



تعیین پتانسیل برهم کنش دو مولکول غیر قطبی به روش تابع گرین

حسین فالی نژاد و سجاد فلاحتی

گروه فیزیک، دانشگاه خلیج فارس، بوشهر

پست الکترونیکی: falinejad@pgu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۹/۰۱/۰۸؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۰/۰۵/۱۹)

چکیده

در این تحقیق با این فرض که افت و خیزهای میدان الکتریکی خلأ می‌تواند یک مولکول (یا یک اتم) را به یک دو قطبی الکتریکی نوسانی تبدیل کند، پتانسیل برهم کنش دو اتم یا دو مولکول غیر قطبی، بر حسب قطبش پذیری‌های مولکولی و فاصله بین آن دو محاسبه می‌شود. با در نظر گرفتن میدان الکتریکی کل در موضع یک مولکول به صورت حاصل جمع میدان الکتریکی خلأ و میدان الکتریکی ناشی از دو قطبی الکتریکی القایی مولکول دیگر، و جایگذاری در فرمول اثر استارک مربعی، پتانسیل برهم کنش دو مولکول به تابع بستگی میدان الکتریکی خلأ ربط داده می‌شود. با نوشتن پتانسیل برهم کنش بر حسب قسمت‌های موهومی تابع گرین پتانسیل برداری (با استفاده از قضیه اتلاف-افت و خیز و فرمول کوبو در مکانیک آماری) و محاسبه مؤلفه‌های تابع گرین مورد نیاز، پتانسیل برهم کنش بین دو مولکول تعیین می‌شود. حالات حدی فواصل کوچک و بزرگ عبارت کلی، بررسی شده و سازگاری با کارهای پیشین نشان داده می‌شود.

واژه‌های کلیدی: میدان الکتریکی خلأ، اثر استارک مربعی، قطبش پذیری مولکولی، تابع بستگی میدان الکتریکی، قضیه اتلاف-افت و خیز، تابع

گرین پتانسیل برداری

۱. مقدمه

مول گاز، معادله حالت $(V - b) = RT \left(p + \frac{a}{V^2} \right)$ را ارائه داد

که در آن b و a به ترتیب پارامترهای مربوط به حجم غیر صفر و وجود نیروی جاذبه بین دو مولکول هستند. پارامترهای a و b و اندروالس برای هر گاز به طور جداگانه با تطبیق داده‌های تجربی با این معادله حالت محاسبه می‌شوند. کیزام در یک دمای

در به دست آوردن معادله حالت یک گاز کامل، فرض بر نقطه‌ای بودن مولکول‌ها و عدم وجود نیروی جاذبه بین آنها است. و اندروالس برای منظور کردن انحرافات ناشی از غیر صفر بودن حجم مولکول‌ها و وجود نیروی جاذبه بین آنها، برای یک

دارد. از آنجا که در عمل تعداد مدهای یک میدان الکترومغناطیسی بی نهایت است، انرژی حالت خلاً (تحت عنوان انرژی نقطه صفر) نیز بی نهایت می شود. هر چند در ظاهر به نظر می آید که جمله ثابت $\frac{1}{4}\hbar\omega$ را از معادله حرکت هایزنبرگ می توان حذف کرد و در نتیجه وجود میدان خلاً را نادیده گرفت، اما برای توجیه پدیده‌هایی مانند نیروی کازیمیر [۱۰-۶]، گسیل خودبه‌خودی [۱۱-۱۵]، جابه‌جایی لمب [۱، ۱۶] و [۱۷] و نیروی پاشندگی [۱]، فرض وجود میدان خلاً و افت و خیزهای وابسته به آن لازم است.

از لحاظ تاریخی نیروی بین دو اتم و یا دو مولکول خنثی تحت عنوان نیروی واندروالس شناخته می شود، اما در یک تعریف کلی، نیروی واندروالس جزء آن گروه از نیروهای پاشندگی است که در فواصل کم (حدود نانومتر) عمل می کنند و از این رو در مورد آن از اثرات تأخیری نسبی می توان صرف نظر کرد [۱]. در نقطه مقابل نیروهای کازیمیر در گروه نیروهای پاشندگی برد بلند قرار دارند و معمولاً اثرات تأخیری نسبی در مورد آنها لحاظ می شود. در ظاهر نیروی کازیمیر بین دو جسم را می توان با محاسبه مجموع نیروهای واندروالس بین مولکول‌های دو جسم تعیین کرد، اما محاسبات نشان داده است که این روش تنها برای محیط‌های رقیق جواب می دهد [۱].

تئوری نیروی جاذبه مولکولی بین دو جامد (یا به عبارتی نیروی کازیمیر بین دو جسم) در سال ۱۹۵۶ توسط لیفشیتز ارائه شد [۱۸].

به هنگام اعمال یک میدان الکتریکی، روش متداول برای محاسبه تغییر انرژی یک اتم (یا مولکول) واقع در حالت زمینه، استفاده از فرمول اثر استارک مربعی است [۱]. اگر در فرمول استارک مربعی، عملگر میدان الکتریکی با بسط فوریه آن جایگزین شود و سپس از عبارت حاصل (در حالت خلاً) مقدار چشم‌داشتی گرفته شود، انرژی برهم‌کنش بین دو اتم (یا دو مولکول) را می توان به تابع بستگی میدان الکتریکی ربط داد. از این رو در حالت کلی برای محاسبه نیروی پاشندگی (یا پتانسیل برهم‌کنش) بین دو مولکول، شکل کوانتیده میدان الکتریکی مورد نیاز است. در خصوص فضای آزاد، شکل عملگری میدان

معین T ، با استفاده از تابع توزیع کانونی، عبارت
$$V(r) = -\frac{p_1 p_2}{3k_B T r^6}$$
 را برای پتانسیل برهم‌کنش بین دو مولکول قطبی با ممان‌های p_1 و p_2 به دست آورد که متناسب با عکس دما و عکس توان ششم فاصله بین دو مولکول است [۱ و ۲]. در سال ۱۹۳۰ لادن با استفاده از تئوری اختلال مرتبه چهارم، عبارتی برای پتانسیل برهم‌کنش بین دو اتم یا دو مولکول غیر قطبی یکسان ارائه داد که مستقل از دما و متناسب با عکس توان ششم فاصله بین دو مولکول است [۱ و ۳]. کازیمیر و پولدر نشان دادند که اگر فاصله بین دو مولکول به حدی زیاد باشد که از اثرات تأخیری نتوان چشم پوشی کرد، آنگاه پتانسیل برهم‌کنش بین دو مولکول متناسب با عکس توان هفتم فاصله خواهد بود [۴ و ۵]. با توجه به کارهای لادن، کازیمیر، پولدر و این که ثابت a واندروالس برای گازها با مولکول‌های غیر قطبی نیز مخالف صفر است، می توان نتیجه گرفت که در حالت کلی یک نیروی جاذبه بین دو مولکول قطبش‌پذیر وجود دارد (حتی اگر مولکول‌ها فاقد ممان دو قطبی الکتریکی دائم باشند). از آنجا که در محاسبه این نیرو، ضریب قطبش‌پذیری وارد می شود و قطبش‌پذیری اتم (یا مولکول) با ضریب شکست و در نتیجه با پاشندگی محیط در ارتباط است، نیروی بین دو ذره قطبش‌پذیر خنثی تحت عنوان نیروی پاشندگی شناخته می شود. منشأ نیروی پاشندگی را می توان به میدان الکتریکی حالت خلاً نسبت داد. در واقع با فرض ایجاد (یا القاء) دو قطبی‌های الکتریکی نوسانی در دو ذره (توسط افت و خیزهای میدان الکتریکی خلاً)، نیروی پاشندگی بین دو ذره قطبش‌پذیر را می توان همان نیروی بین دو دو قطبی الکتریکی نوسانی تصور کرد.

وجود میدان خلاً از کوانتش میدان الکترومغناطیسی نتیجه می شود. بنا به تعریف، حالت خلاً، بیانگر آن حالت از یک میدان الکترومغناطیسی است که تمامی مدهای میدان در حالت زمینه خود باشند. هر مد میدان الکترومغناطیسی با بسامد ω را می توان معادل با یک نوسانگر هماهنگ با همان بسامد گرفت و از این رو حالت زمینه میدان الکترومغناطیسی انرژی $\sum_p \frac{1}{2}\hbar\omega$

ناشی از مولکول B ($E_{B,k}$) تصور کرد.

$$E_k(\mathbf{r}_A, t) = E_{\circ,k}(\mathbf{r}_A, t) + E_{B,k}(\mathbf{r}_A, t), \quad (2)$$

در نتیجه تغییر انرژی ذره قطبش پذیر A، به دلیل وجود ذره B، عبارت است از:

$$V_{AB} = -\frac{1}{\gamma} \sum \alpha_A(\omega_k) [E_{\circ,k}(\mathbf{r}_A, t) \cdot E_{B,k}(\mathbf{r}_A, t) + E_{B,k}(\mathbf{r}_A, t) \cdot E_{\circ,k}(\mathbf{r}_A, t)], \quad (3)$$

برای گذار به محدوده کوانتومی لازم است که میدانهای کلاسیکی با عملگرهای متناظر جایگزین شده و سپس از عبارت حاصل در حالت خلأ مقدار چشم‌داشتی گرفته شود.

$$V_{AB} = -\frac{1}{\gamma} \sum \alpha_A(\omega_k) \left(\left\langle \left| \hat{E}_{\circ,k}(\mathbf{r}_A, t) \cdot \hat{E}_{B,k}(\mathbf{r}_A, t) \right| \right\rangle + \left\langle \left| \hat{E}_{B,k}(\mathbf{r}_A, t) \cdot \hat{E}_{\circ,k}(\mathbf{r}_A, t) \right| \right\rangle \right), \quad (4)$$

که $\langle \dots \rangle$ بیانگر حالت خلأ است (یا حالت زمینه میدان الکترومغناطیسی). شکل عملگری میدان الکتریکی $\hat{E}_{B,k}$ شبیه میدان الکتریکی کلاسیکی ناشی از یک دو قطبی الکتریکی نوسانی با بسامد ω_k (و با ممان $p_{B,k}$) است که در موضع مولکول B قرار دارد. با اعمال $p_{B,k} \rightarrow \hat{p}_{B,k}$ و در نظر گرفتن وابستگی زمانی $e^{i\omega t}$ برای میدان الکتریکی، شکل عملگری میدان یک دو قطبی الکتریکی با ممان $p_{B,k}$ (و واقع در r_B)، در موضع مولکول A به شکل زیر است [γ^0]:

$$\hat{E}_{B,k}(\mathbf{r}_A, t) = k^2 \left\{ \left[\hat{p}_{B,k} - (\hat{p}_{B,k} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \right] \frac{1}{r} + \left[\mathbf{r} (\hat{p}_{B,k} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} - \hat{p}_{B,k} \right] \left(\frac{1}{r^3} + \frac{ik}{r^2} \right) \right\} e^{-ikr} e^{i\omega t}, \quad (5)$$

در اینجا، \mathbf{n} بردار واحد در جهت $\mathbf{r} = \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B$ و $k = \omega/c$ است. با فرض آن که ممان دو قطبی $p_{B,k}$ مولکول B، یک ممان دو قطبی القایی و ناشی از مد k ام میدان الکتریکی حالت خلأ است، ضریب قطبش‌پذیری را به صورت زیر می‌توان تعریف کرد:

$$\hat{p}_{B,k} = \alpha_B(\omega_k) \hat{E}_{\circ,k}(\mathbf{r}_B, t), \quad (6)$$

در فرایند کوانتس شدن میدان الکترومغناطیسی، معمولاً عملگرهای میدان به قسمت‌های بسامدی مثبت و منفی تجزیه می‌شوند.

$$\hat{E}_{\circ,k}(\mathbf{r}, t) = \hat{E}_{\circ,k}^+(\mathbf{r}, t) + \hat{E}_{\circ,k}^-(\mathbf{r}, t), \quad (7)$$

که در آن $\hat{E}_{\circ,k}^+$ و $\hat{E}_{\circ,k}^-$ به ترتیب شامل عملگرهای نابودی و

الکتریکی را به آسانی می‌توان تعیین کرد، اما به هنگام وجود سطوح مرزی و مخصوصاً سطوح پاشنده و اتلافی کوانتس میدان الکترومغناطیسی کار آسانی نیست. از طرفی، بنا به قضیه اتلاف-افت وخیز و فرمول کوبو در مکانیک آماری، تابع بستگی میدان الکتریکی را می‌توان بر حسب قسمت‌های موهومی مؤلفه‌های تانسور تابع گرین پتانسیل برداری نوشت [۱۹]. از این رو یک راه‌کار دیگر برای تعیین پتانسیل برهم‌کنش بین دو مولکول، محاسبه تانسور تابع گرین پتانسیل برداری است. در این تحقیق از طریق محاسبه تانسور تابع گرین پتانسیل برداری، پتانسیل برهم‌کنش بین دو مولکول محاسبه می‌شود. در قسمت دوم این مقاله با استفاده از فرمول استارک مربعی عبارتی برای پتانسیل برهم‌کنش بین دو مولکول بر حسب مؤلفه‌های تانسور گرین پتانسیل برداری ارائه می‌شود. در قسمت سوم، مؤلفه‌های تانسور تابع گرین مورد نیاز محاسبه شده و سپس پتانسیل برهم‌کنش به شکل یک عبارت بر حسب فاصله بین دو مولکول و قطبش‌پذیری‌های مولکولی به دست آورده می‌شود. در قسمت چهارم حالت‌های حدی فواصل کوچک و بزرگ (در مقایسه با طول موج‌های ناشی از گذار به حالت زمینه) بررسی شده و سازگاری با کارهای پیشین نشان داده می‌شود. قسمت پنجم مربوط به ارائه نتایج ناشی از این تحقیق، بحث در نتایج و ارائه پیشنهادهایی برای گسترش کار است.

۲. پتانسیل برهم‌کنش بین دو مولکول

دو مولکول (یا دو اتم) قطبش‌پذیر A و B، با بردارهای مکان r_A و r_B در نظر می‌گیریم. تغییر انرژی حالت زمینه مولکول A به هنگام قرار گرفتن در یک میدان الکتریکی، متناسب با توان دوم میدان الکتریکی است (تحت عنوان اثر استارک مربعی) [۱].

$$V_A = -\frac{1}{\gamma} \sum_k \alpha_A(\omega_k) E_k^{\gamma}(\mathbf{r}_A, t), \quad (1)$$

که در آن α_A ضریب قطبش‌پذیری A و جمع روی تمامی مدهای میدان الکترومغناطیسی است. مد k ام میدان الکتریکی کل در موضع A را می‌توان به شکل یک برهم‌نهی از مد k ام میدان الکتریکی حالت خلأ ($E_{\circ,k}$) و مد k ام میدان الکتریکی

$$\left\langle \left\langle \hat{E}_e^+(\mathbf{r}_A, \omega) \cdot \hat{E}_e^-(\mathbf{r}_B, \omega') \right\rangle \right\rangle \times \left(\frac{1}{k r} - \frac{i}{(k r)^\gamma} - \frac{1}{(k r)^\gamma} \right) - \left\langle \left\langle \hat{E}_{e,z}^+(\mathbf{r}_A, \omega) \hat{E}_{e,z}^-(\mathbf{r}_B, \omega') \right\rangle \right\rangle \times \left(\frac{1}{k r} - \frac{3i}{(k r)^\gamma} - \frac{1}{(k r)^\gamma} \right) \Bigg\} + c.c., \quad (14)$$

با استفاده از قضیه اتلاف-افت و خیز و فرمول کوبو در مکانیک آماری [۱] (و در پیمانه با پتانسیل نرده‌ای صفر)، تابع بستگی میدان الکتریکی را به شکل زیر بر حسب قسمت موهومی تابع گرین پتانسیل برداری می‌توان نوشت:

$$\left\langle \left\langle \hat{E}_i^+(\mathbf{r}, \omega) \hat{E}_j^-(\mathbf{r}', \omega') \right\rangle \right\rangle = \imath \hbar \omega^\gamma \text{Im} G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \delta(\omega - \omega'), \quad (15)$$

که Im اشاره به قسمت موهومی دارد. در نتیجه با استفاده از این رابطه، پتانسیل برهم‌کنش V_{AB} بر حسب مؤلفه‌های تانسور گرین پتانسیل برداری به صورت زیر به دست می‌آید:

$$V_{AB} = -\frac{\hbar}{\imath \pi} \int_0^{+\infty} d\omega \omega^\gamma \alpha_A(\omega) \alpha_B(\omega) k^\gamma e^{-ikr} \times \left\{ \text{Im} [G_{xx}(\mathbf{r}, \omega) + G_{yy}(\mathbf{r}, \omega) + G_{zz}(\mathbf{r}, \omega)] \times \left(\frac{1}{kr} - \frac{i}{(kr)^\gamma} - \frac{1}{(kr)^\gamma} \right) - \text{Im} G_{zz}(\mathbf{r}, \omega) \times \left(\frac{1}{kr} - \frac{3i}{(kr)^\gamma} - \frac{1}{(kr)^\gamma} \right) \right\} + c.c., \quad (16)$$

۳. تابع گرین پتانسیل برداری

در پیمانه‌ای که پتانسیل نرده‌ای صفر است، مؤلفه‌های بسامدی عملگرهای میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی با عملگر پتانسیل برداری به صورت زیر در ارتباطند:

$$\hat{E}^+(\mathbf{r}, \omega) = i\omega \hat{A}^+(\mathbf{r}, \omega), \quad (17)$$

$$\hat{B}^+(\mathbf{r}, \omega) = \nabla \times \hat{A}^+(\mathbf{r}, \omega), \quad (18)$$

با استفاده از این روابط در معادله ماکسول

$$\hat{\nabla} \times \hat{B}^+(\mathbf{r}, \omega) = -i \frac{\omega}{c^\gamma} \varepsilon \hat{E}^+(\mathbf{r}, \omega) + \frac{1}{\varepsilon_c} \hat{J}^+(\mathbf{r}, \omega), \quad (19)$$

به آسانی می‌توان دید که قسمت بسامدی مثبت عملگر پتانسیل

حلق فوتون هستند و بنابراین:

$$\hat{E}_{e,k}^+(\mathbf{r}, t) \Big|_0 = \left\langle \left\langle \hat{E}_{e,k}^-(\mathbf{r}, t) \right\rangle \right\rangle = 0, \quad (8)$$

و در نتیجه پتانسیل برهم‌کنش (۴) به شکل زیر تقلیل می‌یابد:

$$V_{AB} = -\frac{1}{\imath} \sum \alpha_A(\omega_k) \times \left\langle \left\langle \hat{E}_{e,k}^+(\mathbf{r}_A, t) \cdot \hat{E}_{B,k}^-(\mathbf{r}_A, t) \right\rangle \right\rangle + c.c., \quad (9)$$

که c.c. اشاره به مزدوج مختلط قسمت اول دارد. برای میدانی با یک توزیع پیوسته از بسامدها، با استفاده از بسط فوریه

$$\hat{E}_e^-(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\imath \pi}} \int_0^{+\infty} d\omega \hat{E}_e^+(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} + \frac{1}{\sqrt{\imath \pi}} \int_0^{+\infty} d\omega \hat{E}_e^-(\mathbf{r}, \omega) e^{i\omega t}, \quad (10)$$

پتانسیل برهم‌کنش V_{AB} را به شکل زیر می‌توان تعمیم داد.

$$V_{AB} = -\frac{1}{\imath \pi} \int_0^{+\infty} d\omega \alpha_A(\omega) \times \left\langle \left\langle \hat{E}_e^+(\mathbf{r}_A, \omega) \cdot \hat{E}_B^-(\mathbf{r}_A, \omega) \right\rangle \right\rangle + c.c., \quad (11)$$

از آنجا که مدها با بسامدهای متفاوت غیر وابسته‌اند، می‌توان نوشت:

$$V_{AB} = -\frac{1}{\imath \pi} \int_0^{+\infty} d\omega \int_0^{+\infty} d\omega' \alpha_A(\omega) \times \left\langle \left\langle \hat{E}_e^+(\mathbf{r}_A, \omega) \cdot \hat{E}_B^-(\mathbf{r}_A, \omega') \right\rangle \right\rangle + c.c., \quad (12)$$

با توجه به (۱۰) و همچنین وابستگی زمانی $e^{i\omega t}$ در (۵)، عبارت (۵) در واقع قسمت بسامدی منفی میدان ناشی از یک دوقطبی الکتریکی با ممان $\hat{p}_{B,k}$ است. حال با استفاده از (۶) خواهیم داشت:

$$\hat{E}_B^-(\mathbf{r}_A, \omega) = k^\gamma \left\{ \left[\alpha_B(\omega) \hat{E}_e^-(\mathbf{r}_B, \omega) - \left(\alpha_B(\omega) \hat{E}_e^-(\mathbf{r}_B, \omega) \mathbf{n} \right) \mathbf{n} \right] \frac{1}{r} + \left[\imath \left(\alpha_B(\omega) \hat{E}_e^-(\mathbf{r}_B, \omega) \mathbf{n} \right) \mathbf{n} - \alpha_B(\omega) \hat{E}_e^-(\mathbf{r}_B, \omega) \right] \left[\frac{1}{r^\gamma} + \frac{ik}{r^\gamma} \right] \right\} e^{-ikr}, \quad (13)$$

در نتیجه با انتخاب محور z ها در راستای \mathbf{n} پتانسیل برهم‌کنش (۱۲) به شکل زیر در می‌آید:

$$V_{AB} = -\frac{1}{\imath \pi} \int_0^{+\infty} d\omega \int_0^{+\infty} d\omega' \alpha_A(\omega) \alpha_B(\omega') k^\gamma e^{-ikr}$$

برداری، معادله دیفرانسیل

$$\nabla \times [\nabla \times \hat{A}^+(\mathbf{r}, \omega)] - \epsilon \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \hat{A}^+(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \hat{J}^+(\mathbf{r}, \omega), \quad (20)$$

را ارضاء می کند، که $\hat{J}^+(\mathbf{r}, \omega)$ مؤلفه بسامدی مثبت عملگر چگالی جریان است. در ادامه با استفاده از تعریف تانسور تابع گرین پتانسیل برداری

$$\hat{A}_i^+(\mathbf{r}, \omega) = \sum_j \int d^3 \mathbf{r}' G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \hat{J}_j^+(\mathbf{r}', \omega), \quad (21)$$

در (۲۰) می توان نشان داد که مؤلفه های تانسور تابع گرین پتانسیل برداری، در معادله های دیفرانسیل زیر صدق می کنند:

$$\sum_i (q^\gamma \delta_{li} - \frac{\delta^\gamma}{\partial x_i \partial x_l} + \delta_{li} \nabla^2) G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\frac{1}{\epsilon_0 c^2} \delta_{ij} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (22)$$

در اینجا $q = \sqrt{\epsilon(\omega)} \omega / c$ (که ϵ تابع دی الکتریک نسبی است). با توجه به $l, j = x, y, z$ ، این عبارت در واقع بیانگر تعداد ۹ معادله دیفرانسیل جزئی است که در حالت کلی حل آنها مشکل است. اما در صورت همگن بودن فضا، با استفاده از تبدیلات فوریه فضایی

$$G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 \mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} G_{ij}(\mathbf{k}, \omega), \quad (23)$$

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 \mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}, \quad (24)$$

معادله دیفرانسیل جزئی (۲۲)، در فضای معکوس به ۹ معادله جبری زیر تقلیل می یابد.

$$\begin{bmatrix} q^\gamma + k_x^\gamma - k^\gamma & k_x k_y & k_x k_z \\ k_x k_y & q^\gamma + k_y^\gamma - k^\gamma & k_y k_z \\ k_x k_z & k_y k_z & q^\gamma + k_z^\gamma - k^\gamma \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G_{xx}(\mathbf{k}, \omega) & G_{xy}(\mathbf{k}, \omega) & G_{xz}(\mathbf{k}, \omega) \\ G_{yx}(\mathbf{k}, \omega) & G_{yy}(\mathbf{k}, \omega) & G_{yz}(\mathbf{k}, \omega) \\ G_{zx}(\mathbf{k}, \omega) & G_{zy}(\mathbf{k}, \omega) & G_{zz}(\mathbf{k}, \omega) \end{bmatrix} = \frac{-1}{(2\pi)^{3/2} \epsilon_0 c^2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (25)$$

برای حذف عناصر غیر قطری تانسور تابع گرین، ماتریس دوران

$$R = R_y^{-1}(\theta) R_z^{-1}(\varphi) = \begin{bmatrix} \cos\theta & 0 & -\sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\theta & 0 & \cos\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\varphi \cos\theta & \sin\varphi \cos\theta & -\sin\theta \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ \cos\varphi \sin\theta & \sin\varphi \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}, \quad (26)$$

را معرفی می کنیم. این ماتریس بردار (x, y, z) را به (θ, φ, r) تبدیل می کند و بنابراین در فضای بردار موج، ماتریس دوران متناظر (تبدیل کننده) (k_x, k_y, k_z) به (θ, φ, k) عبارت است از:

$$S(\mathbf{k}) = \frac{1}{k_{\parallel} k} \begin{bmatrix} k_x k_z & k_y k_z & -k_{\parallel}^2 \\ -k_y k & k_x k & 0 \\ k_x k_{\parallel} & k_y k_{\parallel} & k_z k_{\parallel} \end{bmatrix}, \quad (27)$$

با معرفی تانسور تابع گرین کمکی

$$g(\mathbf{k}, \omega) = S(\mathbf{k}) G(\mathbf{k}, \omega) S^{-1}(\mathbf{k}), \quad (28)$$

و ضرب معادله (۲۵) از چپ توسط ماتریس $S(k)$ و از راست توسط ماتریس معکوس $S^{-1}(k)$ (که همان ماتریس ترانهاد $S(k)$ است)، معادلات (۲۵) به معادلات زیر تقلیل می یابند.

$$\begin{bmatrix} q^\gamma - k^\gamma & 0 & 0 \\ 0 & q^\gamma - k^\gamma & 0 \\ 0 & 0 & q^\gamma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{xx} & g_{xy} & g_{xz} \\ g_{yx} & g_{yy} & g_{yz} \\ g_{zx} & g_{zy} & g_{zz} \end{bmatrix} = \frac{-1}{(2\pi)^{3/2} \epsilon_0 c^2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (29)$$

به آسانی می توان دید که برای تانسور گرین کمکی g ، تمامی عناصر غیر قطری صفر، و عناصر قطری عبارتند از:

$$g_{xx} = g_{yy} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} \epsilon_0 c^2} \frac{1}{(k^\gamma - q^\gamma)}, \quad (30)$$

$$g_{zz} = -\frac{1}{(2\pi)^{3/2} \epsilon_0 c^2} \frac{1}{q^\gamma}, \quad (31)$$

از طرفی با توجه به (۱۶)، برای تعیین پتانسیل برهم کنش V_{AB} لازم است که کمیات G_{zz} و $G_{xx} + G_{yy} + G_{zz}$ در فضای مکان محاسبه شوند. با استفاده از روابط (۲۷)، (۲۸) و صفر

$$\frac{1}{(\sqrt{\pi})^3 \epsilon_0 c^3} \int d^3r k e^{ikr} \left(\frac{k_{||}^2}{k^2(k^2 - q^2)} - \frac{k_z^2}{k^2 q^2} \right) \\ = \frac{-1}{(\sqrt{\pi})^3 \epsilon_0 c^3} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \int d^3r k e^{ikr} \frac{1}{k^2(k^2 - q^2)} \right. \\ \left. - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \int d^3r k e^{ikr} \frac{1}{k^2 q^2} \right], \quad (38)$$

به روش مشابه، با گرفتن انتگرال قسمت زاویه‌ای، و انتخاب مناسب یک مسیر بسته در نیمه بالایی صفحه k مختلط، می‌توان به دست آورد:

$$G_{zz}(\mathbf{r}, \omega) = -\frac{1}{\sqrt{\pi} \epsilon_0 c^3 q^2} \times \\ \left\{ \left(\nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \left[\frac{1}{r} (e^{iqr} - 1) \right] - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \frac{1}{r} \right\} \\ = \frac{q}{\sqrt{\pi} \epsilon_0 c^3} \left[\frac{1}{qr} + \frac{i}{(qr)^2} - \frac{1}{(qr)^3} - \right. \\ \left. \frac{z^2}{r^3} \left(\frac{1}{qr} + \frac{3i}{(qr)^2} - \frac{3}{(qr)^3} \right) \right] e^{iqr}, \quad (39)$$

با توجه به (۱۶)، برای تعیین پتانسیل برهم کنش V_{AB} قسمت موهومی روابط (۳۷) و (۳۹) مورد نیاز است. با فرض آن که دو مولکول (یا دو اتم) در خلأ قرار دارند ($q = \frac{\omega}{c} = k$) و با انتخاب محور z ها در امتداد خط واصل بین دو ذره، خواهیم داشت:

$$\text{Im} [G_{xx}(r, \omega) + G_{yy}(r, \omega) + G_{zz}(r, \omega)] \\ = \frac{1}{\sqrt{\pi} \epsilon_0 c^3} \frac{\sin(kr)}{r}, \quad (40)$$

$$\text{Im} G_{zz}(r, \omega) = \frac{q}{\sqrt{\pi} \epsilon_0 c^3} \left[\frac{2 \sin(kr)}{(kr)^3} - \frac{2 \cos(kr)}{(kr)^2} \right], \quad (41)$$

سرانجام با قرار دادن (۴۰) و (۴۱) در رابطه (۱۶)، پتانسیل برهم کنش بین دو مولکول به شکل زیر به دست می‌آید:

$$V_{AB} = \frac{-\hbar}{\sqrt{\pi} \epsilon_0 c^3} \int_0^{+\infty} d\omega \omega^6 \alpha_A(\omega) \alpha_B(\omega) \\ \left[\frac{\sin(2kr)}{(kr)^2} + \frac{2 \cos(2kr)}{(kr)^3} - \frac{5 \sin(\delta kr)}{(kr)^4} - \right. \\ \left. \frac{6 \cos(\gamma kr)}{(kr)^5} + \frac{3 \sin(\gamma kr)}{(kr)^6} \right], \quad (42)$$

بودن عناصر غیر قطری تانسور تابع گرین کمکی g ، در فضای معکوس، توابع G_{xx} ، G_{yy} و G_{zz} بر حسب توابع g_{xx} ، g_{yy} و g_{zz} به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$G_{xx}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{(k_{||} k)^2} \left[k_x^2 k_z^2 g_{xx}(k, \omega) + \right. \\ \left. k^2 k_y^2 g_{yy}(k, \omega) + k_{||}^2 k_x^2 g_{zz}(k, \omega) \right], \quad (32)$$

$$G_{yy}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{(k_{||} k)^2} \left[k_y^2 k_z^2 g_{xx}(k, \omega) + \right. \\ \left. k^2 k_x^2 g_{yy}(k, \omega) + k_{||}^2 k_y^2 g_{zz}(k, \omega) \right], \quad (33)$$

$$G_{zz}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{k^2} \left[k_{||}^2 g_{xx}(k, \omega) + k_z^2 g_{zz}(k, \omega) \right], \quad (34)$$

و در نتیجه به آسانی می‌توان دید

$$G_{xx}(\mathbf{k}, \omega) + G_{yy}(\mathbf{k}, \omega) + G_{zz}(\mathbf{k}, \omega) = \\ g_{xx}(k, \omega) + g_{yy}(k, \omega) + g_{zz}(k, \omega), \quad (35)$$

با جایگذاری روابط (۳۰) و (۳۱) در این عبارت، انجام تبدیل فوریه (۲۳) و جایگزینی $r - r'$ با r خواهیم داشت:

$$G_{xx}(\mathbf{r}, \omega) + G_{yy}(\mathbf{r}, \omega) + G_{zz}(\mathbf{r}, \omega) = \\ \frac{1}{(\sqrt{\pi})^3 \epsilon_0 c^3} \int d^3r k e^{ikr} \left(\frac{2}{k^2 - q^2} - \frac{1}{q^2} \right) \\ = -\frac{1}{\epsilon_0 c^3 q^2} \delta(\mathbf{r}) - \frac{1}{(\sqrt{\pi})^3 \epsilon_0 c^3} \nabla^2 \times \\ \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dk \sqrt{\pi} \frac{1}{ikr} e^{ikr} \frac{2}{(k^2 - q^2)} \right), \quad (36)$$

که انتگرال قسمت زاویه‌ای گرفته شده است. با انتخاب یک حلقه بسته مناسب در نیمه بالایی صفحه k مختلط (و تغییر مناسب مسیر انتگرال گیری)، انتگرال فوق قابل محاسبه است، در نتیجه

$$G_{xx}(\mathbf{r}, \omega) + G_{yy}(\mathbf{r}, \omega) + G_{zz}(\mathbf{r}, \omega) = \\ -\frac{1}{\epsilon_0 c^3 q^2} \delta(r) - \frac{1}{\sqrt{\pi} \epsilon_0 c^3 q^2} \nabla^2 \left[\frac{1}{r} (e^{iqr} - 1) \right] \\ = -\frac{1}{\epsilon_0 c^3 q^2} \delta(r) + \frac{1}{\sqrt{\pi} \epsilon_0 c^3} \frac{1}{r} e^{iqr}, \quad (37)$$

با استفاده از (۳۴)، (۳۰)، (۳۱) و انجام تبدیل فوریه (۲۳)، خواهیم داشت:

$$G_{zz}(\mathbf{r}, \omega) =$$

که در آن (با فرض دو حالتی بودن ذره) $\alpha = \frac{\gamma d^2}{3\hbar\omega}$ قطبش‌پذیری استاتیکی است. در فواصل بزرگ‌تر (در مقایسه با λ_{n1})، قطبش‌پذیری مولکول (یا اتم) را می‌توان مستقل از بسامد تصور کرد (در واقع آن را همان قطبش‌پذیری استاتیکی در نظر گرفت) [۱] و بنابراین در رابطه (۴۲) ضرایب قطبش‌پذیری را از انتگرال بیرون آورد. حال، با معرفی تابع قطع $e^{-\lambda\omega r/c}$ (که λ یک پارامتر بدون بعد مثبت است) و ضرب آن در سمت راست (۴۲)، انتگرال‌های حاصل را به آسانی می‌توان گرفت. در ادامه با اعمال حد $\lambda \rightarrow 0$ روی عبارت به دست آمده، به نتیجه زیر خواهیم رسید:

$$V_{AB} = -\frac{23\hbar c}{4\pi r^6} \alpha_A \alpha_B, \quad (47)$$

که این همان نتیجه کازیمیر-پولدر است [۴ و ۵] و بیانگر وابستگی عکس توان هفتم فاصله (برای فواصل دورتر) است.

۵. نتایج و بحث در نتایج

برای دو مولکول غیر قطبی که در نزدیکی یکدیگر قرار دارند، میدان الکتریکی در موضع یک مولکول را می‌توان به صورت حاصل جمع میدان الکتریکی حالت خلأ و میدان ناشی از دو قطبی الکتریکی القایی وابسته به مولکول دیگر تصور کرد. ممان دو قطبی الکتریکی القاء شده در هر مولکول متناسب با میدان الکتریکی حالت خلأ (در موضع مولکول) است و در نتیجه میدان ناشی از آن نیز وابسته به میدان الکتریکی حالت خلأ است.

با استفاده از بسط فوریه (۱۰) میدان الکتریکی، فرض غیر وابسته بودن مدهای یک میدان الکترومغناطیسی و میدان الکتریکی (۱۳) ناشی از دو قطبی الکتریکی نوسانی متناسب به مولکول، انرژی برهم‌کنش بین دو مولکول را مطابق رابطه (۱۴) به تابع بستگی عملگر میدان الکتریکی حالت خلأ می‌توان ربط داد. از این رو در حالت کلی برای محاسبه پتانسیل برهم‌کنش، نیاز به کوانتس میدان الکترومغناطیسی است. از طرفی با استفاده از قضیه اتلاف-افت و خیز و فرمول کوبو در مکانیک آماری، تابع بستگی میدان الکتریکی را می‌توان مطابق با (۱۵) بر حسب

با اعمال $\rightarrow 4\pi\epsilon_0$ ، شکل این عبارت را در سیستم گوسی خواهیم داشت. برای محاسبه ضریب قطبش‌پذیری یک اتم (یا مولکول) واقع در حالت زمینه، از فرمول کرامر-هایزنبرگ می‌توان استفاده کرد [۱].

$$\alpha(\omega) = \frac{2}{3\hbar} \sum_n \frac{\omega_n |d_n|^2}{\omega_n^2 - \omega^2}, \quad (43)$$

که d_n عنصر ماتریسی عملگر ممان دو قطبی الکتریکی بین حالات زمینه و n ام و ω_n بسامد گذار بین این دو حالت است.

۴. حالات حدی

برای r های کوچک و بزرگ، پتانسیل برهم‌کنش (۴۲) شکل ساده‌تری به خود می‌گیرد. برای r های کوچک، جمله آخر در عبارت (۴۲) بیشترین نقش را دارد، از این رو می‌توان نوشت (در سیستم گوسی):

$$V_{AB} \approx \frac{-3\hbar}{\pi r^6} \int_0^{+\infty} d\omega \omega^6 \alpha_A(\omega) \alpha_B(\omega) \text{Sin}\left(\frac{\gamma\omega r}{c}\right), \quad (44)$$

با استفاده از (۴۳) و انتخاب یک حلقه به شکل ربع دایره (و با شعاع بی نهایت) در ربع اول صفحه ω مختلط و تغییر مناسب مسیر انتگرال‌گیری، این عبارت را به شکل زیر می‌توان نوشت:

$$V_{AB} = \frac{-3\hbar}{\pi r^6} \left(\frac{2}{3\hbar}\right)^2 \sum_{mn} \omega_{m1} \omega_{n1} |d_{m1}|^2 |d_{n1}|^2 \times \int_0^{\infty} \frac{du e^{-\gamma u r/c}}{(u^2 + \omega_{m1}^2)(u^2 + \omega_{n1}^2)}, \quad (45)$$

که u قسمت موهومی بسامد مختلط است ($\omega \rightarrow \omega + iu$). برای r های کوچک $e^{-\gamma u r/c} \approx 1$ و در نتیجه به وابستگی فضایی $\frac{1}{r^6}$ خواهیم رسید. حال اگر یک گذار خاص (با بسامد ω_0) را گذار غالب اختیار کنیم، با جایگذاری‌های $\omega_0 \rightarrow \omega_{m1}, \omega_{n1}$ و $d_{n1}, d_{m1} \rightarrow d$ به نتیجه لادن خواهیم رسید [۱ و ۳]

$$V_{AB} = \frac{-3\hbar}{\pi r^6} \left(\frac{2}{3\hbar}\right)^2 \omega_0^2 d^4 \int_0^{+\infty} du \frac{1}{(u^2 + \omega_0^2)^2} = -\frac{3\hbar\omega_0^2 \alpha^2}{4r^6}, \quad (46)$$

بوده است که ذرات قطبش پذیر در فضای آزاد قرار دارند (در نقاط دور از اجسام جامد و یا مایع، با تقریب خوبی هوا را می توان یک فضای آزاد تصور کرد).

برای تعیین قطبش پذیری یک اتم (یا مولکول) می توان از رابطه کرامر- هایزنبرگ (۴۳) استفاده کرد اما برای ذرات بزرگتر مانند نانو ذرات و یا میکرو ذرات، لازم است بسته به نوع آنها مدلی مناسب برای قطبش پذیری ارائه شود. برای ذرات ریز معلق در یک سیال ساکن رقیق (سیالی با ضریب شکست نزدیک به ۱)، با ارائه یک مدل مناسب برای قطبش پذیری (برحسب بسامد) و حل عددی عبارت کلی (۴۲)، با تقریب خوبی می توان پتانسیل برهم کنش را (در نقاط نه چندان نزدیک به سطوح مرزی) تعیین کرد.

به منظور کاربردی کردن بیشتر مسئله، با تعمیم تئوری به دو ذره ریز واقع در یک محیط دی الکتریک همگن، ذرات ریز معلق در یک مایع ساکن را نیز می توان مد نظر قرار داد. به روشی مشابه، با تعیین تابع گرین پتانسیل برداری در حضور یک تیغه رسانا و یا در حضور یک تیغه دی الکتریک، نیرو (یا پتانسیل برهم کنش) بین دو ذره قطبش پذیر را در حضور یک تیغه رسانا یا در حضور یک تیغه دی الکتریک را نیز می توان محاسبه کرده و به حل مسائل واقعی نزدیک تر شد.

سوی استفاده از روش تابع گرین، با کوانتیده کردن میدان الکترومغناطیسی در حضور سطوح مرزی و استفاده صریح از شکل عملگری میدان (در تعیین تابع بستگی میدان الکتریکی) نیز می توان پتانسیل برهم کنش بین دو ذره قطبش پذیر را محاسبه کرد و و سازگاری روش تابع گرین و روش کوانتش میدان در تعیین پتانسیل برهم کنش را نشان داد.

سپاس گذاری

از مساعدت های معاونت پژوهشی دانشگاه خلیج فارس سپاس گذاری می شود.

قسمت های موهومی مؤلفه های تانسور تابع گرین پتانسیل برداری نوشت و در نتیجه با توجه (۱۶)، با محاسبه تابع گرین پتانسیل برداری نیز می توان پتانسیل برهم کنش را تعیین کرد.

مؤلفه های تابع گرین پتانسیل برداری، معادلات دیفرانسیل جزئی (۲۲) را ارضاء می کنند که در حالت کلی حل آنها آسان نیست. با اعمال تبدیلات فوریه فضایی (۲۳) و (۲۴)، انجام دوران های متوالی حول محور های k_y و k_z (یا به عبارتی استفاده از ماتریس دوران (۲۷)) و معرفی تانسور تابع گرین کمکی (۲۸)، معادلات دیفرانسیل جزئی (۲۲) به روابط جبری (۲۹) تقلیل می یابند. روابط (۲۹) به آسانی قابل حل بوده و در نتیجه عناصر غیر صفر تانسور گرین کمکی طبق روابط (۳۰) و (۳۱) به دست می آیند. با استفاده از توابع گرین کمکی محاسبه شده، عناصر تانسور گرین مورد نیاز در فضای مختصات مطابق با روابط (۳۷) و (۳۹) تعیین شده و با جایگزینی در (۱۶)، پتانسیل برهم کنش بین دو مولکول (یا دو اتم) بر حسب قطبش پذیری ها و فاصله بین آن دو، به شکل عبارت انتگرالی (۴۲) به دست می آید. برای فواصل کوچک (در مقایسه با طول موج نور ناشی از گذارها به حالت زمینه)، پتانسیل برهم کنش (۴۲) به شکل ساده (۴۶) تقلیل می یابد که بیانگر وابستگی پتانسیل برهم کنش به عکس توان ششم فاصله بوده و در توافق با کار لادن است. برای فواصل بزرگتر، از (۴۲)، پتانسیل برهم کنش ساده (۴۷) نتیجه می شود که در تطابق با کار کازیمیر- پولدر، وابستگی به عکس توان هفتم فاصله را نشان می دهد.

از آنجا که پارامتر مطرح در عبارت پتانسیل برهم کنش، قطبش پذیری ذرات است، در حالت کلی، برای هر دو ذره خنثی، قطبش پذیر و واقع در فضای آزاد (خلاً بدون حد و مرز) نیز نتایج قابل کاربرد است. بسیاری از ذرات معلق موجود در طبیعت، هم خنثی و هم قطبش پذیر هستند و قدر مسلم محاسبه نیروی بینابین اهمیت بالایی دارد. به عنوان مثال، ذرات ریز معلق در آب، ذرات ریز روغن معلق در فضای آشپزخانه و یا ریزگردهای معلق در هوا را شاید بتوان به عنوان ذرات قطبش پذیر تلقی کرد. در این تحقیق برای سادگی فرض بر آن

مراجع

- Lett.* **68** (1992) 3698.
12. S M Barnett, B H Huttner, R Loudon, and R Matloob, *J. Phys. B* **29** (1996) 3763.
13. A Tip, *Phys. Rev. A* **56** (1997) 5022.
14. A Tip, *Phys. Rev. A* **57** (1998) 4818.
15. H Falinejad and S Najafi Ardekani, *Appl. Phys. B* **125** (2019) 208.
16. R Matloob, *Phys. Rev. A* **62** (2000) 022113.
17. C C Gerry and P L Knight, “*Introductory Quantum Optics*”, Cambridge University Press (2005)
18. E M Lifshitz, *Sov. Phys. JEPT* **2**, Part 1 (1956) 73
19. Landau and E Lifshitz, “*Statistical Physics Part 2*”, Pergamum Oxford (1980).
20. J D Jackson, “*Classical Electrodynamics*”, New York John Wiley and Son (1999).
1. P W Milonni, “*The Quantum Vacuum*”, Academic Press, New York (1994).
2. W H Keesom, *KNAW*, **18** (1915) 636.
3. F London, *Physik* **63** (1930) 245.
4. B R Holstein, *Am. J. Phys.* **69** (2001) 441.
5. H B G Casimir and D Polder, *Phys. Rev.* **73** (1948) 360.
6. D Kupiszewska and J Mostoveski, *Phys. Rev. A* **41** (1990) 4636.
7. D Kupiszewska, *Phys. Rev. A* **46** (1992) 2286.
8. F Kheirandish, M Soltani, and J Sarabadani, *Ann. Phys* **326** (2011) 657.
9. H Falinejad and F Bayat, *Int. J. Mod. Phys. B* **28** (2014) 1450232.
10. H Falinejad, *Eur. Phys. J. D* **71** (2017) 165.
11. S M Barnett, B H Huttner and R. Loudon, *Phys. Rev.*