بسم الله الرحمن الرحیم

دانشگاه اصفهان
دانشکده علوم
گروه فیزیک

پایان نامه‌ی کارشناسی‌ارشد رشته‌ی فیزیک گرایش بنیادی

نیروهای پاشندگی در الکترودینامیک کوانتومی ماکروسکوپی

استاد راهنما:
دکتر مجید عموشاهی

پژوهشگر:
عاطفه عسکری‌فرد

آبان‌ماه ۱۳۹۱

کلیه‌ی حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات و
نوآوری‌های ناشی از تحقیق موضوع این پایان‌نامه متعلق به دانشگاه
اصفهان است.

دانشگاه اصفهان
دانشکده علوم
گروه فیزیک

پایان‌نامه‌ی کارشناسی‌ارشد رشته فیزیک گرایش بنیادی خانم عاطفه عسکری‌فرد

تحت عنوان

نیروهای پاشندگی در الکترودینامیک کوانتومی ماکروسکوپی

در تاریخ ۱۳۹۱/۸/۳۰ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه‌ی .... به تصویب نهائی رسید.

۱- استاد راهنمای پایان‌نامه دکتر مجید عموشاهی با مرتبه‌ی علمی استادیار امضا
۲- استاد داور داخل گروه دکتر سیدجواد اخترشناس با مرتبه‌ی علمی دانشیار امضا
۳- استاد داور خارج گروه دکتر بهروز میرزا با مرتبه‌ی علمی استاد امضا

امضای مدیرگروه

چکیده:
شرح نیروهای پاشندگی در چارچوب الکترودینامیک کوانتومی ماکروسکوپیک در محیط خطی، پاشنده و جاذب، ترکیبی از مزایای استفاده از روش‌های معمول الکترودینامیک کوانتومی استاندارد و روش‌های بر اساس نظریه پاسخ‌دهنده خطی در یک روش طبیعی است. این شرح، بیانات معتبر عمومی برای نیروهای بین اجسام و نیروهای وارد بر اتم‌ها در حضور اجسام ارائه می‌دهد که این بیانات به روشنی روابط بین انواع مختلف نیروهای پاشندگی را نشان می‌دهند. با در نظر گرفتن مثال‌هایی، تاثیر فاکتورهای متفاوت مثل شکل، اندازه، خاصیت‌های الکتریکی و مغناطیسی یا در نظر گرفتن محیط روی نیروها نشان داده شده است.

در این پایان نامه براساس :

۱) کوانتش میدان الکترومغناطیسی در حضور محیط مغناطو-دی‌الکتریک خطی علی بدون پاشندگی فضایی و

۲) نیروی لورنتس وارد بر بارها و جریان‌های داخلی محیط

به یک بیان عمومی برای نیروی کازیمیر وارد بر جسم‌های مغناطو-دی‌الکتریک در حضور محیط مغناطو-دی‌الکتریک رسیده‌ایم. در این راستا فرمول‌های لیف‌شیتز برای ساختارهای مسطح (که تنها برای حالتی که فاصله بین دو صفحه خلا می‌باشد معتبر است.) را به حالتی که فاصله بین دو صفحه با محیط مغناطو-دی‌الکتریک پر شده است توسعه داده‌ایم. در این پژوهش ما ناتوانایی تانسور تنش مینکوفسکی (روش استفاده شده در مقالات که هیچگاه درستی آن اثبات نشد.) در محاسبه نیروی کازیمیر بررسی کرده‌ایم.

برای ارتباط برقرار کردن با تئوری‌های میکروسکوپی باید مواد را به شکل میکروسکوپی توصیف کرد در این راستا مدل نوسانگر هارمونیک میرا به کار برده‌ایم. با حل معادلات حرکت مکانیک کوانتومی روی سیستم (با در نظر گرفتن حمام حرارتی در حالت پایه) نیروی لورنتس وارد بر المان جسم را محاسبه کرده‌ایم. نتیجه به دست آمده از این روش دقیقا با نتیجه به دست آمده از دست‌آوردهای ماکروسکوپی متناظر است. این نتیجه به روشنی نشان می‌دهد که استفاده از تانسور تنش مینکوفسکی برای محاسبه نیروی کازیمیر در حالت کلی حتی اگر جسم غیر جاذب در نظر گرفته شود اشتباه است.

کلید واژه‌ها: نیروهای پاشنده، الکترودینامیک کوانتومی ماکروسکوپی، اثر کازیمیر، نیروی واندروالس

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

پیشگفتار:

نیروهای پاشندگی از برهمکنش الکترومغناطیسی بین اجسام خنثای الکتریکی که قطبش و مغناطش ذاتی ندارند به وجود می‌آیند. این نیروها به دلیل اثرهای مهمی که روی قسمت‌هایی از علم گذاشته‌اند توجه افراد زیادی را به خود جلب کرده‌اند.

پیشگویی نیروهای پاشندگی یکی از مهم‌ترین دست‌آوردهای الکترودینامیک کوانتومی است که می‌توان آنها را به عنوان نتیجه نوسانات حالت پایه کوانتومی در نظر گرفت. برای فهمیدن اینکه چگونه این نوسانات باعث به وجود آمدن نیروهای پاشندگی می‌شوند ابتدا موقعیت کلاسیکی متناظرش را در نظر می‌گیریم. براساس الکترودینامیک کلاسیکی اجسام خنثای الکتریکی (غیر قطبیده) با هیچ جسم دیگری برهمکنش نمی‌کنند حتی اگر اجسام قابل قطبش باشند. یک برهمکنش تنها در دو حالت اتفاق می‌افتد. ۱) حداقل یکی از اجسام قطبیده شده باشد. یا ۲) حداقل بر یکی از اجسام میدان الکترومغناطیسی اعمال شود. در مورد اول قطبش جسم باعث به وجود آمدن میدان الکترومغناطیسی می‌شود که این میدان باعث القای قطبش در اجسام قابل قطبش می‌شود. در مورد دوم میدان اعمالی باعث القای قطبش در جسم می‌شود و این قطبش باعث به وجود آمدن میدان الکترومغناطیسی وارد بر اجسام دیگر می‌شود. در هر دو مورد اجسام قطبیده شده به وسیله میدان الکترومغناطیسی با یکدیگر برهمکنش می‌کنند.

در الکترودینامیک کوانتومی حالتی که در آن حالت اجسام مادی در حالت پایه کوانتومی است و میدان الکترومغناطیسی در حالت خلا قرار دارند با حالت پایه کلاسیکی متناظر است. همچنین در این حالت میانگین کوانتومی میدان الکترومغناطیسی و قطبش همه‌ی اجسام صفر می‌شوند. اصل عدم قطعیت هایزنبرگ لزوما دلالت بر نوسانات حالت پایه کوانتومی می‌کند که این نوسانات شامل نوسانات قطبش‌پذیری اتم و نوسانات میدان الکترومغناطیسی می‌شوند. این نوسانات منجر به برهمکنش بین اجسام می‌شوند که این یک اثر کوانتومی خالص است و باعث به وجود آمدن نیروهای پاشندگی روی اجسام می‌شوند. در دمای محدود، نوسانات حرارتی نیز در نظر گرفته می‌شوند.

نیروهای پاشندگی در سطح ماکروسکوپی همان نیروی کازیمیر است و در سطح میکروسکوپی همان نیروی واندوالس است[۱]. این نیروها حتی اگر اجسام از نظر الکتریکی خنثی باشند و دارای قطبش و مغناطش نباشند وجود دارند. نیروهای پاشندگی دست‌آوردهای مهمی دارند. در سطح میکروسکوپی می‌توان به پیوندهای مرزی ضعیف مولکول‌ها اشاره کرد و از مشخصه‌های مهم ماکروسکوپی می‌توان به معادله صحیح حالت یک گاز ایده‌آل که منجر به معادله عمومی واندروالس می‌شود اشاره کرد. نیروهای پاشندگی روی خاصیت ماکروسکوپی مایعات و جامدات[۲]، به عنوان مثال خاصیت غیر عادی آب، خواص مغناطیسی، حرارتی و اپتیکی اکسیژن جامد[۳] یا رفتار ذوب کریستال‌هایی که پیوند ضعیف دارند اثر دارد[۴]. نیروهای پاشندگی در فیزیک نجومی و زیست شناسی نقش دارند بنابراین می‌توان گفت نیروهای پاشنده، باعث آرایش و شکل‌گیری سیاره‌ها حول یک ستاره شده است[۵]. علاوه بر آن نیروهای پاشنده برای فهمیدن برهمکنش بین مولکول‌ها با غشای سلولی لازم است[۶].

با توجه به بیانات گفته شده، نیروهای پاشندگی از نوسانات نقطه صفر کوانتومی ناشی می‌شوند که این نوسانات از برهمکنش اجسام و نوسانات خلا میدان الکترومغناطیسی ناشی می‌شوند. اگر فاصله اجسام از طول موج مربوط به نوسانات میدان، کوچکتر باشد برای سادگی می‌توان از این نوسانات چشم‌پوشی کرد. در نواحی غیر تاخیری، نیروهای پاشندگی با برهمکنش کولمب معادل هم هستند. برهمکنش کولمب بین دو اتم را می‌توان به عنوان برهمکنش دو قطبی الکتریکی $\hat{d}$ و $\hat{d}'$ در نظر گرفت.

$$\hat{V}=\frac{\hat{\mathbf{d}}.\hat{\mathbf{d}}'-3\hat{d}_z\hat{d}'_z}{4\pi\varepsilon_0 z^3} \tag{۱}$$

این دست‌آورد اولین بار توسط لندن در نظریه اختلال مرتبه اول برای محاسبه انرژی پتانسیل دو اتم همسانگرد در حالت پایه مورد استفاده قرار گرفت.

$$U(z)=-\frac{c}{z^6} \qquad c=\frac{1}{24\pi^2\varepsilon_0^2}\sum_{kk'}\frac{\left|\left\langle 0\middle|\hat{\mathbf{d}}\middle|k\right\rangle\right|^2\left|\left\langle 0'\middle|\hat{\mathbf{d}}'\middle|k'\right\rangle\right|^2}{E_k+E_{k'}-(E_0+E_{0'})} \tag{۲}$$

که $\left|k'\right\rangle$ و $E_{k'}$ ویژه حالت و ویژه انرژی غیراختلالی اتم‌ها را مشخص می‌کنند از پتانسیل لندن می‌توان فهمید که نیروی جاذبه با $1/z^7$ متناسب است. روش به دست آوردن نیروهای پاشندگی از برهمکنش دوقطبی–دوقطبی به وسیله تئوری اختلال برای محاسبه پتانسیل‌های برهمکنش سه، چهار و N اتمی مورد استفاده قرار گرفت. لنارد–جونز نشان داد که برهمکنش یک اتم با یک ورقه هادی کامل را می‌توان با استفاده از روش بار های تصویری به دست آورد و با در نظر گرفتن برهمکنش دوقطبی–دوقطبی اتم با تصویرش در صفحه به وسیله نظریه اختلال مرتبه اول به پتانسیل زیر دست یافت.

$$U(z)=-\frac{\left\langle 0\middle|\hat{d}^2\middle|0\right\rangle}{48\pi\varepsilon_0 z^3} \tag{۳}$$

نوسانات دوقطبی‌های مغناطیسی، چهارقطبی‌های الکتریکی و چندقطبی‌های بالاتر بعلاوه دوقطبی‌های مغناطیسی و الکتریکی دائمی روی برهمکنش اتم–اتم مورد بحث قرار گرفت. در این روش نشان دادند که نیروی بین یک اتم قطبش‌پذیر و یک اتم مغناطش‌پذیر رانشی است و با $1/z^5$ متناسب است در مقابل نیروی بین دو اتم قطبش‌پذیر جاذب است و با $1/z^7$ متناسب است. برای مقادیر به اندازه کافی بزرگ z، پتانسیل یک اتم و یک نیم‌صفحه از رابطه زیر به دست می‌آید.

$$U(z)=-\frac{\hbar}{16\pi^2\varepsilon_0 z^3}\int_0^\infty d\xi\,\alpha(i\xi)\frac{\varepsilon(i\xi)-1}{\varepsilon(i\xi)+1}+O(1/z^4) \tag{۴}$$

$\alpha(\omega)$ قطبش‌پذیری دوقطبی اتم، $\varepsilon(\omega)$ گذردهی الکتریکی نیم‌صفحه است. که در آن مهمترین جمله‌اش نیروی جاذبه‌ای به ما می‌دهد که با $1/z^4$ متناسب است و در حد تروایی مغناطیسی نامحدود با نتیجه هادی کامل (معادله۳) منطبق است.

برهمکنش دو جسم ماکروسکوپی B و B' اولین‌بار با جمع پتانسیل‌های لندن میکروسکوپی (معادله ۲) بین اتم‌های تشکیل‌دهنده دو جسم مورد بررسی قرار گرفت.

$$U(z)=-\sum_{r\in B}\sum_{r'\in B'}\frac{C}{\left|r-r'\right|^6} \tag{۵}$$

با مدل سازی کردن اتم‌های جسم با نوسانگر هارمونیک نشان داده شد که انرژی برهمکنش اجسام، جمع همه‌ی پتانسیل‌های برهمکنش‌های تعداد زیادی اتم است. به زودی نشان داده شد که محاسبات میکروسکوپی برهمکنش پاشندگی بین اجسام خیلی سخت است. در یک دست‌آورد دیگر براساس الکتروستاتیک ماکروسکوپی، انرژی برهمکنش از پتانسیل کولمب الکتروستاتیکی به دست آمد. این روش برای محاسبه‌ی نیروی کازیمیر بین دو دایره الکتریکی، کاواک‌های کروی الکتریکی، نیم‌صفحه‌های الکتریکی ناهموار و نیم‌صفحه‌های الکترولیت که به وسیله دی‌الکتریک از هم جدا شده است مورد استفاده قرار گرفت.

روش‌های الکترواستاتیکی که تنها می‌توانند نتایج تقریبی در نواحی غیر تاخیری ارائه دهند که در این نواحی فاصله اجسام به اندازه کافی کوچک است بنابراین می‌توان از میدان الکترومغناطیسی عرضی چشم‌پوشی کرد. این بیان اولین‌بار توسط کازیمیر و پولدر اثبات شد. آنها با استفاده از بسط میدان الکترومغناطیسی کوانتش شده در یک کاواک مسطح (محاط شده با ورقه‌های هادی کامل) نشان دادند که نیروی بین ورقه‌ها از مجموع انرژی نقطه صفر ناشی شده است.

$$E=\sum_k \frac{1}{2}\hbar\omega_k \tag{۶}$$

از نتایج مربوط به ورقه‌هایی با فاصله جدایی محدود، نیروی وارد بر واحد سطح به شکل زیر نتیجه می‌شود.

$$\overline{F}=\frac{\pi^2\hbar c}{240}\frac{1}{z^4} \tag{۷}$$

کازیمیر و پولدر نتایج حدهای غیر تاخیری (معادلات ۲ و ۳) را بهبود دادند و فهمیدند که در حدهای تاخیری، پتانسیل‌های اتم–اتم و اتم–صفحه به ترتیب با معادلات زیر داده می‌شوند.

$$U(z)=-\frac{23\hbar c\alpha(0)\alpha'(0)}{64\pi^3\varepsilon_0^2 z^7} \tag{۸}$$

$$U(z)=-\frac{3\hbar c\alpha(0)}{32\pi^2\varepsilon_0 z^4} \tag{۹}$$

که با نیروهای جاذب $1/z^8$ و $1/z^5$ متناظر است که سرعتشان از حد غیرتاخیری کمتر است.

در این پایان‌نامه براساس الکترودینامیک کوانتومی ماکروسکوپی به یک رویکرد واحد در به دست آوردن نیروهای پاشندگی رسیده‌ایم که نه تنها ترکیبی از مزیت الکترودینامیک کوانتومی معمولی و نظریه پاسخ‌دهنده دارد بلکه تاکید بر خاستگاه مشترک و روابط بین انواع مختلف نیروها دارد. این رویکرد می‌تواند برای مطالعه‌ی نیروهای پاشندگی یک گروه گسترده از حالات مختلف مورد استفاده قرار گیرد.

در فصل اول این پایان‌نامه مدل‌های مهم کوانتش میدان الکترومغناطیسی در محیط خطی، پاشنده و جاذب و برهمکنش میدان (مربوط به محیطی که شامل میدان و ماده است.) با اتمها با تاکید ویژه روی محیط مغناطو–الکتریک توصیف شده است. این محیط برحسب تغییرات مکانی گذردهی الکتریکی و تراوایی مغناطیسی که تابع موهومی از فرکانس است بیان می‌شود. بر این اساس در فصل دوم فرمول‌های عمومی نیرو وارد بر یک جسم ماکروسکوپی (که از برهمکنش جسم ماکروسکوپی با اجسام ماکروسکوپی دیگر ناشی می‌شود.) بیان شده است. این فرمول‌ها برای هر جسم ماکروسکوپی با شکل دلخواه معتبر است. همچنین همه‌ی خواص جسم‌ها برحسب جمله‌هایی از تانسور گرین مربوط به معادلات ماکسول ماکروسکوپی بیان شده است. تنش کازیمیر و نیروی کازیمیر معرفی شده‌اند و یک رابطه‌ی عمومی مربوط به نیروی واندروالس تعداد زیادی اتم ثابت شده است. به خصوص در این فصل نشان داده شده است که نیروی وارد بر یک اتم تنها در حالت پایه و نیروی بین دو اتم حالت پایه می‌تواند از فرمول کلی نیرو به دست آید. این نیروها از طریق بررسی برهمکنش اتمها با میدان الکترومغناطیسی محیط شامل میدان و ماده، با استفاده از نظریه اختلال نیز به دست آمده است. در فصل سوم از طریق اندازه‌گیری فشار تابشی خلا میدان الکترومغناطیسی نیروی کازیمیر بین دو ورقه دی‌الکتریک محاسبه کرده‌ایم.

فصل اول

الکترودینامیک کوانتومی در محیط پاسخ‌دهنده خطی

روشن است که خواص میدان الکترومغناطیسی در محیط مادی می‌تواند تفاوت قابل توجهی با خواص مشاهده شده در محیط خلا داشته باشد. از این رو برهمکنش میدان با اتم‌ها می‌تواند به شدت تحت تاثیر حضور محیط مادی قرار گیرد. در الکترودینامیک کلاسیکی محیط خطی بر حسب پذیرفتاری الکتریکی و مغناطیسی ماکروسکوپی (یا به ترتیب برحسب گذردهی الکتریکی و تراوایی مغناطیسی) که قابل دسترس توسط داده‌های سنجش‌پذیر است توصیف می‌شود. این مفهوم می‌تواند به الکترودینامیک کوانتومی نیز انتقال پیدا کند.

۱-۱ میدان الکترومغناطیسی در محیطی شامل میدان و ماده

میدان الکترومغناطیسی محیطی که شامل میدان و ماده است در غیاب جریان‌ها و بارهای آزاد از معادلات ماکسول در حوزه فرکانس پیروی می‌کند.

$$\nabla.\underline{\hat{B}}(r,\omega)=0 \tag{۱-۱}$$

$$\nabla\times\underline{\hat{E}}(r,\omega)-i\omega\underline{\hat{B}}(r,\omega)=0 \tag{۲-۱}$$

$$\varepsilon_0\nabla.\underline{\hat{E}}(r,\omega)=\underline{\hat{\rho}}_{in}(r,\omega) \tag{۳-۱}$$

$$\kappa_0\nabla\times\underline{\hat{B}}(r,\omega)+i\omega\varepsilon_0\underline{\hat{E}}(r,\omega)=\underline{\hat{j}}_{in}(r,\omega) \tag{۴-۱}$$

$$\kappa_0=\mu_0^{-1}$$

که در آن چگالی‌های جریان و بار داخلی محیط مغناطو-دی‌الکتریک چشمه‌هایی برای میدان الکتریکی $\underline{\hat{E}}(r,\omega)$ و میدان مغناطیسی $\underline{\hat{B}}(r,\omega)$ هستند. توجه کنید که عملگر $\hat{O}(r)$ در حوزه‌ی فرکانس به صورت زیر توصیف می‌شود.

$$\hat{O}(r)=\int_0^\infty d\omega\,\underline{\hat{O}}(r,\omega)+H.c. \tag{۱-۵}$$

بنابراین رابطه $\underline{\hat{O}}(r,\omega,t)=e^{-i\omega(t-t')}\underline{\hat{O}}(r,\omega,t')$ در تصویر هایزنبرگ برقرار است. چگالی‌های بار و جریان داخلی از طریق معادله پیوستگی، به صورت زیر با هم ارتباط برقرار می‌کنند.

$$-i\omega\underline{\hat{\rho}}_{in}(r,\omega)+\nabla.\underline{\hat{j}}_{in}(r,\omega)=0 \tag{۱-۶}$$

چگالی‌های بار و جریان داخلی به ترتیب بر حسب میدان‌های قطبش $\underline{\hat{P}}(r,\omega)$ و مغناطش $\underline{\hat{M}}(r,\omega)$ به صورت زیر تعریف می‌شوند.

$$\underline{\hat{\rho}}_{in}(r,\omega)=-\nabla.\underline{\hat{P}}(r,\omega) \tag{۱-۷}$$

$$\underline{\hat{j}}_{in}(r,\omega)=-i\omega\underline{\hat{P}}(r,\omega)+\nabla\times\underline{\hat{M}}(r,\omega) \tag{۱-۸}$$

میدان جابجایی و میدان مغناطیسی به صورت زیر بیان می‌شوند.

$$\underline{\hat{D}}(r,\omega)=\varepsilon_0\underline{\hat{E}}(r,\omega)+\underline{\hat{P}}(r,\omega) \tag{۱-۹}$$

$$\underline{\hat{H}}(r,\omega)=\kappa_0\underline{\hat{B}}(r,\omega)-\underline{\hat{M}}(r,\omega) \tag{۱-۱۰}$$

معادلات ماکسول غیر همگن (۱-۳) و (۱-۴) را می‌توان با معادلات زیر هم‌ارز قرار داد.

$$\nabla.\underline{\hat{D}}(r,\omega)=0 \tag{۱-۱۱}$$

$$\nabla\times\underline{\hat{H}}(r,\omega)+i\omega\underline{\hat{D}}(r,\omega)=0 \tag{۱-۱۲}$$

در حضور ماده‌ی مغناطو-دی‌الکتریک خطی و موضعا پاسخ‌دهنده معادلات (۱-۹) و (۱-۱۰) به شکل زیر بیان می‌شوند.

$$\underline{\hat{P}}(r,\omega)=\varepsilon_0[\varepsilon(r,\omega)-1]\underline{\hat{E}}(r,\omega)+\underline{\hat{P}}_N(r,\omega) \tag{۱-۱۳}$$

$$\underline{\hat{M}}(r,\omega)=\kappa_0[1-\kappa(r,\omega)]\underline{\hat{B}}(r,\omega)+\underline{\hat{M}}_N(r,\omega) \tag{۱-۱۴}$$

که در آن ($\kappa(r,\omega)=\mu^{-1}(r,\omega)$) و $\varepsilon(r,\omega)$ و $\mu(r,\omega)$ به ترتیب گذردهی الکتریکی و تراوایی مغناطیسی هستند که توابع مقداری موهومی از فرکانس هستند و در حالت کلی با مکان تغییر می‌کنند. همچنین در روابط کرامرز-کرونیگ[1] صدق می‌کنند. $\underline{\hat{P}}_N(r,\omega)$ و $\underline{\hat{M}}_N(r,\omega)$ به ترتیب چگالی‌های قطبش و مغناطش نوفه هستند. برای سادگی در معادلات (۱-۱۳) و (۱-۱۴) مواد همسانگرد فرض شده است.

با جایگذاری معادلات (۱-۹)، (۱-۱۰)، (۱-۱۳) و (۱-۱۴) در معادله (۱-۱۲) و با استفاده از معادله (۱-۲) می‌توان دید که میدان الکتریکی از معادله هلمهولتز غیر همگن زیر پیروی می‌کند.

$$\left[\nabla\times\kappa(r,\omega)\nabla\times-\frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon(r,\omega)\right]\underline{\hat{E}}(r,\omega)=i\omega\mu_0\underline{\hat{j}}_N(r,\omega) \tag{۱-۱۵}$$

---

[1] Kramers-Kronig

که در آن چگالی جریان نوفه با معادله زیر توصیف می‌شود.

$$\underline{\hat{j}}_N(r,\omega) = -i\omega\underline{\hat{P}}_N(r,\omega) + \nabla\times\underline{\hat{M}}_N(r,\omega) \quad (۱-۱۶)$$

توجه کنید که چگالی بار نوفه با رابطه زیر داده می‌شود.

$$\underline{\hat{\rho}}_N(r,\omega) = -\nabla.\underline{\hat{P}}_N(r,\omega) \quad (۱-۱۷)$$

همچنین چگالی بار و جریان نوفه از طریق معادله پیوستگی به صورت زیر به هم مربوط می‌شوند.

$$-i\omega\underline{\hat{\rho}}_N(r,\omega) + \nabla.\underline{\hat{j}}_N(r,\omega) = 0 \quad (۱-۱۸)$$

با حل معادله (۱-۱۵) میدان الکتریکی $\underline{\hat{E}}(r,\omega)$ به صورت زیر به دست می‌آید.

$$\underline{\hat{E}}(r,\omega) = i\omega\mu_0\int d^3r' G(r,r',\omega).\underline{\hat{j}}_N(r',\omega) \quad (۱-۱۹)$$

که براساس معادله (۱-۲) می‌توان $\underline{\hat{B}}(r,\omega)$ را به صورت زیر بیان کرد.

$$\underline{\hat{B}}(r,\omega) = \mu_0\int d^3r'\,\nabla\times G(r,r',\omega).\underline{\hat{j}}_N(r',\omega) \quad (۱-۲۰)$$

که در آن $G(r,r',\omega)$، تانسور گرین کلاسیکی است که با معادله

$$\left[\nabla\times\kappa(r,\omega)\nabla\times - \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon(r,\omega)\right]G(r,r',\omega) = \delta(r-r')1 \quad (۱-۲۱)$$

همراه با شرایط مرزی زیر بیان می‌شود.

$$G(r,r',\omega)\to 0 \quad for \quad |r-r'|\to\infty \quad (۱-۲۲)$$

توجه کنید که تانسور گرین به طور منحصر به فرد با معادله (۱-۲۱) همراه با (۱-۲۲) تعیین می‌شود مشروط براینکه نامساوی‌های $\operatorname{Im}\varepsilon(r,\omega) > 0$ و $\operatorname{Im}\mu(r,\omega) > 0$ برقرار باشند. همچنین تانسور گرین یک تابع تحلیلی از ω در نیم‌صفحه مختلط بالایی است و دارای خواص زیر است[۷].

$$G^*(r,r',\omega) = G(r,r',-\omega^*) \quad (۱-۲۳)$$

$$G(r,r',\omega) = G^T(r,r',\omega) \quad (۱-۲۴)$$

$$\int d^3s\{-\operatorname{Im}\kappa(s,\omega)[\nabla_s\times G(s,r,\omega)]^T.[\nabla_s\times G^*(s,r',\omega)] + \frac{\omega^2}{c^2}\operatorname{Im}\varepsilon(s,\omega)G(r,s,\omega).G^*(s,r',\omega)\} = \operatorname{Im}G(r,r',\omega) \quad (۱-۲۵)$$

چگالی‌های قطبش و مغناطش نوفه را می‌توان بر حسب متغیرهای دینامیکی $\hat{f}_\lambda(r,\omega)$ و $\hat{f}_\lambda^\dagger(r,\omega)$ مربوط به سیستمی که شامل میدان الکترومغناطیسی و ماده مغناطو-الکتریک است به صورت زیر نوشت.

$$\underline{\hat{P}}_N(r,\omega) = i\sqrt{\frac{\hbar\varepsilon_0}{\pi}\operatorname{Im}\varepsilon(r,\omega)}\,\hat{f}_e(r,\omega) \quad (۱-۲۶)$$

$$\underline{\hat{M}}_N(r,\omega) = \sqrt{-\frac{\hbar\kappa_0}{\pi}\operatorname{Im}\kappa(r,\omega)}\,\hat{f}_m(r,\omega)$$
$$= \sqrt{\frac{\hbar}{\pi\mu_0}\frac{\operatorname{Im}\mu(r,\omega)}{|\mu(r,\omega)|^2}}\,\hat{f}_m(r,\omega) \tag{۱-۲۷}$$

روابط جابجایی زیر بین عملگرهای بوزنی برقرار است.

$$\left[\hat{f}_{\lambda i}(r,\omega), \hat{f}^{\dagger}_{\lambda' i'}(r',\omega')\right] = \delta_{\lambda\lambda'}\delta_{ii'}\delta(r-r')\delta(\omega-\omega') \tag{۱-۲۸}$$

$$\left[\hat{f}_{\lambda i}(r,\omega), \hat{f}_{\lambda' i'}(r',\omega')\right] = 0 \tag{۱-۲۹}$$

با جایگذاری معادلات (۱-۲۶) و (۱-۲۷) در معادله (۱-۱۹) و با استفاده از معادله (۱-۱۶) می‌توان میدان الکتریکی را بر حسب متغییرهای دینامیکی $\hat{f}_\lambda(r,\omega)$ و $\hat{f}^{\dagger}_\lambda(r,\omega)$ به صورت زیر نوشت.

$$\underline{\hat{E}}(r,\omega) = \sum_{\lambda=e,m}\int d^3r' G_\lambda(r,r',\omega).\hat{f}_\lambda(r',\omega) \tag{۱-۳۰}$$

که در آن $G_e(r,r',\omega)$ و $G_m(r,r',\omega)$ به صورت زیر بیان می‌شود.

$$G_e(r,r',\omega) = i\frac{\omega^2}{c^2}\sqrt{\frac{\hbar}{\pi\varepsilon_0}\operatorname{Im}\varepsilon(r',\omega)}\,G(r,r',\omega) \tag{۱-۳۱}$$

$$G_m(r,r',\omega) = i\frac{\omega}{c}\sqrt{-\frac{\hbar}{\pi\varepsilon_0}\operatorname{Im}\kappa(r',\omega)}\left[\nabla'\times G(r',r,\omega)\right]^T \tag{۱-۳۲}$$

بنابراین براساس معادله (۱-۵) می‌توان میدان الکتریکی را به صورت زیر تعریف کرد.

$$\hat{E}(r) = \int_0^\infty d\omega\,\underline{\hat{E}}(r,\omega) + H.c.$$
$$= \sum_{\lambda=e,m}\int d^3r'\int_0^\infty d\omega\, G_\lambda(r,r',\omega).\hat{f}_\lambda(r',\omega) + H.c. \tag{۱-۳۳}$$

توجه کنید که رابطه (۱-۲۵) را می‌توان به صورت فشرده به شکل زیر نوشت.

$$\sum_{\lambda=e,m}\int d^3s\, G_\lambda(r,s,\omega).G^{*T}_\lambda(r',s,\omega) = \frac{\hbar\mu_0}{\pi}\omega^2\operatorname{Im}G(r,r',\omega) \tag{۱-۳۴}$$

با شروع از معادله (۱-۳۰) و با استفاده از معادلات (۱-۲) و (۱-۱۲) همراه با معادلات (۱-۹)، (۱-۱۰)، (۱-۱۳)، (۱-۱۴)، (۱-۲۶) و (۱-۲۷)، میدان‌های الکترومغناطیسی کوانتش شده مثل $\hat{B}(r)$، $\hat{D}(r)$ و $\hat{H}(r)$ را می‌توان بر حسب متغیرهای دینامیکی $\hat{f}_\lambda(r,\omega)$ و $\hat{f}^{\dagger}_\lambda(r,\omega)$ بیان کرد. در این راستا $\underline{\hat{B}}(r,\omega)$ به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\underline{\hat{B}}(r,\omega) = \frac{1}{i\omega}\sum_{\lambda=e,m} d^3r'\,\nabla\times G_\lambda(r,r',\omega).\hat{f}_\lambda(r',\omega) \tag{۱-۳۵}$$

بنابراین رابطه زیرا داریم.

$$\hat{B}(r)=\int_0^\infty d\omega \underline{\hat{B}}(r,\omega)+H.c.$$
$$=\sum_{\lambda=e,m}\int d^3r'\int_0^\infty \frac{d\omega}{i\omega}\nabla\times G_\lambda(r,r',\omega).\hat{f}_\lambda(r',\omega)+H.c. \quad (۳۶-۱)$$

برای بررسی برهمکنش میدان الکترومغناطیسی با اتم‌ها در محیطی که شامل میدان و ماده است. بیان میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی برحسب پتانسیل‌ها می‌تواند مفید باشد.

$$\hat{E}(r)=-\nabla\hat{\varphi}(r)-\dot{\hat{A}}(r) \quad (۳۷-۱)$$

$$\hat{B}(r)=\nabla\times\hat{A}(r) \quad (۳۸-۱)$$

در پیمانه کولمب ($\nabla.\hat{A}(r)=0$) جمله‌های اول و دوم سمت راست معادله (۱-۳۷) به ترتیب قسمت‌های طولی و عرضی میدان الکتریکی هستند. با استفاده از معادله (۱-۳۳) می‌توان $\nabla\hat{\varphi}(r)$ و $\hat{A}(r)$ را بر حسب متغیرهای دینامیکی $\hat{f}_\lambda(r,\omega)$ و $\hat{f}_\lambda^\dagger(r,\omega)$ به شکل زیر نوشت.

$$\nabla\hat{\varphi}(r)=-\hat{E}^{\parallel}(r)$$
$$=-\sum_{\lambda=e,m}\int d^3r'\int_0^\infty d\omega^{\parallel}G_\lambda(r,r',\omega).\hat{f}_\lambda(r',\omega)+H.c. \quad (۳۹-۱)$$

$$\hat{A}(r)=\sum_{\lambda=e,m}\int d^3r'\int_0^\infty \frac{d\omega^{\perp}}{i\omega}G_\lambda(r,r',\omega).\hat{f}_\lambda(r',\omega)+H.c. \quad (۴۰-۱)$$

توجه کنید که قسمت طولی (عرضی) بردار میدان با معادله زیر بیان می‌شود.

$$F^{\parallel(\perp)}(r)=\int d^3r'\delta^{\parallel(\perp)}(r-r').F(r') \quad (۴۱-۱)$$

که در آن

$$\delta^{\parallel}(r)=-\nabla\nabla(\frac{1}{4\pi r}),\ \ \delta^{\perp}(r)=\delta(r)1-\delta^{\parallel}(r) \quad (۴۲-۱)$$

روابط جابجایی میدان‌های الکترومغناطیسی از روابط جابجایی متغیرهای دینامیکی $\hat{f}_\lambda(r,\omega)$ و $\hat{f}_\lambda^\dagger(r,\omega)$ داده شده با معادلات (۱-۲۸) و (۱-۲۹) نتیجه می‌شود. می‌توان نشان داد که میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی از روابط جابجایی زیر پیروی می‌کنند [۷، ۸].

$$\left[\hat{E}_i(r),\hat{B}_{i'}(r')\right]=-i\hbar\varepsilon_0^{-1}\in_{ii'k}\partial_k\delta(r-r') \quad (۴۳-۱)$$

$$\left[\hat{E}_i(r),\hat{E}_{i'}(r')\right]=0=\left[\hat{B}_i(r),\hat{B}_{i'}(r')\right] \quad (۴۴-۱)$$

میدان تکانه کانونیک با پتانسیل برداری (قسمت عرضی میدان) به وسیله معادله زیر به هم مربوط می‌شوند.

$$\hat{\Pi}(r)=-\varepsilon_0\hat{E}^{\perp}(r) \quad (۴۵-۱)$$

همچنین می‌توان ثابت کرد که روابط جابجایی زیر برقرار هستند.

$$\left[\hat{A}_i(r),\hat{\Pi}_{i'}(r')\right]=i\hbar\delta_{ii'}^{\perp}(r-r') \quad (۱-۴۶)$$

$$\left[\hat{A}_i(r),\hat{A}_{i'}(r')\right]=0=\left[\hat{\Pi}_i(r),\hat{\Pi}_{i'}(r')\right] \quad (۱-۴۷)$$

هامیلتونی یک سیستم مرکب به شکل زیر توصیف می‌شود.

$$\hat{H}_{mf}=\sum_{\lambda=e,m}\int d^3r\int_0^{\infty}d\omega\hbar\omega\hat{f}_{\lambda}^{\dagger}(r,\omega).\hat{f}_{\lambda}(r,\omega) \quad (۱-۴۸)$$

با استفاده از معادله حرکت در تصویر هایزنبرگ رابطه زیر را داریم.

$$\dot{\hat{O}}=\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_{mf},\hat{O}\right] \quad (۱-۴۹)$$

که از این رابطه معادلات ماکسول صحیح در حوزه فرکانس بدست می‌آید.

$$\nabla\times\hat{E}(r)+\dot{\hat{B}}(r)=0 \quad (۱-۵۰)$$

$$\nabla\times\hat{H}(r)-\dot{\hat{D}}(r)=0 \quad (۱-۵۱)$$

توجه کنید که در این ساختار، نیز معادلات ماکسول $\nabla.\hat{B}(r)=0$ و $\nabla.\hat{D}(r)=0$ برقرار هستند.

فضای هیلبرت[1] به وسیله حالت‌های فوک[2] پوشش داده می‌شود که حالت‌های فوک از طریق تکرار عملگرهای خلق $\hat{f}_{\lambda}^{\dagger}(r,\omega)$ روی حالت پایه $\left|\{0\}\right\rangle$ به دست می‌آید و با معادله زیر بیان می‌شود.

$$\hat{f}_{\lambda}(r,\omega)\left|\{0\}\right\rangle=0 \quad \forall\,\lambda,r,\omega \quad (۱-۵۲)$$

توجه کنید که حالت پایه به سیستم مرکب از میدان الکترومغناطیسی و ماده اشاره دارد. با استفاده از معادله (۱-۳۰) همراه با روابط جابجایی (۱-۲۸)، (۱-۲۹) و (۱-۳۴) می‌توان رابطه زیر را به دست آورد.

$$\left\langle\{0\}\right|\underline{\hat{E}}_i(r,\omega)\underline{\hat{E}}_{i'}^{\dagger}(r',\omega')\left|\{0\}\right\rangle=\pi^{-1}\hbar\mu_0\omega^2\,\mathrm{Im}\,G_{ii'}(r,r',\omega)\delta(\omega-\omega') \quad (۱-۵۳)$$

این رابطه نشان می‌دهد که نوسانات حالت پایه میدان الکتریکی به وسیله قسمت موهومی تانسور گرین مشخص می‌شود. که در توافق کامل با قضیه افت و خیز است.

به این نکته باید توجه شود که فرض شده است نامساوی‌های $\mathrm{Im}\,\varepsilon(r,\omega)>0$ و $\mathrm{Im}\,\mu(r,\omega)>0$ در هر جایی برقرار است. حتی در نواحی تقریبا خلا یا در نواحی که جذب آنقدر پایین است که در عمل می‌توان از آن چشم پوشی کرد. قسمت‌های موهومی گذردهی الکتریکی و تراوایی مغناطیسی در انتگرال‌ده‌های معادلاتی از نوع معادله (۱-۳۳) نباید صفر شود. برای نواحی خلا حدهای $\mathrm{Im}\,\varepsilon(r,\omega)\to 0$ و $\mathrm{Im}\,\mu(r,\omega)\to 0$ بعد از گرفتن انتگرال‌های فضایی انجام می‌شود.

---
[1] Hilbert
[2] Fock

به طور خلاصه، کوانتش میدان الکترومغناطیسی در حضور اجسام مغناطو-الکتریک جاذب وپاشنده می‌تواند با شروع از معادلات ماکسول ماکروسکوپی شامل جملات نوفه که به جذب مربوط می‌شود انجام شود. در این روش میدان الکترومغناطیسی برحسب جمله‌هایی از نوفه که به متغیرهای دینامیکی بوزنی مربوط می‌شود بیان می‌شود [۹، ۱۰].

مدل کوانتش در توافق کامل با نتایج مدل‌های میکروسکوپی ماده دی‌الکتریک است که درآن مدل قطبش با میدان-های نوسانگر هارمونیک مدل‌سازی شده است و میرایی توسط یک حمام از نوسانگرهای هارمونیک اضافی توصیف می‌شود [۱۱]. بعد از قطری‌سازی نانو[1] هامیلتونی سیستمی که شامل میدان الکترومغناطیسی، قطبش وحمام است به شکل معادله (۱-۴۸) به دست آمده است.

۱-۲ برهم کنش میدان-اتم

یک سیستم از ذرات غیر نسبیتی با جرم‌های m_α و بارهای q_α به شکل یک سیستم اتمی (برای مثال یک اتم یا یک مولکول) که با میدان الکترومغناطیسی محیط شامل میدان و ماده برهمکنش می‌کند در نظر می‌گیریم. هامیلتونی سیستم اتمی در غیاب میدان الکترومغناطیسی محیط شامل میدان و ماده با معادله زیر بیان می‌شود.

$$\hat{H}_{at} = \sum_\alpha \frac{\hat{P}_\alpha^{\,2}}{2m_\alpha} + \frac{1}{2}\int d^3r\,\hat{\rho}_{at}(r)\hat{\varphi}_{at}(r) \qquad (۱-۵۴)$$

که در آن $\hat{\rho}_{at}(r)$ و $\hat{\varphi}_{at}(r)$ به ترتیب چگالی بار و پتانسیل اسکالر مربوط به اتم هستند که با معادلات زیر توصیف می‌شوند.

$$\hat{\rho}_{at}(r) = \sum_\alpha q_\alpha \delta(r-\hat{r}_\alpha) \qquad (۱-۵۵)$$

$$\hat{\varphi}_{at}(r) = \int d^3r'\,\frac{\hat{\rho}_{at}(r')}{4\pi\varepsilon_0 |r-r'|} = \sum_\alpha \frac{q_\alpha}{4\pi\varepsilon_0 |r-\hat{r}_\alpha|} \qquad (۱-۵۶)$$

و روابط جابجایی استاندارد زیر برقرار است.

$$\left[\hat{r}_{\alpha i}, \hat{P}_{\alpha' i'}\right] = i\hbar\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{ii'} \qquad (۱-۵۷)$$

$$[\hat{r}_{\alpha i}, \hat{r}_{\alpha' i'}] = 0 = [\hat{P}_{\alpha i}, \hat{P}_{\alpha' i'}] \qquad (۱-۵۸)$$

و به روشنی $\hat{\varphi}_{at}(r)$ و $\hat{\rho}_{at}(r)$ از معادله پواسون زیر پیروی می‌کنند.

$$\varepsilon_0 \Delta\hat{\varphi}_{at}(r) = -\hat{\rho}_{at}(r) \qquad (۱-۵۹)$$

و همچنین معادله پیوستگی زیر برقرار است.

$$\dot{\hat{\rho}}_{at}(r) + \nabla.\hat{j}_{at}(r) = 0 \qquad (۱-۶۰)$$

که در آن چگالی جریان اتمی به شکل زیر نوشته می‌شود.

$$\hat{j}_{at}(r) = \frac{1}{2}\sum_\alpha q_\alpha[\dot{\hat{r}}_\alpha \delta(r-\hat{r}_\alpha) + \delta(r-\hat{r}_\alpha)\dot{\hat{r}}_\alpha] \qquad (۱-۶۱)$$

[1] Fanodiagonalization

در اینجا استفاده از دستگاههای مختصه نسبی و مرکز جرم به صورت زیر می‌تواند مفید باشد.

$$\hat{r}_A = \sum_\alpha \frac{m_\alpha}{m_A}\hat{r}_\alpha, \qquad \hat{\bar{r}}_\alpha = \hat{r}_\alpha - \hat{r}_A \tag{۶۲-۱}$$

($m_A = \sum_\alpha m_\alpha$) که در آن تکانه مربوطه به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\hat{P}_A = \sum_\alpha \hat{P}_\alpha \qquad \hat{\bar{P}}_\alpha = \hat{P}_\alpha - \frac{m_\alpha}{m_A}\hat{P}_A \tag{۶۳-۱}$$

با ترکیب معادلات (۱-۵۴) و (۱-۶۳)، هامیلتونی اتم به شکل زیر نوشته می‌شود.

$$\begin{aligned}\hat{H}_{at} &= \frac{\hat{P}_A^2}{2m_A} + \sum_\alpha \frac{\hat{\bar{P}}_\alpha^2}{2m_\alpha} + \frac{1}{2}\int d^3r\,\hat{\rho}_{at}(r)\hat{\varphi}_{at}(r) \\ &= \frac{\hat{P}_A^2}{2m_A} + \sum_n E_n |n\rangle\langle n|\end{aligned} \tag{۶۴-۱}$$

که در آن E_n و $|n\rangle$ به ترتیب ویژه انرژی و ویژه حالت هامیلتونی هستند. از روابط جابجایی (۱-۵۷) و (۱-۵۸) می‌توان روابط جابجایی غیر صفر متغیرهای جدید را به صورت زیر به دست آورد.

$$\left[\hat{r}_{Ai}, \hat{P}_{Ai'}\right] = i\hbar\delta_{ii'} \tag{۶۵-۱}$$

$$\left[\hat{\bar{r}}_{\alpha i}, \hat{\bar{P}}_{\alpha' i'}\right] = i\hbar\delta_{ii'}(\delta_{\alpha\alpha'} - \frac{m_{\alpha'}}{m_A}) \tag{۶۶-۱}$$

در حالتی که $\frac{m_{\alpha'}}{m_A} << 1$ باشد رابطه جابجایی اخیر به رابطه زیر تبدیل می‌شود.

$$\left[\hat{\bar{r}}_{\alpha i}, \hat{\bar{P}}_{\alpha' i'}\right] \simeq i\hbar\delta_{ii'}\delta_{\alpha\alpha'} \tag{۶۷-۱}$$

بعلاوه قطبش و مغناطش اتمی کوانتش شده را می‌توان به صورت زیر تعریف کرد [۱۲].

$$\hat{P}_{at}(r) = \sum_\alpha q_\alpha \hat{\bar{r}}_\alpha \int_0^1 d\sigma\,\delta(r - \hat{r}_A - \sigma\hat{\bar{r}}_\alpha) \tag{۶۸-۱}$$

$$\begin{aligned}\hat{M}_{at}(r) = \frac{1}{2}\sum_\alpha q_\alpha \int_0^1 d\sigma\,\sigma\,\Big[&\delta(r - \hat{r}_A - \sigma\hat{\bar{r}}_\alpha)\hat{\bar{r}}_\alpha \times \dot{\hat{\bar{r}}}_\alpha \\ &- \dot{\hat{\bar{r}}} \times \hat{\bar{r}}_\alpha \delta(r - \hat{r}_A - \sigma\hat{\bar{r}}_\alpha)\Big]\end{aligned} \tag{۶۹-۱}$$

برای اتم‌های خنثی، چگالی‌های بار وجریان اتمی به قطبش و مغناطش اتمی مربوط می‌شوند. براین اساس روابط زیر را داریم.

$$\hat{\rho}_{at}(r) = -\nabla.\hat{P}_{at}(r) \tag{۷۰-۱}$$

$$\hat{j}_{at}(r) = \dot{\hat{P}}_{at}(r) + \nabla\times\hat{M}_{at}(r) + \hat{j}_r(r) \tag{۷۱-۱}$$

که در آن چگالی جریان رونتگن[1] ($\hat{j}_r(r)$) به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۳].

$$\hat{j}_r(r)=\frac{1}{2}\nabla\times\left[\hat{P}_{at}(r)\times\dot{\hat{r}}_A-\dot{\hat{r}}_A\times\hat{P}_{at}(r)\right] \qquad (۱-۷۲)$$

که این چگالی جریان، ناشی از حرکت مرکز جرم است. توجه کنید که از معادلات (۱-۵۹) و (۱-۷۰) معادله زیر را می‌توان نتیجه گرفت.

$$\varepsilon_0\nabla\hat{\varphi}_{at}(r)=\hat{P}^{\parallel}_{at}(r) \qquad (۱-۷۳)$$

با بسط تابع‌های دلتا در معادلات (۱-۶۸) و (۱-۶۹) حول مختصه‌های نسبی $\hat{\bar{r}}_\alpha$، مشاهده می‌کنیم که جمله‌های مرتبه مهم، چگالی‌های دوقطبی الکتریکی و مغناطیسی مربوط به اتم هستند و می‌توان دو رابطه زیر را نتیجه گرفت.

$$\hat{P}_{at}(r)=\hat{d}\,\delta(r-\hat{r}_A) \qquad (۱-۷۴)$$

$$\hat{M}_{at}(r)=\hat{m}\,\delta(r-\hat{r}_A) \qquad (۱-۷۵)$$

که در آن تکانه دو قطبی الکتریکی و مغناطیسی به شکل زیر نوشته می‌شود.

$$\hat{d}=\sum_\alpha q_\alpha\hat{\bar{r}}_\alpha=\sum_\alpha q_\alpha\hat{r}_\alpha \qquad (۱-۷۶)$$

$$\hat{m}=\frac{1}{2}\sum_\alpha q_\alpha\hat{\bar{r}}\times\dot{\hat{\bar{r}}}_\alpha \qquad (۱-۷۷)$$

توجه کنید که تنها در حالتی که اتم‌ها خنثی هستند تساوی دوم در معادله (۱-۷۶) برقرار است. با استفاده از هامیلتونی اتم (۱-۶۴) همراه با رابطه جابجایی (۱-۶۶) و معادله (۱-۶۳) رابطه زیر را به دست می‌آوریم.

$$\sum_\alpha\frac{q_\alpha}{m_\alpha}\left\langle m\left|\hat{\bar{P}}_\alpha\right|n\right\rangle=i\omega_{mn}d_{mn} \qquad (۱-۷۸)$$

$$\omega_{mn}=(E_m-E_n)/\hbar$$

$$d_{mn}=\left\langle m\left|\hat{d}\right|n\right\rangle$$

و با یک تبدیل به قانون جمع زیر می‌رسیم.

$$\frac{1}{2\hbar}\sum_m\omega_{mn}(d_{nm}d_{mn}+d_{mn}d_{nm})=\sum_\alpha\frac{q_\alpha^{\,2}}{2m_\alpha}1 \qquad (۱-۷۹)$$

۱-۲-۱ جفت شدگی کمینه

با استفاده از هامیلتون‌های میدان و اتم می‌خواهیم هامیلتونی برهمکنش میدان و اتم را به دست آوریم. در این راستا از مدل جفت شدگی کمینه که با جایگذاری $\hat{p}_\alpha\rightarrow\hat{p}_\alpha-q_\alpha\hat{A}(\hat{r}_\alpha)$ در هامیلتونی اتم (۱-۵۴) انجام می‌شود استفاده می‌کنیم. جمع هامیلتون‌های میدان و اتم و اضافه کردن برهمکنش کولمب اتم و میدان به آن، منجر به رابطه زیر می‌شود [۸، ۱۴].

---

[1] Röntgen