دو اتم در حضور آرایش دلخواهی از مواد مغناطو الکتریک قرار دارند، تعمیم داده می‌شود. ویژگی‌های هندسی و مغناطو الکتریکی محیط مادی با تابع گرین در فرمول گنجانده می‌شوند. نشان داده می‌شود که در حالت خاصی که دو اتم در فضای تهی قرار دارند، فرمول به دست آمده با روابط پیشین سازگار است.

کلید واژه - اختلال مرتبه چهارم، پتانسیل وان‌دروالس، تابع گرین، قطبش‌پذیری متقاطع، مولکول دست‌سان.

Van der Waals Interaction Potential between Two Chiral Molecules in the Presence of Magnetolectric Environment

Hassan Safari and Mohammad Javad Faghihi

Department of Photonics, Faculty of New Science & Technology, Graduate University of Advanced Technology, Mahan, Kerman

Abstract- Previously obtained formula of the interaction potential between two chiral molecules being located in an infinitely extended free-space region, is generalized to two atoms in the presence of an arbitrary arrangement of magneto-electric bodies, using fourth-order perturbation theory. The geometric and magnetoelectric properties of the media are included via the Green function. It is shown that the obtained formula tends to the one given for the free-space case, once the two atoms are considered to be located in free space.

Keywords: Chiral molecules, Cross polarizability, Fourth-order perturbation, Green function, van der Waals potential.

۱- مقدمه

که در آن، تانسورهای $\mathbf{G}_e$ و $\mathbf{G}_m$ بر حسب تابع گرین $\mathbf{G}$ که از معادله دیفرانسیل

$$\nabla \times \frac{1}{\mu(\mathbf{r}, \omega)} \nabla \times \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \mathbf{I} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3)$$

($\mathbf{I}$ ، تانسور واحد) پیروی می‌کند، به صورت زیر نوشته می‌شوند:

$$\mathbf{G}_e(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = i \frac{\omega^2}{c^2} \sqrt{\frac{\hbar}{\pi \varepsilon_0}} \text{Im} \varepsilon(\mathbf{r}', \omega) \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$$

$$\mathbf{G}_m(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\hbar}{\pi \varepsilon_0}} \text{Im} \frac{1}{\mu(\mathbf{r}', \omega)} \times [\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \times \vec{\nabla}'] \quad (4)$$

عملگر $\hat{\mathbf{f}}_\lambda$ عملگر نابودی برانگیختگی‌های میدان است که برچسب آن، دلالت بر ماهیت الکتریکی و مغناطیسی چشمه‌ی نوفه‌ای دارد. روابط جابه‌جایی حاکم بر این عملگر به صورت زیرند:

$$[\hat{\mathbf{f}}_\lambda(\mathbf{r}, \omega), \hat{\mathbf{f}}_{\lambda'}^\dagger(\mathbf{r}', \omega')] = I \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\omega - \omega'),$$

$$[\hat{\mathbf{f}}_\lambda(\mathbf{r}, \omega), \hat{\mathbf{f}}_{\lambda'}(\mathbf{r}', \omega')] = 0.$$

(۵)

حالت پایه‌ی میدان با رابطه

$$\hat{\mathbf{f}}_\lambda(\mathbf{r}, \omega) | \{0\} \rangle = 0, \quad \forall \lambda, \mathbf{r}, \omega \quad (6)$$

تعریف می‌شود و ویژگی‌های برانگیخته با تأثیر پی‌درپی عملگر آفرینش برانگیختگی‌های میدان، $\hat{\mathbf{f}}_\lambda^\dagger$ ، به وجود می‌آیند. برای مثال،

$$\hat{\mathbf{f}}_\lambda^\dagger(\mathbf{r}, \omega) | \{0\} \rangle = | \mathbf{1}_\lambda(\mathbf{r}, \omega) \rangle,$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{\mathbf{f}}_\lambda^\dagger(\mathbf{r}, \omega) \hat{\mathbf{f}}_{\lambda'}^\dagger(\mathbf{r}', \omega') | \{0\} \rangle = | \mathbf{1}_\lambda(\mathbf{r}, \omega), \mathbf{1}_{\lambda'}(\mathbf{r}', \omega') \rangle.$$

(۷)

لازم به ذکر است که تمام ویژگی‌های هندسی و مغناطیسی الکتریکی محیط مادی به واسطه گذردهی الکتریکی نسبی $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)$ و تراوایی مغناطیسی نسبی $\mu(\mathbf{r}, \omega)$ در تابع گرین گنجانده شده‌اند.

۳- هامیلتونی سامانه

برای سامانه‌ای متشکل از دو اتم A و B که به ترتیب

برهم‌کنش و اندروالس که بین دو اتم یا مولکول (در این مقاله واژه اتم را به کار می‌بریم) خنثی و ناقطبیده است از جمله برهم‌کنش‌های پاشندگی است و ریشه در افت و خیز میدان الکترومغناطیسی خلأ کوانتومی دارد. محاسبه این نیرو که در ابتدا تنها برای اتم‌های الکتریکی (که گذارهای اتمی آن‌ها تنها گشتاور دوقطبی الکتریکی دارند) و با فرض قرار گرفتن اتم‌ها در حالت پایه و در فضای تهی از ماده مغناطیسی انجام شده بود [۱]، با گذشت زمان به اتم‌های مغناطیسی (که گذارها گشتاور دوقطبی مغناطیسی نیز دارند) [۲]، و اتم‌های برانگیخته تعمیم یافت [۳].

در لحاظ کردن ویژگی مغناطیسی برای اتم‌ها، محاسبات ابتدایی به اتم‌های نادرست‌مان محدود شده بود؛ اتم‌هایی که هر گذار آن‌ها یا تنها گشتاور دوقطبی الکتریکی دارد یا گشتاور دوقطبی مغناطیسی. در حالی که در اتم‌های دست‌مان، از آن‌جا که ویژگی‌های اتمی الزاماً ویژه حالات عملگر پارینه نیستند، گذارهای اتمی می‌توانند هر دو گشتاور دوقطبی الکتریکی و مغناطیسی را داشته باشند. این ویژگی سهمی نیز در برهم‌کنش اتم‌ها خواهد داشت که پیش‌تر، با فرض قرار گرفتن اتم‌ها در فضای تهی محاسبه شده است [۴]؛ فرضی که در این کار پژوهشی کنار خواهیم گذاشت.

در این مقاله، پس از معرفی فرمول‌بندی استفاده شده برای کوانتس میدان الکترومغناطیسی، نتیجه‌ی حاصل از به‌کارگیری اختلال مرتبه چهارم در محاسبه پتانسیل برهم‌کنش دو اتم دست‌مان در حضور ماده مغناطیسی الکتریکی، به همراه توضیحی اجمالی از نحوه محاسبه، ارائه خواهد شد. سپس، به عنوان یک حالت خاص، محیط پیرامون اتم‌ها را تهی از ماده در نظر خواهیم گرفت و نشان خواهیم داد که نتیجه‌ی به دست آمده با کارهای پیشین [۴] همخوانی دارد.

۲- کوانتس میدان

برای میدان الکترومغناطیسی متأثر از اجسام پیرامون، از طرح کوانتشی استفاده می‌کنیم که در آن مؤلفه بسامدی میدان الکتریکی، $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$ ، تعریف‌شده با رابطه‌ی

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) = \int_0^\infty d\omega \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) + \text{H.c.} \quad (1)$$

بر حسب عملگرهای پایه $\hat{\mathbf{f}}_\lambda(\mathbf{r}, \omega)$ بیان می‌شود که عبارت است از [۵]

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = \sum_{\lambda=e,m} \int d^3r \mathbf{G}_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot \hat{\mathbf{f}}_\lambda(\mathbf{r}', \omega) \quad (2)$$

در موقعیت‌های $\mathbf{r}_A$ و $\mathbf{r}_B$ در حضور آرایش دلخواهی از اجسام مغناطیوالکتریکی قرار گرفته‌اند، می‌توان هامیلتونی را به صورت

$$\hat{H} = \sum_{A'=A,B} \hat{H}_{A'} + \sum_{A'=A,B} \hat{H}_{A'F} \quad (۸)$$

در نظر گرفت [۶] که در آن، هامیلتونی اتم A'

$$\hat{H}_{A'} = \sum_n E_n^{A'} |n_{A'}\rangle \langle n_{A'}|, \quad (۹)$$

و $\hat{H}_{A'F}$ هامیلتونی برهم‌کنش اتم (A')-میدان است که بر حسب عملگرهای دوقطبی الکتریکی $\hat{\mathbf{d}}$ و مغناطیسی $\hat{\mathbf{m}}$ به شکل زیر نوشت [۷]:

$$\hat{H}_{A'F} = -\hat{\mathbf{d}}_{A'} \cdot \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_{A'}) - \hat{\mathbf{m}}_{A'} \cdot \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}_{A'}). \quad (۱۰)$$

اشاره به دو نکته در اینجا ضروری است؛ یکی این‌که در رابطه (۸)، برهم‌کنش مستقیم دو اتم، به دلیل نوشتن هامیلتونی در شکل تزویج چندقطبی در جملات دیگر نهان است. دیگر این‌که، در رابطه (۹)، $|n_{A'}\rangle$ ویژه‌محلان انرژی (مختل‌نشده) اتم و $E_n^{A'}$ ویژه‌مقدار متناظر با آن است. انرژی برهم‌کنش را می‌توان با در نظر گرفتن برهم‌کنش اتم-میدان به عنوان هامیلتونی اختلالی، و محاسبه جابه‌جایی وابسته به موقعیت در ویژه مقدار انرژی در اثر این اختلال به دست آورد [۱].

۴- محاسبه‌ی پتانسیل برهم‌کنش

با به کار بردن هامیلتونی برهم‌کنش (۸)، اولین جمله‌ی غیر صفر اختلال که سهمی در برهم‌کنش بین دو اتم دارد، اختلال مرتبه‌ی چهارم است [۱]، که با در نظر گرفتن هر دو اتم و نیز میدان الکترومغناطیسی در حالت پایه، $|0\rangle$ ، عبارت است از

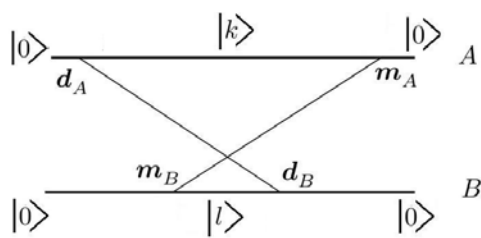
$$\Delta E_{(4)} = - \sum_{I,II,III \neq 0} \frac{\langle 0 | \hat{H}_1 | III \rangle \langle III | \hat{H}_1 | II \rangle}{(E_{III} - E_0)(E_{II} - E_0)} \times \frac{\langle II | \hat{H}_1 | I \rangle \langle I | \hat{H}_1 | 0 \rangle}{(E_I - E_0)} \quad (۱۱)$$

($\hat{H}_1 = \hat{H}_{AF} + \hat{H}_{BF}$). قابل توجه است که جمع موجود در این رابطه، روی هر دو برچسب گسسته مانند ویژه حالات اتمی و پیوسته (انتگرال) مانند بسامد است. می‌توان، به عنوان مثال، عنصر ماتریسی

$\langle II | \hat{H}_1 | I \rangle$ را به رویدادی نسبت داد که سامانه، تحت تأثیر هامیلتونی $\hat{H}_1$ گذاری از حالت $|I\rangle$ به حالت $|II\rangle$ انجام می‌دهد. با توجه به این که $\hat{H}_1$ شامل ترکیب خطی از عملگرهای آفرینش و نابودی فوتون است و از طرفی عملگرهای دوقطبی الکتریکی و مغناطیسی در پایه‌ی ویژه‌حالت‌های اتمی عنصر قطری ندارند، می‌توان دید که صورت کسر داخل علامت جمع، با انتخاب‌های گوناگون برای حالت‌های میانی $|I\rangle$ ، $|II\rangle$ و $|III\rangle$ به فرایندهایی منطبق می‌شود که در هر فرایند، هر اتم دو گذار مخالف هم، که هر یک با جذب یا گسیل یک فوتون همراه است، انجام می‌دهد.

از آنجا که پتانسیل برهم‌کنش برای اتم‌های نادست‌سان در مرجع [۷] محاسبه شده است، در این قسمت، تنها سهم حاصل از دست‌سانی اتم‌ها را در نظر می‌گیریم، به این معنی که دو گذاری که اتم در یک فرایند انجام می‌دهد، یکی گذار دوقطبی الکتریکی باشد و دیگری مغناطیسی. در محاسبه سمت راست رابطه (۱۱)، با تعداد جمله‌های زیادی (۴۸ جمله) سر و کار خواهیم داشت که آوردن همه‌ی آن‌ها در این مجال اندک نمی‌گنجد.

یک راه برای در نظر گرفتن همه‌ی فرایندهای ممکن، استفاده از نمودارهای فاینمن است. برای نمونه یکی از نمودارها را در شکل ۱ نمایش داده‌ایم. با در نظر گرفتن سپری شدن زمان از چپ به راست، این نمودار فرایندی را توصیف می‌کند که در آن، اتم A با انجام یک گذار الکتریکی از حالت پایه به حالت برانگیخته $|k\rangle$ رفته و یک فوتون گسیل می‌کند، سپس اتم B با انجام یک گذار



شکل ۱: نمودار فاینمن برای توصیف عناصر ماتریسی موجود در صورت کسر رابطه (۱۱).

مغناطیسی به حالت $|l\rangle$ رفته، یک فوتون گسیل می‌کند. در مرحله بعد، اتم B با یک گذار الکتریکی فوتون گسیل شده از اتم A را جذب کرده و به حالت پایه برمی‌گردد، و در آخر، اتم A با یک گذار مغناطیسی و بازگشت به حالت پایه، فوتونی را که از اتم B گسیل شده بود، جذب می‌کند. سهم حاصل از این نمودار در رابطه (۱۱)، δE ، به صورت زیر حاصل می‌شود:

که با نتیجه گزارش شده در مرجع [۴] در توافق است.

۶- نتیجه گیری

فرمول پتانسیل برهمکنش وان دروالس بین دو مولکول دست‌سان که پیش‌تر برای دو مولکول در فضای تهی به دست آمده بود، با استفاده از روش اختلال، به حضور ماده مغناطوالکتریک تعمیم داده شد. به منظور تأیید درستی فرمول‌بندی ارائه‌شده، نتیجه برای دو مولکول در فضای تهی، به عنوان حالت خاصی از رابطه‌ی داده‌شده، محاسبه شد که این محاسبه با گزارش‌های پیشین سازگار بود.

کتاب‌نامه

- [1] H. B. G. Casimir and D. Polder, "The Influence of Retardation on the London-van der Waals Forces", **Phys. Rev.** 73, 360, 1948.
- [2] G. Feinberg and J. Sucher, "General form of the retarded van der Waals potential", **J. Chem. Phys.** 48, 3333, 1968.
- [3] E.A. Power and T. Thirunamachandran, "Casimir-Polder potential as an interaction between induced dipoles", **Phys. Rev. A** 48, 4761, 1993.
- [4] E.A. Power and T. Thirunamachandran, "Casimir potentials: a chemical viewpoint", **J. Mol. Struct.** 591, 2002.
- [5] Ho Trung Dung, et al., "Electromagnetic-field quantization and spontaneous decay in left-handed media", **Phys. Rev. A** 68, 043816, 2003.
- [6] S.Y. Buhmann, et. al., "Casimir-Polder forces: A nonperturbative approach", **Phys. Rev. A** 70, 052117, 2004.
- [7] H. Safari, et al., "van der Waals potentials of paramagnetic atoms", **Phys. Rev. A** 78, 062901, 2008.

$$\delta E = \frac{\mu_0^2}{\hbar \pi^2} \sum_{k,l \neq 0} \int_0^\infty d\omega \int_0^\infty \frac{d\omega' \omega'^2}{(\omega_A^k + \omega_B^l + \omega_1 + \omega_2)} \\ \times \frac{1}{(\omega_A^k + \omega_1)(\omega_A^l + \omega_2)} \text{tr} \left[\mathbf{m}_B^{l0} \mathbf{d}_B^{0l} \cdot \text{Im} \mathbf{G}(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A, \omega_1) \right. \\ \left. \cdot \mathbf{d}_A^{k0} \mathbf{m}_A^{0k} \cdot \nabla_A \times \text{Im} \mathbf{G}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B, \omega_2) \times \bar{\nabla}_B \right] \quad (12)$$

که در آن، $\mathbf{d}^{ij} = \langle i | \hat{\mathbf{d}} | j \rangle$ و $\omega^k = (E_k - E_0)/\hbar$ و با در نظر گرفتن سهم همه‌ی فرایندهای ممکن و جمع زدن همه آن‌ها، و استفاده از تعریف تانسورهای قطبش‌پذیری متقاطع به صورت [۴]

$$\chi_{A'}^{em}(\omega) = \frac{2}{\hbar} \sum_{k \neq 0} \frac{\omega \mathbf{d}_{A'}^{k0} \mathbf{m}_{A'}^{0k}}{\omega^2 - (\omega_A^k)^2}, \quad \chi_{A'}^{me} = -\chi_{A'}^{em*} \quad (13)$$

نتیجه را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$U(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = \frac{-\hbar \mu_0^2}{\pi} \int_0^\infty du \\ \times \left\{ \text{tr} \left[\chi_A^{em}(iu) \cdot \nabla_A \times \mathbf{G}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B, iu) \times \bar{\nabla}_B \right. \right. \\ \left. \cdot \chi_B^{me}(iu) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A, iu) \right] \\ + \text{tr} \left[\chi_A^{em}(iu) \cdot \nabla_A \times \mathbf{G}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B, iu) \right. \\ \left. \cdot \chi_B^{em}(iu) \cdot \nabla_B \times \mathbf{G}(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A, iu) \right] \right\} \quad (14)$$

۵- پتانسیل در غیاب ماده

برای آزمایش سازگاری رابطه (۱۴) با پژوهش‌های پیشین، این فرمول را برای دو اتم دست‌سان در غیاب ماده به کار می‌بریم. کافی است تانسور گرین فضای تهی را در این رابطه جایگزین کنیم که عبارت است از

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', iu) \\ = \frac{c^2 e^{-\rho u/c}}{4\pi^2 u^2 \rho^3} \left[f(\rho u/c) \mathbf{I} - g(\rho u/c) \rho \rho / \rho^2 \right] \quad (15)$$

و در آن $\rho = |\mathbf{p}|$ ، $\mathbf{p} = \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B$

$$f(x) = 1 + x + x^2, \quad g(x) = 3 + 3x + x^2 \quad (16)$$

با قراردادن تانسور گرین (۱۵) همراه با تعریف (۱۶) در رابطه (۱۴)، به دست می‌آوریم:

$$U = \frac{\hbar \mu_0}{8\pi^3 \epsilon_0 \rho^6} \int_0^\infty du \chi_A^{em}(iu) \chi_B^{em}(iu) \\ \times (3 + 6\rho u/c + 4\rho^2 u^2/c^2), \quad (17)$$