

کاهش مرتبه اختلال غیر صفر در محاسبه پتانسیل برهم‌کنش وان‌دروالس

حسن صفری و محمدجواد فقیهی

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

چکیده - پتانسیل برهم‌کنش وان‌دروالس دو اتم حالت پایه در یک محیط مغناطو الکتریک که پیش‌تر با به‌کارگیری اختلال مرتبه چهارم محاسبه شده است، در این مقاله، با معرفی یک هامیلتونی برهم‌کنش موثر که مبتنی بر نظریه پاسخ خطی است، با اختلال مرتبه دوم محاسبه می‌شود. کاهش دو مرتبه از محاسبات اختلالی باعث کاهش قابل ملاحظه از حجم و پیچیدگی محاسبه پتانسیل می‌شود و می‌تواند، به عنوان مثال، برای محاسبه پتانسیل وان‌در والس بین مولکول‌های دست‌سان، که در مقایسه با مولکول‌های نادرست‌سان پیچیدگی‌های بیشتری دارد، مفید باشد.

کلید واژه- پتانسیل وان‌دروالس، تابع گرین، هامیلتونی برهم‌کنش موثر، میدان الکترومغناطیسی کوانتیزه، نظریه اختلال، نظریه پاسخ خطی.

Reducing the order of nonzero perturbation in calculating the van der Waals interaction Potential

Hassan Safari and Mohammad Javad Faghihi

Photonics Department, Graduate University of Advanced Technology, Mahan, Kerman

Abstract- In this article, the van der Waals interaction potential between two ground-state atoms in the presence of magnetoelectric media, previously obtained via fourth-order perturbation theory, is obtained from second-order perturbative calculation, by introducing an effective interaction Hamiltonian based on linear response theory. This, makes a considerable reduction in complexity and length of the calculation and may be useful, for example, in obtaining the van der Waals interaction potential between chiral molecules, which possess more complexities in comparison to achiral ones.

Keywords: Effective interaction Hamiltonian, Green function, Linear response theory, Perturbation theory, Quantized electromagnetic field, van der Waals potential.

۱- مقدمه

با آن است. برای هامیلتونی برهم‌کنش، با فرض این که سامانه اتم-میدان در حالت تعادل دینامیکی قرار دارد، از نظریه پاسخ خطی کمک می‌گیریم و هامیلتونی موثری به صورت

$$\hat{H}_{A'F} = -\frac{1}{2} \hat{\mu}_{A'} \cdot \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_{A'}) \quad (3)$$

تعریف می‌کنیم که در آن، $\hat{\mathbf{E}}$ میدان الکتریکی و $\hat{\mu}$ عملگر دوقطبی الکتریکی *لقا شده* در اتم، در اثر میدان الکتریکی است. تفاوت در وجود ضریب *یک‌دوم* در رابطه (۳)، در مقایسه با رابطه نظیرش در مرجع [۴]، ناشی از این است که در آن‌جا، عملگر دوقطبی الکتریکی *دائمی* اتم در نظر گرفته شده است.

گشتاور دوقطبی الکتریکی القایی اتم، $\hat{\mu}$ ، به‌واسطه تانسور قطبش‌پذیری (دینامیکی) $\hat{\alpha}(\omega)$

$$\hat{\alpha}_{A'}(\omega) = \frac{2}{\hbar} \sum_{k \neq 0} \frac{\omega_{A'}^k \mathbf{d}_{A'}^{k0} \mathbf{d}_{A'}^{0k}}{\omega^2 - (\omega_{A'}^k)^2}, \quad (4)$$

برحسب مولفه‌های بسامدی میدان الکتریکی $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$ که با رابطه

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) = \int_0^\infty d\omega \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) + H.c. \quad (5)$$

تعریف می‌شود، به شکل زیر نوشته می‌شود

$$\hat{\mu}(\mathbf{r}) = \int_0^\infty d\omega \hat{\alpha}(\omega) \cdot (\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) + \hat{\mathbf{E}}^\dagger(\mathbf{r}, \omega)). \quad (6)$$

لازم به ذکر است که در رابطه (۴)، $\mathbf{d}_{A'}^{k0}$ عنصر ماتریسی گشتاور دوقطبی الکتریکی گذار اتمی است.

می‌توان میدان الکترومغناطیسی کوانتیزه تاثیر گرفته از ماده را بر حسب عملگرهای پایه $\hat{\mathbf{f}}_\lambda(\mathbf{r}, \omega)$ که بر اساس قطبش و مغناطش نوفه‌ای بیان می‌شوند [۴]، به صورت

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = \sum_{\lambda=e,m} \int d^3r \hat{\mathbf{G}}_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot \hat{\mathbf{f}}_\lambda(\mathbf{r}', \omega) \quad (7)$$

نوشت. این عملگرها در روابط جابجایی

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{f}}_\lambda(\mathbf{r}, \omega), \hat{\mathbf{f}}_\lambda^\dagger(\mathbf{r}', \omega')] &= I \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\omega - \omega') \\ [\hat{\mathbf{f}}_\lambda(\mathbf{r}, \omega), \hat{\mathbf{f}}_\lambda(\mathbf{r}', \omega')] &= 0 \end{aligned} \quad (8)$$

صدق می‌کنند. تانسورهای $\hat{\mathbf{G}}_e$ و $\hat{\mathbf{G}}_m$ بر حسب تانسور گرین $\hat{\mathbf{G}}$ که از معادله دیفرانسیل

دو اتم یا مولکول خنثی و ناقطبیده (در این مقاله، به طور خلاصه، واژه اتم را به کار می‌بریم)، تحت تاثیر افت و خیز میدان الکترومغناطیسی خلأ کوانتومی، نیرویی به هم وارد می‌کنند که به آن نیروی وان‌دروالس گفته می‌شود. این نیرو از پتانسیلی به همین نام قابل محاسبه است که اولین بار، با فرض قرارگیری اتم‌ها در فضای تهی از اجسام مغناطو الکتریک، توسط لاندن و در فاصله کوتاه بین دو اتم، با به‌کارگیری اختلال مرتبه دوم محاسبه شد [۱]. تعمیم فرمول این پتانسیل به فاصله دلخواه بین اتم‌ها توسط کازیمیر و پولدر صورت پذیرفت [۲]. لزوم توسعه فرمول‌بندی به حضور محیط مادی جهت واقعی‌تر کردن نتیجه به‌دست آمده در مقایسه با فرض فضای تهی، انگیزه‌ای برای پژوهش‌های بعدی شد (به عنوان نمونه، مرجع [۳] را ببینید). در مراجع [۲] و [۳]، از آن‌جا که در فاصله دلخواه بین اتم‌ها، تاخیر حاصل از متناهی بودن سرعت نور نیز می‌بایست در محاسبات وارد شود، از اختلال مرتبه چهارم استفاده شد.

در این مقاله، پس از معرفی فرمول‌بندی استفاده‌شده برای کوانتس میدان الکترومغناطیسی و سپس نوشتن هامیلتونی سامانه‌ای متشکل از دو اتم و میدان الکترومغناطیسی تاثیر گرفته از ماده مغناطو الکتریک در شکلی جدید، خواهیم دید که همان نتیجه‌ای که برای پتانسیل برهم‌کنش وان‌دروالس در مرجع [۳] حاصل شده بود، در این مقاله، از اختلال مرتبه دوم حاصل می‌شود و در نتیجه به میزان قابل ملاحظه‌ای از پیچیدگی و حجم محاسبات کاسته می‌شود.

۲- معرفی فرمول‌بندی

هامیلتونی سامانه‌ای متشکل از دو اتم A و B که در حالت پایه خود و در حضور میدان الکترومغناطیسی تاثیر گرفته از محیط مغناطو الکتریک قرار دارند را می‌توان، در تقریب دوقطبی الکتریکی به صورت

$$\hat{H} = \sum_{A'=A,B} \hat{H}_{A'} + \sum_{A'=A,B} \hat{H}_{A'F} \quad (9)$$

نوشت [۴]. در رابطه (۹)، $\hat{H}_{A'}$ و $\hat{H}_{A'F}$ ، به‌ترتیب، هامیلتونی اتم A' و هامیلتونی برهم‌کنش اتم-میدان هستند. همانند مرجع [۴]، هامیلتونی اتم‌ها را به شکل

$$\hat{H}_{A'} = \sum_n E_n^{A'} |n_{A'}\rangle \langle n_{A'}|, \quad (10)$$

در نظر می‌گیریم که در آن، $|n\rangle$ ویژه‌حالت اتمی (مختل‌نشده)، و $E_n \equiv \hbar \omega_n$ ، ویژه‌مقدار انرژی متناظر

$$= \frac{\hbar \mu_0 \omega^2}{\pi} \text{Im} \vec{G}(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', \omega). \quad (۱۳)$$

۳- محاسبه پتانسیل برهم‌کنش

با در نظر گرفتن دو اتم و میدان الکترومغناطیسی در حالت پایه، $|\{0\}\rangle |0_A, 0_B\rangle$ ، جابه‌جایی وابسته به موقعیت در انرژی حالت پایه را می‌توان از نظریه اختلال و با در نظر گرفتن برهم‌کنش اتم-میدان، جمله دوم رابطه (۱)، به عنوان هامیلتونی اختلالی به دست آورد [۲].

با به کار بردن هامیلتونی برهم‌کنش (۳)، به همراه روابط (۶) و (۷)، می‌توان دید که اولین مرتبه غیر صفر اختلال که سهم در برهم‌کنش بین دو اتم دارد، مرتبه دوم آن است، که عبارت است از

$$\Delta E_{(2)} = - \sum_{I \neq 0} \frac{\langle 0 | \hat{H}_I | I \rangle \langle I | \hat{H}_I | 0 \rangle}{(E_I - E_0)}, \quad (۱۴)$$

$\langle I | \hat{H}_I | 0 \rangle$ عنصر ماتریسی $(\hat{H}_I = \hat{H}_{AF} + \hat{H}_{BF})$ رویدادی را توصیف می‌کند که سامانه، تحت تاثیر اختلال $\hat{H}_I$ گذاری از حالت $|0\rangle$ به حالت $|I\rangle$ انجام می‌دهد. با واری هامیلتونی برهم‌کنش، به سادگی می‌توان دریافت که حالت میانی تنها در صورتی در برهم‌کنش دو اتم سهم خواهد داشت که میدان در حالت برانگیخته دوفوتونی، و اتم‌ها در حالت پایه باشند؛

$$|I\rangle = |0_A, 0_B\rangle |1_{\lambda\alpha}(\mathbf{r}_1, \omega_1), 1_{\lambda\beta}(\mathbf{r}_2, \omega_2)\rangle. \quad (۱۵)$$

به عبارت دیگر، عنصر ماتریسی یادشده، متناظر با رویدادی است که یکی از اتم‌ها دو فوتون گسیل می‌کند بدون این که هیچ‌یک از اتم‌ها گذاری انجام دهند. در عنصر ماتریسی دیگر، عکس این رویداد رخ می‌دهد و تنها رویدادی را باید در نظر گرفت که دو فوتون گسیل شده در رویداد پیشین، توسط اتم دیگر جذب می‌شوند. در غیر این صورت، این جذب و گسیل نقشی در برهم‌کنش نخواهد داشت.

لازم به ذکر است که جمع موجود در رابطه (۱۴)، هم بر روی برچسب‌های گسسته، مانند ویژه‌مالات‌های اتمی، و هم بر روی برچسب‌های پیوسته (انتگرال)، مانند بسامد، می‌باشد،

$$\sum_{I \neq 0} \rightarrow \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\lambda_1, \lambda_2} \int_0^\infty d\omega_1 \int_0^\infty d\omega_2 \int d^3r_1 \int d^3r_2. \quad (۱۶)$$

با قرار دادن حالت میانی (۱۵) در عنصر ماتریسی یادشده، و به‌کارگیری روابط جابه‌جایی (۸) به دست می‌آوریم:

$$\nabla \times \frac{1}{\mu(\mathbf{r}, \omega)} \nabla \times \vec{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \frac{\omega^2}{c^2} \vec{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \mathbf{I} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (۹)$$

($\mathbf{I}$ ، تانسور واحد) پیروی می‌کند [۵]، به صورت زیر نوشته می‌شوند:

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

$$\vec{G}_m(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = - \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\hbar}{\pi \varepsilon_0}} \text{Im} \frac{1}{\mu(\mathbf{r}', \omega)} \times [\vec{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \times \vec{\nabla}'] \quad (۱۰)$$

اثر ویژگی‌های هندسی و مغناطیوالکتریکی محیط مادی از طریق گذردهی الکتریکی نسبی $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)$ و تراوایی مغناطیسی نسبی $\mu(\mathbf{r}, \omega)$ موجود در تابع گرین، در میدان کوانتیزه وارد می‌شود.

حالت پایه میدان را با $|\{0\}\rangle$ نشان می‌دهیم که بر حسب عملگر $\hat{f}_\lambda$ ، که عملگر نابودی برانگیختگی‌های میدان (فوتون‌ها) است، با رابطه

$$\hat{f}_\lambda(\mathbf{r}, \omega) |\{0\}\rangle = 0, \quad \forall \lambda, \mathbf{r}, \omega \quad (۱۱)$$

تعریف می‌شود. برچسب $\lambda = e(m)$ ، دلالت بر ماهیت الکتریکی (مغناطیسی) چشمه نوفه‌ای دارد. ویژه‌مالات‌های برانگیخته میدان با اثر دادن پی‌درپی عملگر آفرینش برانگیختگی‌های میدان، $\hat{f}_\lambda^\dagger$ ، بر روی حالت پایه به وجود می‌آیند. برای مثال،

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

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

(۱۲)

تابع گرین، گذردهی الکتریکی، تراوایی مغناطیسی، و قطبش‌پذیری الکتریکی، مانند هر تابع پاسخ دیگری در حوزه فرکانس، در نیمه‌ی بالایی صفحه بسامد مختلط تحلیلی هستند و از رابطه انعکاسی شوارتز، $f(\omega) = f^*(-\omega^*)$ پیروی می‌کنند. علاوه بر این، تابع گرین در رابطه انتگرالی زیر صدق می‌کند [۴]:

$$\sum_{\lambda=e,m} \int d^3r \vec{G}_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot \vec{G}_\lambda^{*T}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega)$$

انرژی برهمکنش یک دوقطبی الکتریکی القایی در یک میدان الکتریکی خارجی (هامیلتونی موثر)، از اختلال مرتبه دوم و با محاسباتی بسیار سراسرتر و ساده‌تر به دست آمد. این روش می‌تواند برای یافتن پتانسیل برهمکنش حاصل از دست‌سازنی اتم‌ها، که پیچیدگی بیشتری نسبت به اتم‌های نادرست‌سان دارد، و بنا بر آگاهی ما، تا کنون در حضور محیط مادی محاسبه نشده است، مفید باشد.

ذکر نکته‌ای در اینجا ضروری است. از آنجا که این هامیلتونی مبتنی بر نظریه پاسخ خطی است، در استفاده از آن باید احتیاط کرد؛ این هامیلتونی تنها در بررسی سامانه‌هایی کارایی دارد که در حالت تعادل باشند.

مراجع

- [1] F. London, "Zur Theorie und Systematik der Molekularkräfte", Z. Phys. 63, 245 (1930).
- [2] H. B. G. Casimir and D. Polder, "The Influence of Retardation on the London-van der Waals Forces", Phys. Rev. 73, 360, 1948.
- [3] H. Safari, et al., "Body-assisted van der Waals interaction between two atoms", Phys. Rev. A 74, 042101, 2006.
- [4] S. Y. Buhmann, et al., "Casimir-Polder forces: A nonperturbative approach", Phys. Rev. A 70, 052117, 2004.
- [5] H. T. Dung, et al., "Electromagnetic-field quantization and spontaneous decay in left-handed media", Phys. Rev. A 68, 043816, 2003.

$$\langle I | \hat{H}_1 | 0 \rangle = \sqrt{2} \left[\vec{G}_{\lambda_1}^*(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_1, \omega_1) \cdot \vec{a}(\omega_2) \cdot \vec{G}_{\lambda_2}^*(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_2, \omega_2) \right]_{\alpha\beta}. \quad (17)$$

مخرج کسر موجود در علامت جمع رابطه (۱۴) برابر می‌شود با $\hbar(\omega_1 + \omega_2)$. با قرار دادن نتیجه (۱۷) در رابطه (۱۴)، و استفاده از رابطه انتگرالی (۱۳)، جابه‌جایی انرژی به صورت

$$\Delta E = -\frac{\hbar\mu_0^2}{2\pi^2} \int_0^\infty d\omega_1 \int_0^\infty d\omega_2 \frac{\omega_1^2 \omega_2^2}{(\omega_1 + \omega_2)} \times \text{tr} [\vec{a}_A(\omega_2) \cdot \text{Im} \vec{G}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B, \omega_1) \cdot \vec{a}_B(\omega_2) \cdot \text{Im} \vec{G}(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A, \omega_2)], \quad (18)$$

به دست می‌آید. این رابطه را می‌توان با کمک خواص تابع گرین به عنوان یک تابع پاسخ که در انتهای بخش ۲ ذکر شد، ساده کرد. به این منظور، ابتدا با بردن انتگرال ω_1 به صفحه ω_1 مختلط و با کمک انتگرال‌گیری پربندی، به دست می‌آوریم:

$$\int_0^\infty d\omega_1 \frac{\omega_1^2 \text{Im} \vec{G}(\omega_1)}{\omega_1 + \omega_2} = -\omega_2 \int_0^\infty du \frac{u^2 \vec{G}(iu)}{\omega_2^2 + u^2}. \quad (19)$$

در قدم بعدی، انتگرال ω_2 را نیز با کمک انتگرال‌گیری پربندی محاسبه می‌کنیم،

$$\int_0^\infty d\omega_2 \frac{\omega_2^3 \text{Im} \vec{\beta}(\omega_2)}{\omega_2^2 + u^2} = -\pi u^2 \vec{\beta}(iu), \quad (20)$$

که در آن، از $\vec{\beta}$ برای نمایش $\vec{a}_A \cdot \vec{G} \cdot \vec{a}_B$ استفاده کرده‌ایم. با استفاده از این نتایج در رابطه (۱۸)، به همان نتیجه‌ای دست می‌یابیم که پیش‌تر، با استفاده از اختلال مرتبه چهارم و با عملیات بسیار طولانی‌تر حاصل شده است [۳]،

$$U(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = \frac{-\hbar\mu_0^2}{2\pi} \int_0^\infty du \times \text{tr} [\vec{a}_A(iu) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B, iu) \cdot \vec{a}_B(iu) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A, iu)]. \quad (21)$$

۴- نتیجه گیری

در این مقاله، فرمول پتانسیل برهمکنش وان‌دروالس بین دو اتم حالت پایه را که پیش‌تر به وسیله اختلال مرتبه چهارم به دست آمده بود، با معرفی هامیلتونی جدید برای برهمکنش اتم-میدان، و الگوگرفتن از