

محاسبه پتانسیل برهم کنش وان دروالس گرمایی با استفاده از پتانسیل کازیمیر- پولدر

الهام سمعی و حسن صفری

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

پست الکترونیکی: h.safari@kgut.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۶/۰۵/۱۷؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۶/۱۲/۱۱)

چکیده

در این پژوهش، پتانسیل کازیمیر- پولدر وابسته به دما برای یک اتم که در مجاورت یک کره دی‌الکتریک قرار دارد، با استفاده از فرمول موجود بر حسب تابع گرین محاسبه شده است. با حدگیری از اندازه کره، پتانسیل را برای کره بزرگ و کره کوچک ساده کرده‌ایم. حد کره بزرگ، پتانسیل یک اتم را در حضور یک نیم فضای دی‌الکتریک تخت و سپس در حضور یک رسانای تخت آرمانی به دست می‌دهد. در حدگیری برای کره کوچک، با جایگزینی مناسب پاسخ الکتریکی کره با قطبش پذیری یک اتم، فرمول پتانسیل برهم کنش وان دروالس وابسته به دما بین دو اتم حاصل شده است.

واژه‌های کلیدی: برهم کنش وان دروالس گرمایی، پتانسیل کازیمیر- پولدر گرمایی، تانسور گرین، کره دی‌الکتریک، قطبش پذیری

۱. مقدمه

به هر جسم خنثی و ناقطیبده، ولی قطبش‌پذیر، در میدان خلأ کوانتومی نیرویی وارد می‌شود که به نیروی پاشندگی معروف است. این نیرو که در اثر افت و خیز میدان کوانتیده ایجاد می‌شود، یک اثر صرفاً کوانتومی است که مانسته کلاسیکی ندارد و از محاسبه شیب انرژی پتانسیلی به همین نام به دست می‌آید. نیروهای پاشندگی از لحاظ اندازه اجسام در حال برهم کنش، به نیروی کازیمیر (بین اجسام ماکروسکوپی)، نیروی کازیمیر- پولدر (CP)، بین اجسام ماکروسکوپی و میکروسکوپی، و نیروی وان دروالس (بین اجسام میکروسکوپی) تقسیم‌بندی می‌شوند [۱] و در فهم پدیده‌های متعددی (غالباً در مطالعه اثر سطح) از جمله چسبندگی [۲] و

مویستگی [۳] نقش مهمی دارند. فرمول‌بندی این پتانسیل برای دو اتم یا مولکول در فضای تهی از ماده (اتم یا مولکول را در این مقاله به اختصار اتم می‌نامیم) و در فاصله‌ای که بتوان سرعت نور را نامتناهی فرض کرد (حد غیر تأخیری) اولین بار توسط لاندن^۱ و برای حالتی که دو اتم در حالت پایه و میدان در حالت خلأ کوانتومی باشد، انجام شد [۴] و سپس توسط کازیمیر و پولدر به فاصله دلخواه بین اتمی تعمیم یافت [۵]. به منظور تعمیم فرمول‌بندی، تا کنون تلاش‌های زیادی انجام گرفته است که در نظر گرفتن پاشندگی و اتلاف برای محیط [۶] و در نظر گرفتن برانگیختگی در اتم‌ها [۷] از این جمله هستند. در پژوهش دیگری

۱. London

$|n\rangle$ باشد، به این معنی که عملگر چگالی اتم در فضای هیلبرت بسط یافته از ویژه حالات اتم به صورت

$$\hat{\rho}_A = \sum_n p_n |n\rangle\langle n|, \quad (1)$$

بیان شود، با محاسبات اختلالی مرتبه دوم، انرژی پتانسیل CP برای میدان الکترومغناطیسی گرمایی به صورت

$$U(\mathbf{r}_A) = U^{n,r}(\mathbf{r}_A) + U^r(\mathbf{r}_A), \quad (2)$$

به دست می‌آید [۱۱] که در آن U^r و $U^{n,r}$ ، به ترتیب، قسمت‌های غیرتشدید و تشدید پتانسیل هستند که با روابط زیر داده می‌شوند:

$$U^{n,r}(\mathbf{r}_A) = \mu_0 k_B T \sum_n p_n \sum_{j=0}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{j0}\right) \xi_j^2 \alpha_n(i\xi_j) \text{tr} \mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_A, i\xi_j), \quad (3)$$

$$U^r(\mathbf{r}_A) = \frac{-\mu_0}{3} \sum_{nk < n} p_n [N(\omega_{nk}) + 1] d_{nk}^{\dagger} \omega_{nk}^{\dagger} \text{tr} [\text{Re} \mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_A, \omega_{nk})] + \frac{\mu_0}{3} \sum_{nk > n} p_n N(\omega_{kn}) d_{kn}^{\dagger} \omega_{kn}^{\dagger} \text{tr} [\text{Re} \mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_A, \omega_{kn})]. \quad (4)$$

در این روابط، μ_0 ، k_B ، T ، به ترتیب، تراوایی مغناطیسی خلاء، ثابت بولتزمن، و دمای مطلق گاز هستند، d_{nk} و ω_{nk} بسامد گذار اتمی و گشتاور دوقطبی الکتریکی بین ویژه‌حالات $|k\rangle$ و $|n\rangle$ و $\xi_j = 2j\pi k_B T / \hbar$ ، j بسامدهای ماتسوبارا هستند و نماد tr به معنی رد است. به علاوه، تابع $N(\omega)$ تعداد میانگین فوتون‌های میدان الکترومغناطیسی با بسامد ω در دمای T است که از آمار بوز-اینشتین پیروی می‌کند

$$N(\omega) = \frac{1}{\exp(\hbar\omega / k_B T) - 1}, \quad (5)$$

رابطه (۳)، $\alpha_n(\omega)$ قطبش‌پذیری الکتریکی اتم در ویژه حالت n ام است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\alpha_n(\omega) = \frac{2}{3\hbar} \sum_{k \neq n} \frac{\omega_{kn} d_{kn}^{\dagger}}{\omega_{kn}^2 - \omega^2}, \quad (6)$$

انرژی کازیمیر در چارچوب نظریه ریسمان از برهم‌نهی مدهای نوسانگر هماهنگ میدان کوانتیده خلاء بررسی شده است [۸].

فرض دمای صفر مطلق که فرض مشترک محاسبات اولیه است، یکی از مشکلات پیش رو برای انجام آزمایش یافته‌های نظری است. از این رو، تعمیم فرمول‌بندی به دمای غیرصفر از جمله موضوعات مورد علاقه است، برهم‌کنش وان‌دروالس دو اتم در فضای تهی از ماده در حضور میدان گرمایی در مرجع [۹] بررسی شده است.

از جمله زمینه‌های پژوهشی که امروزه مورد علاقه روز افزونی قرار گرفته، لایه‌نشانی است؛ ذرات در فرایند قرارگیری بر روی سطح، متحمل نیروی پاشندگی کازیمیر-پولدر می‌شوند و هنگامی که به سطح نزدیک‌تر می‌شوند برهم‌کنش بین ذرات (نیروی پاشندگی وان‌دروالس) نیز بر نحوه حرکت‌شان تاثیر می‌گذارد. از این رو، با مطالعه عوامل مؤثر بر نیروهای پاشندگی، به صورت بالقوه، می‌توانیم در مسیر کنترل بیشتر بر حرکت ذرات قدم برداریم. بنا به اطلاع ما، تنها هندسه خاصی که در محاسبه پتانسیل پاشندگی CP گرمایی تا کنون بررسی شده، نیم‌فضای دی‌الکتریک تخت است [۱۰].

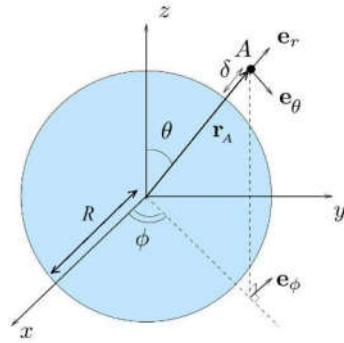
در این مقاله پس از معرفی فرمول‌بندی پتانسیل CP گرمایی در بخش ۲، در بخش ۳ به محاسبه آن برای اتم در مجاورت یک کره دی‌الکتریک پرداخته‌ایم. بخش ۴ به حدگیری از پتانسیل برای شعاع بزرگ اختصاص یافته که خواهیم دید: نتیجه‌ای حاصل می‌شود که پیشتر برای اتم در حضور یک نیم‌فضای دی‌الکتریک تخت به دست آمده است [۱۰]. در بخش ۵ حدگیری برای کره کوچک ارائه گردیده و با استفاده از آن، فرمول پتانسیل برهم‌کنش وان‌دروالس گرمایی بین دو اتم حاصل شده است. در آخر، در بخش ۶ خلاصه و نتیجه‌گیری به همراه اشاره‌ای به زمینه‌های پژوهشی بالقوه آورده شده‌اند.

۲. فرمول‌بندی انرژی پتانسیل CP گرمایی

اتم همسانگرد A را که در حالت کوانتومی دلخواهی قرار دارد، در موقعیت \mathbf{r}_A در حضور آرایش دلخواهی از اجسام دی‌الکتریک در نظر می‌گیریم. اگر p_n احتمال قراردادن اتم در ویژه حالت

۱. Matsubara Frequencies

۲. Trace



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) اتم A در فاصله r_A از مرکز یک کره دی الکتریک همگن به شعاع R.

در روابط (۹) و (۱۰)، $h_m^{(l)}(z)$ تابع هنکل کروی نوع اول و علامت پریم به معنی مشتق است و ضرایب B_m^M و B_m^N ، با تعریف $z_0 = R\omega/c$ و $z_1 = \sqrt{\epsilon(\omega)} z_0$ ، به صورت

$$B_m^M = -\frac{[z_0 j_m(z_0)]' j_m(z_1) - [z_1 j_m(z_1)]' j_m(z_0)}{[z_0 h_m^{(l)}(z_0)]' j_m(z_1) - [z_1 j_m(z_1)]' h_m^{(l)}(z_0)}, \quad (11)$$

$$B_m^N = -\frac{\epsilon(\omega)[z_0 j_m(z_0)]' j_m(z_1) - [z_1 j_m(z_1)]' j_m(z_0)}{\epsilon(\omega)[z_0 h_m^{(l)}(z_0)]' j_m(z_1) - [z_1 j_m(z_1)]' h_m^{(l)}(z_0)}, \quad (12)$$

داده می‌شوند [۱۳] که در آن، $j_m(z)$ تابع بسل کروی نوع اول است.

تابع گرین به عنوان یک تابع پاسخ در حوزه بسامد، همانند گذردهی الکتریکی و قطبش پذیری الکتریکی اتم، از رابطه انعکاسی شوارتز^۱ پیروی می‌کند؛ $G(\omega) = G^*(-\omega^*)$. بنابراین، قسمت حقیقی (موهومی) آن تابعی زوج (فرد) از بسامدهای حقیقی است و در صورتی که بسامد موهومی باشد، تابع گرین مقداری حقیقی خواهد داشت [۷]. با توجه به این نکته و به کارگیری روابط (۹) و (۱۰) در روابط (۳) و (۴) خواهیم داشت:

$$U^{NR}(r_A) = -\frac{\mu_0 k_B T}{4\pi c} \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \delta_j \right) \xi_j^{\nu} \sum_n p_n \alpha_n(i\xi_j) \sum_{m=1}^{\infty} (\nu m + 1) \quad (13)$$

در روابط (۳) و (۴)، $G^{(l)}$ قسمت پراکندگی تابع (تانسور) گرین است که از معادله دیفرانسیل

$$\nabla \times \nabla \times G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - \epsilon(\mathbf{r}, \omega) \frac{\omega^2}{c^2} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \mathbf{I} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (7)$$

پیروی می‌کند [۱۲]. تمام ویژگی‌های هندسی و الکتریکی محیط از طریق گذردهی الکتریکی نسبی، $\epsilon(\mathbf{r}, \omega)$ ، موجود در تابع $G^{(l)}$ وارد محاسبات می‌شوند. لازم به ذکر است، پتانسیل تشدید در صورتی که اتم در حالت پایه خود قرار داشته باشد صفر است. علاوه بر این، در صورتی که اتم در تعادل ترمودینامیکی با میدان کوانتیزه باشد ($p_n = p_k \exp[-\hbar \omega_{nk} / (k_B T)]$) نیز، قسمت تشدید پتانسیل صفر می‌شود [۱۱].

۳. پتانسیل CP گرمایی در حضور کره دی الکتریک

برای محاسبه پتانسیل CP یک اتم در موقعیت \mathbf{r}_A در حضور یک کره، نیاز است قسمت پراکندگی تابع گرین $G^{(l)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ را که برای دو نقطه \mathbf{r} و \mathbf{r}' در خارج از یک کره در مرجع [۱۳] داده شده است، برای حالت $\mathbf{r} = \mathbf{r}' = \mathbf{r}_A$ ساده کرد. با در نظر گرفتن اتم در فاصله r_A از مرکز کره دی الکتریک همگن به شعاع R و انتخاب دستگاه مختصات کروی به گونه‌ای که مبدا آن بر مرکز کره منطبق باشد (شکل ۱)، پس از انجام اندکی عملیات ریاضی دیده می‌شود که تانسور گرین مورد نیاز در روابط (۳) و (۴)، تانسوری قطری است؛

$$G^{(l)}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_A, \omega) = \sum_{i=r, \theta, \phi} G_{ii}^{(l)}(r_A) \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i, \quad (8)$$

که در آن $\mathbf{r}_A = r_A \mathbf{e}_r$ و \mathbf{e}_r ، \mathbf{e}_θ و \mathbf{e}_ϕ ، به ترتیب، بردارهای واحد شعاعی، قطبی و سمتی دستگاه مختصات کروی هستند. با استفاده از نمادگذاری $z = r_A \omega / c$ خواهیم داشت

$$G_{rr}^{(l)} = \frac{ic}{4\pi \omega r^2} \sum_{m=1}^{\infty} m(m+1)(\nu m + 1) B_m^N(\omega) [h_m^{(l)}(z)]^{\nu}, \quad (9)$$

$$G_{\theta\theta}^{(l)} = G_{\phi\phi}^{(l)} = \frac{-ic}{4\pi \omega r^2} \sum_{m=1}^{\infty} (\nu m + 1) \left\{ z^{\nu} B_m^M(\omega) [h_m^{(l)}(z)]^{\nu} + B_m^N(\omega) [z h_m^{(l)}(z)]^{\nu} \right\}, \quad (10)$$

۴. Schwartz Reflection Principle

می‌توان دید که در این تقریب و در غیاب پاسخ مغناطیسی برای کره، B_m^M در مقایسه با B_m^N بسیار کوچک است (برای تعقیب بیشتر محاسبات پیوست مرجع [۱۳] را ببینید)، و خواهیم داشت:

$$B_m^M(\omega) = 0 \tag{17}$$

$$B_m^N(\omega) = \frac{\gamma i m (R \omega / c)^{\gamma m + 1} \varepsilon(\omega) - 1}{[(\gamma m + 1)!!]^{\gamma} \varepsilon(\omega) + 1}$$

با به کار بردن این تقریب‌ها در عناصر قطری تانسور گرین، روابط (۹) و (۱۰)، و جایگزینی آن‌ها در فرمول پتانسیل به دست می‌آوریم:

$$U^{n,r}(\delta) = \frac{-k_B T}{\lambda \pi^{\gamma} \varepsilon_0 \delta^{\gamma}} \tag{18}$$

$$\sum_{j=0}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{\gamma} \delta j^{\gamma} \right) \sum_n p_n \alpha_n (i \xi_j) \frac{\varepsilon(i \xi_j) - 1}{\varepsilon(i \xi_j) + 1},$$

$$U^r(\delta) = \frac{1}{\gamma \pi \varepsilon_0 \delta^{\gamma}} \sum_n p_n \sum_{k \neq n} N(\omega_{kn}) d_{kn}^{\gamma} \frac{|\varepsilon(\omega_{kn})|^{\gamma} - 1}{|\varepsilon(|\omega_{kn}|) + 1|^{\gamma}}, \tag{19}$$

($\mu_0 c^{\gamma} = \varepsilon_0^{-1}$). با توجه به حالت حدی در نظر گرفته شده، روابط (۱۸) و (۱۹) را می‌توان قسمت‌های تشدید و غیرتشدید پتانسیل یک اتم در فاصله δ از یک نیم‌فضای تخت دی‌الکتریک در نظر گرفت که با نتیجه متناظر در مرجع [۱۰] مطابقت دارد. هر دو قسمت غیرتشدید و تشدید پتانسیل، منفی و متناسب با δ^{-3} هستند، به این معنی که نیروی حاصل، جاذب و متناسب با δ^{-4} است.

از این روابط می‌توان فرمول پتانسیل گرمایی کازیمیر-پولدر را در حضور رسانای آرمانی به دست آورد. به این منظور کافی است گذردهی الکتریکی را به بی‌نهایت میل دهیم ($\varepsilon \rightarrow \infty$). با این کار، قسمت غیرتشدید را به صورت

$$U^{n,r}(\delta) = \frac{-k_B T}{\lambda \pi^{\gamma} \varepsilon_0 \delta^{\gamma}} \sum_n p_n \sum_k \frac{\gamma \omega_{kn} d_{kn}^{\gamma}}{\gamma \hbar} \left(-\frac{1}{\gamma \omega_{kn}^{\gamma}} + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j^{\gamma} \omega_{kn}^{\gamma} + \gamma \pi^{\gamma} k^{\gamma} B^{\gamma} T^{\gamma} j^{\gamma} / \hbar^{\gamma}} \right), \tag{20}$$

به دست می‌آوریم که در آن از رابطه (۶) برای قطبش پذیری

$$\times \left(\frac{B_m^N(i \xi_j)}{z^{\gamma}} \left\{ m(m+1) \left[h_m^{(0)}(z) \right]^{\gamma} + \left[z h_m^{(0)}(z) \right]^{\gamma} + B_m^M(i \xi_j) \left[h_m^{(0)}(z) \right]^{\gamma} \right\} \right)_{z=ir_A \xi_j / c},$$

$$U^r(r_A) = \frac{\mu_0}{\gamma \pi c} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_n \sum_{k \neq n} (\gamma m + 1) \tag{14}$$

$$p_n N(|\omega_{nk}|) |\omega_{nk}|^{\gamma} d_{nk}^{\gamma} \times \text{Im} \left(\frac{B_m^N(|\omega_{nk}|)}{z^{\gamma}} \left\{ m(m+1) \left[h_m^{(0)}(z) \right]^{\gamma} + \left[z h_m^{(0)}(z) \right]^{\gamma} + B_m^M(|\omega_{nk}|) \left[h_m^{(0)}(z) \right]^{\gamma} \right\} \right)_{z=ir_A |\omega_{nk}| / c}.$$

نکته دیگری که در نوشتن رابطه (۱۴) به کار برده‌ایم، این است که $\omega_{kn} = -\omega_{nk}$.

بررسی بیشتر رفتار پتانسیل بر حسب فاصله از کره با استفاده از روابط (۱۳) و (۱۴)، به ارائه مدلی برای تابع پذیرفتاری الکتریکی کره و نیز گشتاورهای دوقطبی الکتریکی اتم و بسامد هر یک از گذارهای آن نیاز دارد (در عمل می‌توان به تعداد محدودی از گذارهای اتمی اکتفا کرد). با وجود این، می‌توان با حدگیری از شعاع کره، بدون نیاز به مدلی خاص، به تحلیل بیشتر نتایج به دست‌آمده پرداخت. در ادامه این مقاله، حدگیری‌های مفیدی از شعاع کره (حد کره بزرگ و کوچک) انجام گرفته است.

۴. حد کره بزرگ

حد کره بزرگ را بر حسب پارامتر $\delta \equiv r_A - R$ به عنوان فاصله اتم از سطح کره (شکل ۱)، و با شرط $\delta \ll R$ معرفی می‌کنیم. با بررسی مقادیر حدی توابع هنکل و بسل موجود در تابع گرین، می‌توان دید که سهم اصلی در پتانسیل‌های (۱۳) و (۱۴) توسط m های بسیار بزرگ داده می‌شود [۱۴]، که برای آنها توابع بسل و هنکل کروی موجود در تابع گرین به صورت زیر تقریب زده می‌شوند [۱۵]:

$$j_m(z) \approx \frac{z^m}{(\gamma m + 1)!!} \left[1 - \frac{z^{\gamma}}{\gamma m + \gamma} \right], \tag{15}$$

$$h_m^{(0)}(z) = -i \frac{(\gamma m - 1)!!}{z^{\gamma m + 1}} \left[1 + \frac{z^{\gamma}}{\gamma m - \gamma} \right], \tag{16}$$

ضرایب B_m^N و B_m^M نیز، با استفاده از روابط (۱۵) و (۱۶)

$$B_m^M(\omega) = 0 \quad (26)$$

$$B_m^N(\omega) = \frac{i(2m+1)(m+1)[\varepsilon(\omega)-1]}{[(2m+1)!!]^2 [m\varepsilon(\omega)+m+1]} \left(\frac{R\omega}{c}\right)^2$$

علاوه بر این، می توان نشان داد که در جمع های روی m روابط (۹) و (۱۰)، کافی است تنها جمله $m=1$ را نگه داریم [۱۴]. با این کار، و با وارد کردن شکل صریح تابع هنکل که عبارت است از:

$$h_j^{(1)}(x) = -\frac{i+x}{x^2} e^{ix}, \quad (27)$$

همراه با جایگزینی رابطه (۲۶) در روابط (۱۳) و (۱۴)، در حد گره کوچک می رسمیم به

$$U^{nr}(r) = \frac{k_B TR^2}{2\pi\varepsilon_0 r_A^2} \sum_{j=0}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{j,0}\right) \sum_n p_n \alpha_n (i\xi_j) \frac{\varepsilon(i\xi_j)-1}{\varepsilon(i\xi_j)+2} f(r_A \xi_j / c), \quad (28)$$

$$U^r(r) = \frac{-R^2}{\varepsilon\pi\varepsilon_0 r_A^2} \sum_n p_n \sum_{k \neq n} N(\omega_{kn}) d_{kn}^2 \frac{\varepsilon(\omega_{kn})-1}{\varepsilon(\omega_{kn})+2} g(r_A \omega_{kn} / c), \quad (29)$$

که در آنها توابع f و g عبارتند از:

$$f(x) = (x^4 + 2x^3 + 5x^2 + 6x + 3) e^{-2x}, \quad (30)$$

$$g(x) = (x^4 - 5x^2 + 3) \cos(2x) + (6x - 2x^3) \sin(2x). \quad (31)$$

می توان با استفاده از این روابط فرمول پتانسیل برهم کنش وان دروالس دو اتم را در فضای تهی به دست آورد. به این منظور، ابتدا از رابطه کلاسیوس- ماساتی^۱ استفاده می کنیم. این رابطه بیان می کند که برای هر ماده، کمیت $(\varepsilon-1)/(\varepsilon+2)$ متناسب با چگالی تعداد مولکول های آن است [۱۷]. در این صورت، اگر قطبش پذیری الکتریکی مولکول نوع i از گره را با $\alpha_i(\omega)$ و تعداد مولکول های نوع i بر واحد حجم را با n_i نشان دهیم، خواهیم داشت:

$$\frac{\varepsilon(\omega)-1}{\varepsilon(\omega)+2} = \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_i n_i \alpha_i(\omega) \equiv \frac{\alpha_{sp}}{3V_0\varepsilon_0} = \frac{\alpha_{sp}(\omega)}{4\pi\varepsilon_0 R^3}, \quad (32)$$

و شکل صریح بسامدهای ماتسوبارا استفاده کرده ایم. جمع موجود روی z در رابطه (۲۰) را می توان با استفاده از اتحاد

$$\sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{x^2 + j^2} = \frac{1}{2x^2} + \frac{\pi}{2x} \coth(\pi x), \quad (21)$$

(مرجع [۱۶] را ببینید) به صورت بسته نوشت. به این منظور، با تغییر متغیر $\hbar\omega_{kn}/(2\pi k_B T) = \eta$ داریم:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{\omega_{kn}^2 + 2\pi^2 k_B^2 T^2 j^2 / \hbar^2} = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 k_B^2 T^2} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{\eta^2 + j^2} = \frac{1}{2\omega_{kn}^2} + \frac{\hbar^2}{4\pi^2 k_B^2 T^2 \eta} \coth(\pi\eta), \quad (22)$$

که با قراردادن آن در معادله (۲۰) خواهیم داشت:

$$U^{nr}(\delta) = \frac{-1}{4\pi^2 \varepsilon_0 \delta^2} \sum_n p_n \sum_{k \neq n} d_{kn}^2 \coth\left(\frac{\hbar\omega_{kn}}{2k_B T}\right), \quad (23)$$

قسمت تشدید پتانسیل CP در حضور رسانای تخت، به سادگی و با اعمال حد $\varepsilon \rightarrow \infty$ در رابطه (۱۹) به دست می آید:

$$U^r(\delta) = \frac{1}{24\pi\varepsilon_0 \delta^3} \sum_n p_n \sum_{k \neq n} N(\omega_{kn}) d_{kn}^2. \quad (24)$$

برای نشان دادن سازگاری این روابط با پژوهش های انجام شده می توان حد دمای صفر را در نظر گرفت. در این دما حاصل رابطه (۲۳)، نتیجه به دست آمده برای پتانسیل غیر تشدید یک اتم در دمای صفر در حضور یک رسانای تخت در مرجع [۶] بازمی آید می شود. قسمت تشدید پتانسیل، رابطه (۲۴)، نیز با نتیجه متناظر در مرجع [۱۰] مطابقت دارد.

۵. حد گره کوچک - پتانسیل برهم کنش وان دروالس

در حد گره کوچک ($R \ll r_A$) با توجه به کوچک بودن مقادیر z_0 و z_1 ، ضرایب B_n^M و B_n^N که با معادلات (۱۱) و (۱۲) معرفی شده اند، با جانشانی مقادیر تقریبی توابع بسل و هنکل [۱۵]

$$j_m(z) \approx \frac{z^m}{(2m+1)!!} \left(1 - \frac{z^2}{2m+6}\right) \quad (25)$$

$$h_m^{(1)}(z) \approx -i \frac{(2m-1)!!}{z^{m+1}} \left(1 - \frac{z^2}{2-4m}\right),$$

به صورت زیر ساده می شوند [۱۳]:

حالت کوانتومی دلخواه، پتانسیل اتم در مجاورت یک گره دی الکتریک محاسبه شد. سپس، با حدگیری از رابطه به دست آمده در حد گره بزرگ، فرمولی برای پتانسیل CP در حضور نیم فضای دی الکتریک تخت حاصل شد و دیده شد که نیروی متناظر با آن با توان چهارم فاصله از سطح نیم فضا نسبت عکس دارد. با حدگیری از کره برای شعاع های کوچک و جانمایی کره با یک اتم که با استفاده از رابطه کلاسیوس - ماساتی انجام شد، فرمولی برای پتانسیل برهم کنش وان دروالس وابسته به دما به دست آمد. رابطه به دست آمده از لحاظ وابستگی به فاصله، مطابق با فرمول مربوط به این برهم کنش در دمای صفر است، که پیشتر برای اتم های برانگیخته به دست آمده است.

فرمول برهم کنش وان دروالس به دست آمده در این مقاله برای دو اتم در فضای تهی از ماده به کار می رود و از این رو، در مواردی می توان از آن استفاده کرد که فاصله اجسام مادی موجود در مسئله از اتم ها، بسیار بزرگ تر از فاصله اتم ها باشد. از جمله در بر گرفتن اثر محیط مادی بر برهم کنش وان دروالس باشد. همچنین، با توجه به این که فرمول پتانسیلی که در این مقاله با آن شروع کرده ایم مبتنی بر نظریه اختلال است، در صورتی که برهم کنش اتم - میدان قوی باشد، برای مثال، وقتی اتم (ها) در محیطی شبه کاواک قرار گرفته باشند (مانند مرجع [۱۹])، پژوهشی ورای اعتبار تئوری اختلال را می طلبد.

با به کارگیری رابطه (۳۲) در روابط (۲۸) و (۲۹) به دست می آوریم:

$$U^{n,r}(r) = -\frac{k_B T}{\lambda \pi^2 \epsilon_0^2 r^6} \sum_{j=0}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{j0}\right) \quad (33)$$

$$\sum_n p_n \alpha_n(i\xi_j) \alpha_{sp}(i\xi_j) f(r\xi_j/c),$$

$$U^r(r) = \frac{1}{24 \pi^2 \epsilon_0^2 r^6} \quad (34)$$

$$\sum_k N(\omega_{kn}) d_{kn}^2 \alpha_{sp}(\omega_{kn}) g(r\omega_{kn}/c).$$

در رابطه (۳۳) می توان قطبش پذیری کره کوچک را با قطبش پذیری اتمی مانند B جایگزین کرد و از رابطه حاصل به عنوان قسمت غیر تشدید پتانسیل برهم کنش وان دروالس گرمایی دو اتم یاد کرد. قسمت تشدید پتانسیل برهم کنش، در صورتی که اتم A در حالت پایه باشد یا با میدان الکترومغناطیسی در تعادل گرمایی باشد، برابر با صفر می شود. قسمت غیر تشدید پتانسیل برهم کنش گرمایی رابطه (۳۳) با مرجع [۹] که برای اتم در حالت پایه داده شده است تطابق دارد. لازم به ذکر است، قسمت تشدید پتانسیل برهم کنش گرمایی، که بنا به اطلاع ما تا کنون گزارش نشده است، از لحاظ نحوه وابستگی به فاصله دو اتم، با آنچه در مرجع [۱۸] برای دو اتم برانگیخته در دمای صفر به دست آمده است، یکسان است.

۶. خلاصه و نتیجه گیری

در این مقاله، با استفاده از فرمول پتانسیل CP گرمایی یک اتم در

مراجع

1. S Y Buhmann and D-G Welsch, *Progress in Quant. Elect.* **31** (2007) 51.
2. E Rabinowicz, "Friction and Wear of Materials", John Wiley & Sons, Inc. New York (1965).
3. B W Ninham and V Yaminsky, *Langmuir* **17** (1997) 2097.
4. F London, *Z Phys.* **63** (1930) 245; F. London, *Z. Phys. Chem. Abt. B* **11** (1930) 222.
5. H B G Casimir and D Polder, *Phys. Rev.* **73** (1948) 360.
6. S Y Buhmann, et al., *Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.* **6**, (2004) 127.
7. S Y Buhmann, et al., *Phys. Rev. A* **70** (2004) 052117.
8. Y Koohsarian and A Shirzad, *Iran. J. Phys. Res.* **16** 3 (2016) 107.
- ۸ ی کوهساریان و ا شیرزاد، *مجله پژوهش فیزیک ایران* **۱۶** ۳ (۲۰۱۶) ۱۰۷.
9. H Wennerström, J Daicic, and B W Ninham, *Phys. Rev. A* **60** (1999) 2581.
10. S Å Ellingsen, et al., *Phys. Rev. A* **79** (2009) 052903.
11. S Y Buhmann, "Dispersion Forces II", Springer, London (2012).
12. S Y Buhmann, D T Butcher, and S Scheel, *New J. Phys.* **14** (2012) 083034.

- and Tables*”, McGraw-Hill New York (1968).
17. J D Jackson, “*Classical Electrodynamics*”, 3rd Ed., John Wiley & Sons, Inc. New York (1999).
18. H Safari and M R Karimpour, *Phys. Rev. Lett.* **114** (2015) 013201.
19. S Esfandiarpour *et al.*, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* in press.
13. H Safari, D G Welsch, H T Dung, and S Y Buhmann, *Phys. Rev. A* **77** (2008) 053824.
14. S Y Buhmann, H T Dung, and D G Welsch, *J. Opt. B: Quant. Semiclass. Opt.* **6** (2004) 127.
15. M Abramowitz and I. A. Stegun, “*Pocketbook of Mathematical Functions*”, Dover, New York, (1973).
16. M R Spiegel, “*Mathematical Handbook of Formulas*