

Quantentheoretische und klassische  
Vakuum-Kräfte  
bei Temperatur Null  
und  
bei endlicher Temperatur

Quantum and Classical Vacuum Forces at  
Zero and Finite Temperature

(Much Ado About Nothing)

**Diplomarbeit**

vorgelegt von

Ole Niekerken

Februar 2009

II. Institut für theoretische Physik  
Department Physik  
UNIVERSITÄT HAMBURG

**Gutachter der Diplomarbeit:**

Prof. Dr. Klaus Fredenhagen

Prof. Dr. Klaus Sengstock

---

## Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird zunächst im Rahmen einer wohldefinierten Quantenfeldtheorie (im Ortsraum) die Casimir-Polder-Kraft [13] für Temperatur Null und für endliche Temperaturen mit Hilfe der „Methoden der Spiegelladungen“ berechnet. Die Rechnungen zu endlicher Temperatur werden im Rahmen von KMS-Zuständen [38] gemacht. Die so eingeführte Temperatur ist die des elektrischen Hintergrundfeldes und unterscheidet sich so von der in [7] eingeführten. Danach führen wir ein kanonisch quantisiertes, absorbierendes, inhomogenes, dispersives Ein-Oszillator-Modell für dielektrische Medien nach [44] ein, welches kausale Vertauschungsrelationen besitzt und dessen dielektrische Funktion automatisch die Kramers-Kronig-Relationen erfüllt. Mit diesem Modell berechnen wir dann die Casimir-Polder-Kraft an einem dielektrischen Interface bei endlicher Temperatur und zeigen fürs Experiment interessante Größen auf. Mit Hilfe der zuvor benutzten Methoden wird dann die Van-der-Waals-Kraft zwischen zwei Atomen für endliche Temperatur berechnet. Anschließend wird gezeigt, dass der Hochtemperatur-Limes, welcher nicht mehr von  $\hbar$  abhängt, der Casimir-Polder-Kraft sowie der Van-der-Waals-Kraft im Rahmen einer klassischen algebraischen statistischen Theorie verstanden werden kann. Dafür werden zuvor klassische KMS-Zustände eingeführt.

## Abstract

In this diploma thesis the Casimir-Polder force [13] at zero temperature and at finite temperatures will be calculated by using a well-defined quantum field theory (formulated in position space) and the method of image charges. For the calculations at finite temperature KMS-states [38] will be used. The so defined temperature describes the temperature of the electromagnetic background and differs from the one given in [7]. A one oscillator model for inhomogeneous dispersive absorbing dielectric material will be introduced and canonically quantized [44] to calculate the Casimir-Polder force at a dielectric interface at finite temperature. The model fulfils causal commutation relations and the dielectric function of the model fulfils the Kramers-Kronig relations. We will then use the same methods to calculate the van der Waals force between two neutral atoms at zero temperature and at finite temperatures. It will be shown that the high temperature behaviour of the Casimir-Polder force and the van der Waals force are independent of  $\hbar$ . This means that they have to be understood classically, what will then be shown in an algebraic statistical theory by using classical KMS states.

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Einheiten . . . . .	3
1.2	Konventionen . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Die Casimir-Polder-Kraft</b>	<b>5</b>
2.1	Die Casimir-Polder-Kraft unter idealen Randbedingungen bei $T = 0$ . . . . .	5
2.2	Die Casimir-Polder-Kraft bei endlicher Temperatur . . . . .	7
2.3	Casimir-Polder Kraft bei statischen Dielektrika . . . . .	11
2.4	Die Casimir-Kraft . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Quantenfeldtheorie in dielektrischen Medien</b>	<b>17</b>
3.1	Kanonische Quantisierung eines Oszillator-Modells für absorbierende inhomogene dispersive Medien . . . . .	18
3.2	Zeitabhängige Vertauschungs-Relation . . . . .	24
3.3	Die 2-Punkt-Funktion des elektrischen Feldes in dielektrischer Materie . . . . .	24
3.4	Absorption elektromagnetischer Strahlung im 1-Oszillator-Modell . . . . .	25
<b>4</b>	<b>Die Casimir-Polder-Kraft in dielektrischen Medien</b>	<b>27</b>
4.1	Casimir-Polder Kraft bei endlicher Temperatur in Anwesenheit dielektrischer Medien . . . . .	28
4.2	Casimir-Polder-Kraft im Limes statischer Dielektrika . . . . .	32
4.3	Numerische Resultate . . . . .	35
<b>5</b>	<b>Van-der-Waals-Wechselwirkung</b>	<b>38</b>
5.1	Temperaturabhängige Van-der-Waals-Wechselwirkung . . . . .	40
<b>6</b>	<b>KMS-Zustände und die 2-Punkt-Funktion des skalaren Feldes</b>	<b>43</b>
<b>7</b>	<b>Klassische KMS-Zustände und klassische Vakuum-Kräfte</b>	<b>46</b>
7.1	Die klassische 2-Punkt-Funktion zu endlicher Temperatur . . . . .	46
7.2	Klassische Vakuumkräfte bei endlicher Temperatur . . . . .	47
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>49</b>
<b>A</b>	<b>Zusammenhang zwischen der normalgeordneten Feldenergie und der Kraft auf einen elektrisch neutralen Körper</b>	<b>51</b>
<b>B</b>	<b>Zur temperaturabhängigen 2-Punkt-Funktion</b>	<b>52</b>
<b>C</b>	<b>Das Van-der-Waals-Potential in KMS-Störungstheorie</b>	<b>53</b>
<b>D</b>	<b>Eine kleine Grenzwertbetrachtung</b>	<b>54</b>
<b>E</b>	<b>Das Hopfield-Huttner-Barnett-Modell nach Welsch</b>	<b>55</b>
E.1	Quantenfeldtheorie in dielektrischen, magnetooptischen, nicht linearen und weiteren Medien . . . . .	56

---

<b>F</b>	<b>Greensche Funktionen der makroskopischen Elektrodynamik</b>	<b>58</b>
F.1	Greensche Funktion der elektrodynamischen Wellengleichung und die Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingungen . . . . .	59
F.1.1	Die skalare Helmholtz-Gleichung unter den Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingungen . . . . .	60
F.2	Die Greensche Funktion der Wellengleichung an einer dielektrischen Grenzfläche	60
<b>G</b>	<b>Kausalität, Antwortfunktionen und die Kramers-Kronig-Relationen</b>	<b>62</b>
<b>H</b>	<b>Zur CP-Kraft bei Anwesenheit von dielektrischen Medien</b>	<b>68</b>
H.0.1	Berechnung der Casimir-Kraft nach [30] . . . . .	69
H.0.2	Berechnung der Casimir-Polder-Kraft nach Milloni . . . . .	71
H.1	Berechnung der Casimir-Kraft nach Milton, bzw. Schwinger . . . . .	71
	<b>Literatur</b>	<b>74</b>



## 1 Einleitung

*Note notes, forsooth, and nothing!*  
*Much Ado About Nothing, William Shakespeare, 2.3.47-52*

Spätestens in der Quantenmechanik Vorlesung lernt jeder Physikstudent etwas über die Existenz einer so genannten Nullpunktsenergie, beispielsweise bei der Behandlung des harmonischen Oszillators. Doch ist diese Energie ein Relikt eines theoretischen Konstrukts oder eine physikalisch messbare Größe?

Eine Möglichkeit, diese Frage zu beantworten, wurde erstmals im Jahre 1948 durch Casimir und Polder eröffnet [13]. Casimir und Polder berechneten eine Kraft auf ein neutrales Atom vor einer ideal leitenden Platte. Diese Kraft resultiert aus den, aufgrund der an das Vakuumfeld gestellten Randbedingungen, nicht verschwindenden Korrelationen der elektromagnetischen Feldstärke und ist somit ein Effekt, welcher direkt durch die Nullpunktsenergie hervorgerufen wird. Bekannter ist die sogenannte Casimir-Kraft [12], welche die Kraft zwischen zwei ideal leitenden Platten beschreibt. Diese Kraft ist ebenfalls ein Effekt der Nullpunktsenergie. Die erste experimentelle Bestätigung der Rechnungen von Casimir gelang im Jahre 1957 [42]. Heute sind die Casimir-Polder-Kraft (CP-Kraft) und die Casimir-Kraft gut vermessen und es besteht kein Zweifel an der Existenz der Nullpunktsenergie. Effekte wie die spontane Emission oder die Lamb-Verschiebung lassen sich ebenfalls über die Kopplung an das Vakuumfeld verstehen (siehe z.B. [31]).

Die Theorie ist inzwischen in der Lage, die durch Vakuumfluktuationen erzeugten Kräfte weit über die idealen oben beschriebenen Situationen hinaus zu beschreiben und eine allgemeinere Begriffsbildung hat sich eingebürgert. Kräfte zwischen makroskopischen Körpern werden Casimir-Kräfte genannt, Kräfte zwischen einem Atom und makroskopischen Körpern Van-der-Waals-Kräfte. Die Kraft zwischen einer unendlich ausgedehnten Platte und einem Atom wird weiterhin CP-Kraft genannt. Ich möchte mich dieser Konvention anschließen, werde jedoch die Van-der-Waals-Kraft stets zwischen zwei als punktförmig genäherten Atomen berechnen. Das Ziel dieser Arbeit wird es sein, die CP-Kraft im Rahmen eines einfachen theoretischen Modells zu verstehen und dann in möglichst experimentnaher Anordnung auszurechnen. Hierzu werden wir zunächst die Ergebnisse von Casimir und Polder in einer wohldefinierten Quantenfeldtheorie im Ortsraum berechnen, ohne dass wir dazu Modensummen benötigen (Kapitel 2). Die Methode lässt sich dann sehr einfach auf eine Quantenfeldtheorie bei endlicher Temperatur übertragen, in dem wir mit so genannten Kubo-Martin-Schwinger(KMS)-Zuständen arbeiten (Kapitel 2.2 & 6). Als nächstes werden wir davon ausgehen, dass sich das Atom vor einer dielektrischen Grenzfläche befindet und das zugehörige statische Randwertproblem lösen. Auch diese Anordnung lässt sich im Ortsraum berechnen und ebenfalls auf endliche Temperaturen ausweiten. Wir verwenden dann die gleichen Methoden, um die Casimir-Kraft bei endlicher Temperatur und bei  $T = 0$  zu berechnen (Kapitel 2.4).

Ein weitaus komplexeres Thema ist die Behandlung der CP-Kraft in Medien mit inhomogenen, zeitabhängigen, dielektrischen Funktionen. Es fehlt hier zunächst an einer quantenfeldtheoretischen Beschreibung solcher Materie. Eine naive Quantisierung der makroskopischen Maxwell-Gleichungen führt zu einer nicht kausalen Theorie [4]. Wir wollen deswegen hier einen anderen Ansatz wählen und das Medium als Quantenfelder im Rahmen einer kanonisch quantisierten Theorie behandeln. Hierzu führen wir nach [44] das Medium im Rahmen eines Ein-Oszillator-Modells zur Beschreibung der Polarisation und ein Reservoir von harmonischen Oszillatoren zur Beschreibung der Absorption in der klassischen Elektrodynamik ein und quantisieren die so erhaltene Lagrange-Dichte kanonisch (Kapitel 3). Die so definierten Quantenfelder erfüllen die makroskopischen Maxwell-Gleichungen und haben kausale Vertauschungsrelationen. Darüber hinaus erfüllt die nur von den Kopplungen abhängende dielektrische Funktion des Modells automatisch die Kramers-Kronig-Relationen. Diese Theorie liefert die selben Ergebnisse wie eine phänomenologische Quantisierung nach [50], [51] oder auch [10] und bildet eine Erweiterung, auf inhomogene Medien, des viele Folge-Paper inspirierenden Werkes [4]. Basierend auf Methoden des idealen Falls, lässt sich dann die CP-Kraft an einem dielektrischen Interface bei Temperatur Null und bei endlicher Temperatur berechnen. Die Rechnungen bestätigen die Theorie von Lifschitz [28], beschreiben aber eine größere Klasse von dielektrischen Grenzflächen (siehe Kapitel E.1).

Casimir und Polder berechneten in [13] nicht nur die CP-Kraft, sondern auch die Kraft zwischen zwei elektrisch neutralen Atomen (oft wird diese Kraft als Van-der-Waals-Kraft bezeichnet). Das Ergebnis lässt sich mit den gleichen Methoden wie oben reproduzieren und auf den Fall endlicher Temperaturen erweitern (Kapitel 5). Es folgt dann eine Beschreibung von KMS-Zuständen und die Berechnung der zuvor oft benutzten 2-Punkt-Funktion des elektrischen Feldes bei endlichen Temperaturen. Betrachtet man das Hochtemperatur-Verhalten der CP-Kraft und der Van-der-Waals-Kraft, so stellt man fest, dass die Ausdrücke kein  $\hbar$  mehr enthalten und so klassisch interpretiert werden sollten. Dieser Idee wird am Ende der Arbeit verfolgt. Es werden zunächst klassische KMS-Zustände im Rahmen einer algebraisch formulierten statistischen Theorie definiert und dann die Hochtemperatur-Ausdrücke der beiden Kräfte im Rahmen dieser Theorie reproduziert. Im Anhang folgt dann eine Konsistenzüberlegung zu dem benutzten Ansatz zur Berechnung der Potentiale, eine Bemerkung zur 2-Punkt-Funktion bei endlicher Temperatur, eine Beschreibung der phänomenologischen Quantisierung dielektrischer Materie nach Welsch, einige Überlegungen zur Lösung der Wellengleichung in dielektrischer Materie an einem dielektrischen Interface und zu den Kramers-Kronig-Relationen in ihrer allgemeinen Form für distributionelle Antwortfunktionen, sowie ein historischer Überblick über die Berechnungen der CP-Kraft in dielektrischen Medien.



## 1.1 Einheiten

In dieser Arbeit wird durchgehend in Heaviside-Lorentz-Einheiten gerechnet. In den Rechnungen setzen wir  $\hbar = c = 1$ , wichtige Ergebnisse werden aber mit  $\hbar$  und  $c$  angegeben. Die stationären Maxwell-Gleichungen lauten dann in differentieller Schreibweise [22]<sup>1</sup>

$$\nabla \mathbf{D} = 4\pi\rho, \quad (1.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad (1.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad (1.3)$$

$$\nabla B = 0, \quad (1.4)$$

mit

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad (1.5)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{H} - \mathbf{M}. \quad (1.6)$$

In der Originalarbeit von Casimir und Polder [13] wird das CP-Potential in Gaußschen Einheiten angegeben, da sich die Literatur meist an dieser Darstellung orientiert, definieren wir die lineare Polarisierbarkeit  $\alpha$  eines einzelnen Atoms, in einem äußeren Feld  $\mathbf{E}$ , unter Vernachlässigung des atomaren Feldes durch:

$$\mathbf{P} = \langle \mathbf{p}_{Atom} \rangle = 4\pi\alpha\mathbf{E}. \quad (1.7)$$

Durch diese Konvention gleichen sich die Ergebnisse mit denen in der Originalarbeit.

## 1.2 Konventionen

In der physikalischen Literatur gibt es einige Konventionen, die nicht überall einheitlich getroffen werden. An dieser Stelle sollten wir die für diese Diplomarbeit wichtigen festlegen, damit keine Unklarheiten entstehen. Ein Teil der Arbeit haben wir bereits erledigt, da wir das Einheitensystem fixiert haben. Kommen wir nun zu anderen Konventionen.

Die Fourier-Transformierte einer Funktion sei definiert über

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{f}(\omega) e^{i\omega t}, \quad (1.8)$$

wobei jedoch die Tilde über den fouriertransformierten Funktionen meist weggelassen wird. Die Minkowski-Metrik sei gegeben durch

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

Sei  $A$  ein Operator, dann notieren wir mit  $A^*$  den adjungierten Operator von  $A$  und mit  $\bar{f}$  die komplex konjugierte einer Funktion  $f$ .

<sup>1</sup>Man beachte, dass in der Einheiten-Umrechnungstabelle A.4 in [22] die Einheit des elektrischen Potentials, im Gaußschen CGS-System, falsch definiert ist. Zum Zeitpunkt dieser Arbeit ist dieser Fehler noch nicht im Errata vom deGruyter-Verlag.

Über in einem Summanden doppelte vorkommende lateinische Indizes wird grundsätzlich von 1 bis 3 summiert und über griechische Indizes von 0 bis 3.

Vektoren und Vektor-Operatoren in 3 Dimensionen werden **fett** gedruckt. Klassische Größen und die zugehörigen Operatoren sind aus dem Kontext zu unterscheiden.

Taucht die Fourier-Transformierte  $\underline{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$  einer reellen Funktion  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  auf, so verstehen wir darunter die Zerlegung dieser nach

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \int_0^\infty d\omega \underline{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} + \int_0^\infty d\omega \overline{\underline{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)} e^{i\omega t} \\ &= \int_0^\infty d\omega \underline{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} + \int_0^\infty d\omega \underline{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, -\omega) e^{-i\omega t}.\end{aligned}\tag{1.10}$$

## 2 Die Casimir-Polder-Kraft

Auf ein neutrales Atom mit nicht verschwindender Polarisierbarkeit  $\alpha$ , welches sich neben einer ideal leitenden Platte befindet, wirkt eine attraktive Kraft, die nach ihren Entdeckern benannte Casimir-Polder-Kraft [13]. Casimir und Polder haben ausgehend von den Wellenfunktionen der Atome und einer Beschreibung des elektrischen Feldes im Impulsraum, die elektrische Wechselwirkungsenergie in vierter Ordnung quantenmechanischer Störungstheorie berechnet. Dabei kommt die übliche Beschreibung der Polarisierbarkeit über die Dipolmomente der Atome [14] zum tragen und führt dann in einer Näherung für große Abstände  $d$  zu der bekannten Formel für das retardierte CP-Potential

$$V_{\text{CP}}(d) = -\frac{3\alpha}{8\pi d^4}. \quad (2.1)$$

Wir wollen in diesem Kapitel zunächst dieses Ergebnis auf einem anderen Wege berechnen und es dann auf den Fall endlicher Temperatur und elektrostatischer Dielektrika ausweiten. Am Ende des Abschnittes werden wir den neu eingeführten Formalismus verwenden, um die Casimir-Kraft zu berechnen. Diese wurde ebenfalls erstmals von Casimir in [12] berechnet und wir werden sie hier auf den Fall endlicher Temperatur verallgemeinern.

### 2.1 Die Casimir-Polder-Kraft unter idealen Randbedingungen bei $T = 0$

Um (2.1) zu berechnen, wählen wir einen sehr einfachen Ansatz. Wir beschreiben das Atom als punktförmiges Teilchen mit konstanter Polarisierbarkeit  $\alpha_0 = \alpha(\omega = 0)$ . Das Atom wird auf Grund der Vakuumfluktuationen des elektrischen Feldes, welche wegen der (durch die ideal leitende Platte) gegebenen Randbedingungen nicht verschwinden, polarisiert und liefert so einen ortsabhängigen Beitrag zur Energie. Diesen Teil der Energie werden wir als CP-Potential interpretieren (siehe Anhang A). Die Wechselwirkungsenergiedichte eines polarisierbaren Mediums in einem elektrischen Feld  $\mathbf{E}(\mathbf{x})$  beträgt [22]

$$w_{\text{ww}}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\mathbf{E}(\mathbf{x})\mathbf{P}(\mathbf{x}). \quad (2.2)$$

Besteht das Medium aus nur einem Teilchen der statischen Polarisierbarkeit  $4\pi\alpha_0$  am Ort  $\mathbf{d}$ , so ist die Polarisation

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}) = 4\pi\delta(\mathbf{x} - \mathbf{d})\alpha_0\mathbf{E}(\mathbf{x}). \quad (2.3)$$

Der Hamiltonoperator des Systems lautet dann

$$H_{\mathbf{d}} = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{x} (:\mathbf{E}(\mathbf{x})^2: - 4\pi\alpha_0\delta(\mathbf{x} - \mathbf{d}) : \mathbf{E}(\mathbf{x})^2 :), \quad (2.4)$$

wobei mit  $:\bullet:$  die Normalordnung gemeint ist. Der Faktor  $4\pi$  bei der Polarisierbarkeit rührt daher, dass alle Rechnung in Heaviside-Lorentz-Einheiten gemacht werden und so die Polarisierbarkeit diesen Faktor mit sich bringt. Er wurde hier eingeführt, um eine Vergleichbarkeit mit der Literatur zu gewährleisten, genaueres in Kapitel (1.1).

Den vom Wand-Atom-Abstand  $\mathbf{d}$  abhängigen Teil der Energie werden wir als das CP-Potential interpretieren. Wir müssen dazu nur den Erwartungswert des zweiten Terms in (2.4) berechnen. Diesen berechnen wir ausgehend von den Vakuum Erwartungswerten von Produkten

des Feldstärketensors der Quantenelektrodynamik, den 2-Punkt-Wightmanfunktionen. Die 2-Punkt-Funktion des elektromagnetischen Feldstärketensors<sup>2</sup> lautet [36]

$$\begin{aligned} W_{\mu\nu\sigma\tau}(x, y) &= (\Omega, F_{\mu\nu}(x)F_{\sigma\tau}(y)\Omega) \\ &= (g_{\mu\sigma}\partial_\nu\partial_\tau - g_{\nu\sigma}\partial_\mu\partial_\tau - g_{\mu\tau}\partial_\nu\partial_\sigma + g_{\nu\tau}\partial_\mu\partial_\sigma)D_+(x - y), \end{aligned} \quad (2.5)$$

mit

$$D_+(x) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2|\mathbf{p}|} e^{-i(|\mathbf{p}|t - \mathbf{p}\mathbf{x})}. \quad (2.6)$$

Bei der Berechnung des Erwartungswertes der Energie müssen wir die Randbedingungen, welche uns die ideal leitende Platte auferlegt, beachten. Auf der Leiteroberfläche bei  $z=0$  müssen die Tangentialkomponenten des elektrischen Feldes und die Normalkomponente des magnetischen Feldes verschwinden. Aufgrund der Maxwell-Gleichung  $\partial^\mu F_{\mu\nu} = 0$  müssen dann die Normalenableitungen der anderen Feldkomponenten bei  $z=0$  ebenfalls verschwinden;

$$\begin{aligned} F_{01} = E_x(z=0) = 0, F_{02} = E_y(z=0) = 0, F_{12} = B_z(z=0) = 0, \\ \partial_3 F_{03} = \partial_z E_z(z=0) = 0, \partial_3 F_{13} = \partial_z B_y(z=0) = 0, \partial_3 F_{32} = \partial_z B_x(z=0) = 0. \end{aligned}$$

Die Randbedingungen lassen sich nach dem Prinzip der Bildladung erfüllen, wir brauchen dazu nur eine Spiegelung an der leitenden Platte ([9] und [18]). Die Vakuum Erwartungswerte des E-Feldes berechnen sich dann zu

$$(\Omega, F_{01}(x)F_{01}(y)\Omega) = (-\partial_0^2 + \partial_1^2)(D_+(x - y) - D_+(x - Sy)), \quad (2.7a)$$

$$(\Omega, F_{02}(x)F_{02}(y)\Omega) = (-\partial_0^2 + \partial_2^2)(D_+(x - y) - D_+(x - Sy)), \quad (2.7b)$$

$$(\Omega, F_{03}(x)F_{03}(y)\Omega) = (-\partial_0^2 + \partial_3^2)(D_+(x - y) + D_+(x - Sy)), \quad (2.7c)$$

wobei S als die Spiegelung an der leitenden Platte, also  $z \mapsto -z$ , definiert ist. Die Distribution  $D_+(x)$  kann für  $x^2 \neq 0$  als Funktion angegeben werden [18]

$$D_+(x) = \frac{-1}{4\pi^2 x^2}. \quad (2.8)$$

Normalordnung von  $\mathbf{E}^2$  bedeutet hier einfach das Abziehen des Vakuum Erwartungswertes ohne Randbedingungen, also das Abziehen des Ausdrucks mit Einheits-Spiegelung. Summieren wir die Beiträge der Feldstärkekomponenten auf und berücksichtigen, dass  $D_+(x)$  eine Lösung der Wellengleichung ist, so ergibt sich an  $x = (0, 0, 0, d)^t$ , beziehungsweise an  $x - Sy = (0, 0, 0, 2d)^t$

$$\begin{aligned} V_{CP}(d) &= -\frac{4\pi}{2}\alpha_0 \left( \Omega, : \mathbf{E}(0, \mathbf{x})^2 : \Omega \right) \Big|_{x=(0,0,0,d)} \\ &= -\frac{4\pi}{2}\alpha_0 (-\partial_0^2 + \partial_3^2 - \partial_2^2 - \partial_1^2) D_+(x) \Big|_{x=(0,0,0,d)} \\ &= -\frac{4\pi}{2}\alpha_0 (2\partial_3^2) D_+(x) \Big|_{x=(0,0,0,d)} \\ &= -\frac{4\pi}{2}\alpha_0 \left( -\frac{-x_0^2 + x_1^2 + x_2^2 - 3x_3^2}{2\pi^2 (-x_0^2 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^3} \right) \Big|_{x=(0,0,0,d)} \\ &= -\frac{3\alpha_0}{8\pi d^4}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

<sup>2</sup>Für eine elegante Herleitung sei auf [18] verwiesen.

Führen wir  $\hbar$  und  $c$  wieder ein, so erhalten wir für das CP-Potential in Heaviside-Lorentz-Einheiten

$$V_{CP}(d) = -\frac{3\alpha_0\hbar c}{8\pi d^4}. \quad (2.10)$$

Das heißt, an dem neutralen Atom, welches sich im Abstand  $d$  von einer ideal leitenden Platte befindet, wirkt eine Kraft

$$F(d) = -\partial_d V_{CP}(d) = -\frac{12\alpha_0\hbar c}{8\pi d^5}. \quad (2.11)$$

Dies ist genau das Ergebnis, welches Casimir und Polder in [13] berechnet haben. Der Ansatz eines punktförmigen Atoms mit konstanter Polarisierbarkeit führt also zu der retardierten CP-Kraft, welche wie wir später sehen werden, in einem bestimmten Abstandsbereich gültig ist.

## 2.2 Die Casimir-Polder-Kraft bei endlicher Temperatur

Die Quantenfeldtheorie, wie sie in den meisten Lehrbüchern formuliert wird, berechnet alle Größen bei Temperatur  $T = 0$ . Ein sehr elegantes Verfahren zur Rechnung bei endlicher Temperatur, wird durch die Kubo-Martin-Schwinger-Zustände (KMS-Zustände) gegeben (siehe Kapitel 6). Die so definierte Temperatur beschreibt in unserem Fall die Temperatur des elektromagnetischen Hintergrundfeldes. Bei der Berechnung der CP-Kraft ist also mit der Temperatur die des elektromagnetischen Vakuums gemeint. Bei denen in der Literatur, im Rahmen der Casimir-Kräfte gebräuchlichen Rechnungen, wird die Temperatur über die Bose-Verteilung des elektrischen Feldes im Frequenzraum eingeführt und entspricht unserer Definition der Temperatur. Wir wollen nun die CP-Kraft bei idealen Randbedingungen und endlicher Temperatur berechnen. Für den Fall eines Atoms vor einem idealen Leiter wird dies an dieser Stelle erstmals gemacht werden. Darüber hinaus werden wir erstmals im Rahmen der Vakuumkräfte mit KMS-Zuständen arbeiten. Die einzige Arbeit zur temperaturabhängigen CP-Kraft bei idealen Randbedingungen [7] definiert die Temperatur als Gleichgewichtsparameter für das Atom und das elektrische Feld und kommt so zu grundsätzlich anderen Ergebnissen. Ein sehr interessanter Punkt wird sein, dass die CP-Kraft bei hohen Temperaturen nicht von  $\hbar$  abhängt und so als klassische Kraft interpretiert werden kann. Diese werden wir im Rahmen einer algebraisch formulierten statistischen Theorie in Kapitel 7 verstehen können. Diese Idee wurde ebenfalls erstmals von Boyer [7] aufgebracht.

Zur Berechnung des CP-Potentials bei endlicher Temperatur können wir analog vorgehen wie oben, müssen jedoch den elektromagnetischen Feldstärketensor auf KMS-Zuständen auswerten. Die 2-Punkt-Funktion bei  $\beta = \frac{1}{kT}$  ergibt sich dann zu<sup>3</sup>

$$\begin{aligned} W_{\mu\nu\sigma\tau}(x, y) &= (\Omega, F_{\mu\nu}(x)F_{\sigma\tau}(y)\Omega) \\ &= (g_{\mu\sigma}\partial_\nu\partial_\tau - g_{\nu\sigma}\partial_\mu\partial_\tau - g_{\mu\tau}\partial_\nu\partial_\sigma + g_{\nu\tau}\partial_\mu\partial_\sigma)D_\beta(x - y), \end{aligned} \quad (2.12)$$

mit

$$D_\beta(x) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2|\mathbf{p}|} \left( \frac{e^{-ipx}}{1 - e^{-\beta|\mathbf{p}|}} + \frac{e^{ipx}}{e^{\beta|\mathbf{p}|} - 1} \right). \quad (2.13)$$

<sup>3</sup>Siehe Kapitel 6 und Formel (6.13)

Zunächst wollen wir  $D_\beta(x)$  für  $x^2 \neq 0$  berechnen. Wir haben  $D_\beta(x)$  als Distribution aufzufassen und müssen so mit einer Testfunktion schmieren

$$\begin{aligned}
D_\beta(f) &= \int d^4x D_\beta(x) f(x) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^4x \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2|\mathbf{p}|} \left( \frac{e^{-ipx}}{1 - e^{-\beta|\mathbf{p}|}} + \frac{e^{ipx}}{e^{\beta|\mathbf{p}|} - 1} \right) f(x) \\
&= \frac{2\pi}{(2\pi)^3} \int d^4x \int \frac{dp}{2p} \int_1^{-1} d(\cos\theta) p^2 \left( \frac{e^{-ip(t-|\mathbf{x}|\cos\theta)}}{1 - e^{-\beta p}} + \frac{e^{ip(t-|\mathbf{x}|\cos\theta)}}{e^{\beta p} - 1} \right) f(x) \\
&= -i \int d^4x \int_0^\infty \frac{dp}{8\pi^2|\mathbf{x}|} \left( \frac{e^{-ip(-|\mathbf{x}|+t)} - e^{-ip(|\mathbf{x}|+t)}}{1 - e^{-\beta p}} - \frac{e^{ip(-|\mathbf{x}|+t)} - e^{ip(|\mathbf{x}|+t)}}{-1 + e^{\beta p}} \right) f(x).
\end{aligned} \tag{2.14}$$

Wir ersetzen nun in dem Summanden des Integranden  $t$  durch  $t - i\epsilon$ . Im Limes  $\epsilon \rightarrow 0$  erhalten wir dann das vorige Integral zurück

$$\begin{aligned}
D_\beta(f) &= \int d^4x \int_0^\infty \frac{-idp}{8\pi^2|\mathbf{x}|} \\
&\quad \cdot \left( \frac{e^{-ip(-i\epsilon-|\mathbf{x}|+t)} - e^{-ip(-i\epsilon+|\mathbf{x}|+t)}}{1 - e^{-\beta p}} - \frac{e^{ip(-i\epsilon-|\mathbf{x}|+t)} - e^{ip(-i\epsilon+|\mathbf{x}|+t)}}{-1 + e^{\beta p}} \right) f(x) \\
&= - \int d^4x \frac{\sinh^{-1}\left(\frac{\pi(|\mathbf{x}|-t+i\epsilon)}{\beta}\right) \sinh^{-1}\left(\frac{\pi(|\mathbf{x}|+t-i\epsilon)}{\beta}\right) \sinh\left(\frac{2\pi|\mathbf{x}|}{\beta}\right)}{8\beta\pi|\mathbf{x}|} f(x)
\end{aligned} \tag{2.15}$$

$$= - \int d^4x \frac{\coth\left(\frac{\pi(|\mathbf{x}|-t+i\epsilon)}{\beta}\right) + \coth\left(\frac{\pi(|\mathbf{x}|+t-i\epsilon)}{\beta}\right)}{8\pi|\mathbf{x}|\beta} f(x). \tag{2.16}$$

Die 2-Punkt-Funktion lautet also für  $x^2 \neq 0$

$$\begin{aligned}
D_\beta(x) &= - \frac{\coth\left(\frac{\pi(|\mathbf{x}|-t+i\epsilon)}{\beta}\right) + \coth\left(\frac{\pi(|\mathbf{x}|+t-i\epsilon)}{\beta}\right)}{8\pi|\mathbf{x}|\beta} \\
&= \frac{1 - e^{\frac{4\pi|\mathbf{x}|}{\beta}}}{4 \left(-1 + e^{\frac{2\pi(|\mathbf{x}|-t)}{\beta}}\right) \left(-1 + e^{\frac{2\pi(|\mathbf{x}|+t)}{\beta}}\right) \pi|\mathbf{x}|\beta}.
\end{aligned} \tag{2.17}$$

Im Anhang B sind hierzu einige Konsistenzüberlegungen zu finden.

Nun können wir den renormierten Vakuumerwartungswert der Wechselwirkungsenergiedichte berechnen

$$(\Omega, : F_{01}(x) F_{01}(y) : \Omega)_{KMS} = (-\partial_0^2 + \partial_1^2)(-D_\beta(x - Sy)) + (-\partial_0^2 + \partial_1^2)(-D_\beta^{\text{ren}}(x - y)), \tag{2.18a}$$

$$(\Omega, : F_{02}(x) F_{02}(y) : \Omega)_{KMS} = (-\partial_0^2 + \partial_2^2)(-D_\beta(x - Sy)) + (-\partial_0^2 + \partial_2^2)(-D_\beta^{\text{ren}}(x - y)), \tag{2.18b}$$

$$(\Omega, : F_{03}(x) F_{03}(y) : \Omega)_{KMS} = (+\partial_0^2 - \partial_3^2)(-D_\beta(x - Sy)) + (-\partial_0^2 + \partial_3^2)(-D_\beta^{\text{ren}}(x - y)), \tag{2.18c}$$

mit  $D_\beta^{\text{ren}}(x) = D_\beta(x) - D_{\beta=0}(x)$ . Die Normalordnung haben wir also für alle Temperaturen einheitlich definiert, indem wir den Beitrag der 2-Punkt-Funktion bei  $T = 0$  abziehen. Dies

führt dazu, dass das Potential nur bis auf eine Funktion von  $\beta$  bestimmt ist, welche allerdings nicht vom Ort abhängt. Da wir aus physikalischen Gründen nur an Kräften interessiert sind, können wir diese Konstante im Ort später ignorieren. Summieren wir wieder die Beiträge der Feldkomponenten auf, berücksichtigen dass  $D_\beta(x)$  eine Lösung der Wellengleichung ist und werten das Ganze im Koinzidenzlimites  $y \rightarrow x$  an  $x = (0, 0, 0, d)^t$ , also  $x - Sy = 2de_3$  und  $x - y = 0$  aus, erhalten wir für das Potential

$$\begin{aligned} V_{CP}^\beta(d) &= 2\pi\alpha_0 (\Omega, : \mathbf{E}(x)^2 : \Omega)_{KMS}|_{x=(0,0,0,d)} \\ &= - \frac{\left( \coth\left(\frac{2d\pi}{\beta}\right) \beta^2 + 2d\pi \left[ \beta + 2d\pi \coth\left(\frac{2d\pi}{\beta}\right) \right] \sinh\left(\frac{2d\pi}{\beta}\right)^{-2} \right) \alpha_0}{4d^3\beta^3} - \frac{4\pi^3\alpha}{15\beta^4}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Wir haben also einen analytischen Ausdruck für das temperaturabhängige CP-Potential gefunden. Führen wir wieder  $\hbar$  und  $c$  ein und streichen letzten, nicht vom Ort abhängigen Term, erhalten wir für das CP-Potential bei endlicher Temperatur

$$V_{CP}^\beta(d) = - \frac{\alpha_0 \hbar c \left( \coth\left(\frac{2d\pi}{\beta \hbar c}\right) \hbar^2 c^2 \beta^2 + 2d\pi \left[ \hbar c \beta + 2d\pi \coth\left(\frac{2d\pi}{\beta \hbar c}\right) \right] \sinh\left(\frac{2d\pi}{\beta \hbar c}\right)^{-2} \right)}{4d^3(\hbar c)^3 \beta^3}. \quad (2.20)$$

Da dieses Ergebnis neu ist, möchten wir (2.20) für große Temperaturen mit den Ergebnissen der Literatur vergleichen, in der nur dieser Spezialfall berechnet wird. Dafür führen wir zunächst die dimensionslose Größe  $\rho = \frac{2\pi d}{\beta}$  ein. Das Potential lautet dann

$$V_{CP}^\beta(d) = - \frac{\alpha \rho \coth(\rho)}{8\pi d^4} (1 + \rho^2 \sinh(\rho)^{-2} + 2\rho \sinh(2\rho)^{-1}). \quad (2.21)$$

Für kleine Temperaturen (also  $\rho \ll 1$ ) verhalten sich die Hyperbolicus-Funktionen wie

$$\begin{aligned} \coth(\rho) &\approx \frac{1}{\rho}, \\ \sinh(\rho)^{-1} &\approx \frac{1}{\rho}. \end{aligned}$$

Wir bekommen dann von allen drei Termen in der Klammer von (2.21) einen Beitrag von 1 und erhalten in führender Ordnung das CP-Potential (2.1) bei  $T = 0$ .

Für große Temperaturen (also  $\rho \gg 1$ ) wird  $\coth(\rho) = 1$  und  $\sinh(\rho)^{-1}$  fällt exponentiell auf 0 ab und wir erhalten in führender Ordnung

$$V_{CP}^\beta(d) \approx - \frac{kT\alpha_0}{4d^3}. \quad (2.22)$$

Dieses Ergebnis findet sich unter anderem in [19]. Man beachte, dass (2.22) nicht von  $\hbar c$  abhängt. Dies wird wie oben bereits erwähnt in Kapitel 7 näher behandelt. An den Formeln mit  $\hbar$  und  $c$  erkennen wir, dass die Auswahl der gültigen Formel sehr stark vom Abstand des Atoms von der leitenden Platte abhängt. Die entscheidende Größe ist die thermische Wellenlänge

$$(2.23)$$

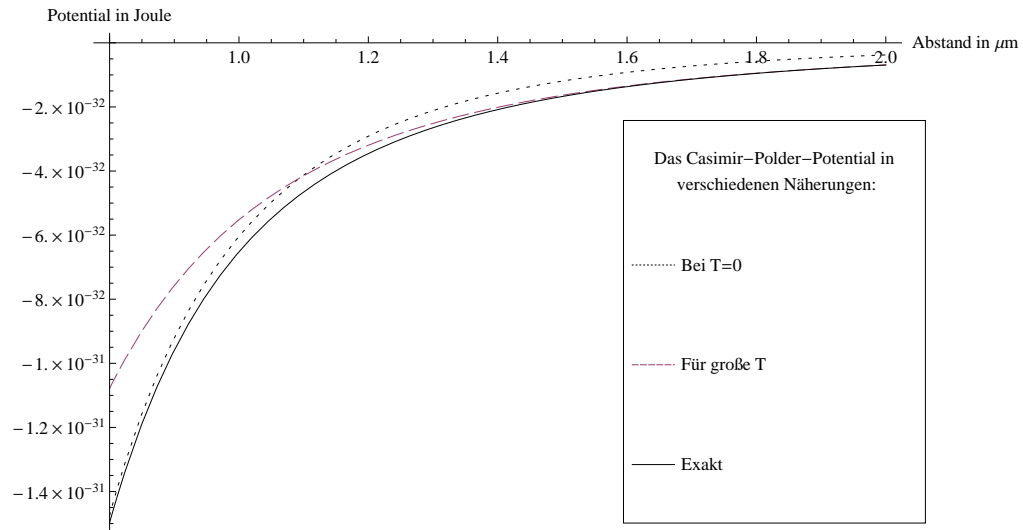


Abbildung 1: Das CP-Potential bei  $T = 1000$  Kelvin für ein Atom der Polarisierbarkeit  $\alpha = 16 \cdot 10^{-30} \text{m}^3$  (Lithium).

Ist der Abstand des Atoms von der Wand viel größer als  $\lambda_T$ , so dominiert der Ausdruck (2.22), ist der Abstand viel kleiner als  $\lambda_T$ , ist das CP-Potential (2.9) eine gute Näherung. In Abbildung 1 sehen wir die Potentialverläufe der verschiedenen Näherungen und des exakten Ergebnisses.

Betrachten wir die Temperaturabhängigkeit des CP-Potential bei  $d = 5 \mu\text{m}$  (Abbildung 2), sehen wir, dass ab etwa 1500 Kelvin die Niedrigtemperatur-Näherung versagt und darunter die Hochtemperatur-Näherung keine besonders guten Ergebnisse liefert. Ich habe keine Messdaten zu dem exakten Temperaturverlauf gefunden, eine Messung wäre möglicherweise von Interesse. Insbesondere wäre es interessant, den Punkt zu vermessen, an dem der Sprung zwischen den Näherungen stattfindet.



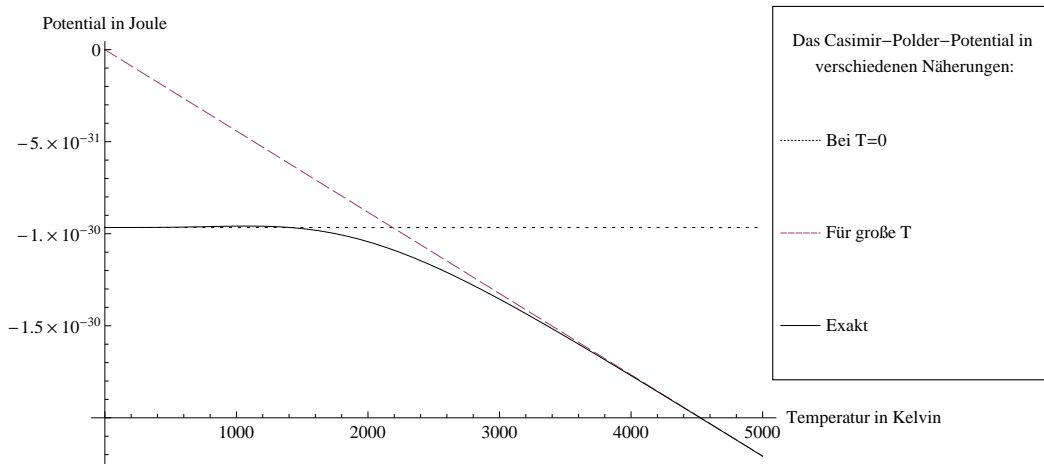


Abbildung 2: Das CP-Potential bei  $d = 0.5\mu\text{m}$  gegen die Temperatur für ein Atom der Polarisierbarkeit  $\alpha = 16 \cdot 10^{-30} \text{m}^3$  (Lithium).

### 2.3 Casimir-Polder Kraft bei statischen Dielektrika

Wir wollen nun das Casimir-Polder-Potential für den Fall ausrechnen, in dem sich ein elektrisch neutrales Atom in einem Dielektrikum ( $\epsilon_1$ ) gegenüber einem Halbraum ( $\epsilon_2$ ) befindet. Wir nehmen an, dass sich die beiden Dielektrika statisch beschreiben lassen und berechnen wie oben die Feldenergie unter den klassischen Randbedingungen. In der statischen Näherung ist die Wechselwirkungsenergiedichte gegeben durch

$$\omega_{CP}^\epsilon(x) = -\frac{4\pi}{2} \alpha_0 \epsilon_1 : \mathbf{E}(0, \mathbf{x})^2 : . \quad (2.24)$$

Wir suchen also die 2-Punkt-Funktion, welche das Randwertproblem des statischen dielektrischen Interfaces löst. Diese werden wir wieder über die Methode der Spiegelladungen konstruieren. Die Abmessungen sollen so beschaffen sein, dass die Dicke des Halbraums groß gegenüber dem Abstand des Atoms von diesem ist. Betrachten wir zunächst ein Analogon aus der Elektrostatik (z.B. [22]). Eine Ladung  $q$  befindet sich gegenüber eines Halbraums, gesucht ist das Potential im gesamten Raum. Die X-Y-Ebene bilde die Grenze zwischen den beiden Halbräumen. Dann müssen an dieser Fläche die Tangentialkomponenten des elektrischen Feldes  $E_x$  und  $E_y$  stetig in z-Richtung sein und die z-Komponente des elektrischen Feldes  $\lim_{z \nearrow 0} \epsilon_2 E_z = \lim_{z \searrow 0} \epsilon_1 E_z$  erfüllen. Bestimmen wir zunächst die Potentiale auf beiden Seiten Grenzfläche. Dazu denken wir uns eine Spiegelladung im selben Abstand zur Grenzfläche wie die ursprüngliche Ladung, deren Ladung jedoch zunächst nicht bekannt ist. Das Potential für  $z > 0$  lautet dann im Punkt P in Zylinderkoordinaten

$$\Phi(\rho, \phi, z) = \frac{1}{\epsilon_1} \left( \frac{q}{R_1} + \frac{q'}{R_2} \right), \quad (2.25)$$

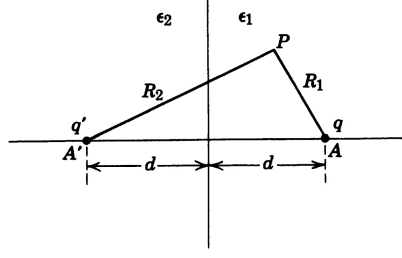


Abbildung 3: Grenzfläche der Dielektrika, Übernommen aus [22]

mit  $R_1 = \sqrt{\rho^2 + (d - z)^2}$  und  $R_2 = \sqrt{\rho^2 + (d + z)^2}$ . Für das Potential im Bereich  $z < 0$  setzen wir mit

$$\Phi(\rho, \phi, z) = \frac{q''}{\epsilon_2 R_1} \quad (2.26)$$

an, wobei  $q''$  sich am Ort der nicht fiktiven Ladung befinden soll. Da nach Konstruktion des Potentials  $\mathbf{E}(\mathbf{x}) = -\nabla\Phi(\mathbf{x})$  ist, folgt aus den obigen Randbedingungen

$$q - q' = q'', \quad (2.27a)$$

$$\frac{q + q'}{\epsilon_1} = \frac{q''}{\epsilon_2}. \quad (2.27b)$$

Damit ergibt sich für die Spiegelladungen

$$q' = -\frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_2 + \epsilon_1} q, \quad (2.28a)$$

$$q'' = \frac{2\epsilon_2}{\epsilon_2 + \epsilon_1} q. \quad (2.28b)$$

Die Spiegelladung am Ort  $-z$  erhält also einen Faktor  $-\frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_1 + \epsilon_2}$ .

Lösen wir nun das Randwertproblem für die 2-Punkt-Funktion des elektromagnetischen Feldes (2.5). Aus dem Analogon übernehmen wir den Ansatz für die 2-Punkt-Funktion in den Bereichen der Dielektrika<sup>4</sup> 1 und 2

$$W_{0101}^{\epsilon_1}(x, y) = \frac{1}{\epsilon_1} (-\partial_{x_0}^2 + \partial_{x_1}^2) (D_+(x - y) + AD_+(x - Sy)), \quad (2.29)$$

$$W_{0101}^{\epsilon_2}(x, y) = \frac{1}{\epsilon_2} (-\partial_{x_0}^2 + \partial_{x_1}^2) (BD_+(x - y)), \quad (2.30)$$

$$W_{0202}^{\epsilon_1}(x, y) = \frac{1}{\epsilon_1} (-\partial_{x_0}^2 + \partial_{x_2}^2) (D_+(x - y) + AD_+(x - Sy)), \quad (2.31)$$

$$W_{0202}^{\epsilon_2}(x, y) = \frac{1}{\epsilon_2} (-\partial_{x_0}^2 + \partial_{x_2}^2) (BD_+(x - y)), \quad (2.32)$$

$$W_{0303}^{\epsilon_1}(x, y) = \frac{1}{\epsilon_1} (-\partial_{x_0}^2 + \partial_{x_3}^2) (D_+(x - y) - AD_+(x - Sy)), \quad (2.33)$$

$$W_{0303}^{\epsilon_2}(x, y) = \frac{1}{\epsilon_2} (-\partial_{x_0}^2 + \partial_{x_3}^2) (BD_+(x - y)). \quad (2.34)$$

<sup>4</sup>Die Vorfaktoren  $\frac{1}{\epsilon_i}$  tauchen auf, damit der quantisierte Feldstärketensor die operatorwertigen Maxwell-Gleichungen in statischen Dielektrika erfüllt [49].

Die Randbedingungen

$$\lim_{x^3 \nearrow 0} W_{0101}^{\epsilon_2}(x, y) = \lim_{x^3 \searrow 0} W_{0101}^{\epsilon_1}(x, y), \quad (2.35a)$$

$$\lim_{x^3 \nearrow 0} W_{0202}^{\epsilon_2}(x, y) = \lim_{x^3 \searrow 0} W_{0202}^{\epsilon_1}(x, y), \quad (2.35b)$$

$$\lim_{x^3 \nearrow 0} \epsilon_2 W_{0303}^{\epsilon_2}(x, y) = \lim_{x^3 \searrow 0} \epsilon_1 W_{0303}^{\epsilon_1}(x, y), \quad (2.35c)$$

ergeben für die Spiegelladungs-Koeffizienten  $A$  und  $B$  dieselben Lösungen wie in der Elektrostatik

$$A = -\frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_2 + \epsilon_1}, \quad (2.36a)$$

$$B = \frac{2\epsilon_2}{\epsilon_2 + \epsilon_1}. \quad (2.36b)$$

Durch die Normalordnung in der Definition des Hamiltonoperators (2.4) fällt der nicht gespiegelte Anteil weg und das Casimir-Polder-Potential ergibt sich zu

$$\begin{aligned} V_{\epsilon_1, 2}^{CP}(d) \\ = -\frac{3\alpha_0(\epsilon_2 - \epsilon_1)}{8d^4\pi(\epsilon_1 + \epsilon_2)}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Für den Fall, dass sich das Atom im Vakuum befindet ( $\epsilon_1 = 1$ ), ergibt sich

$$V_{\epsilon}^{CP}(d) = -\frac{3\alpha_0(\epsilon - 1)}{8d^4\pi(\epsilon + 1)}. \quad (2.38)$$

Auch das CP-Potential unter Anwesenheit statischer Dielektrika ist proportional zu  $\hbar c$ :

$$V_{\epsilon}^{CP}(d) = -\frac{3\alpha_0\hbar c(\epsilon - 1)}{8d^4\pi(\epsilon + 1)}. \quad (2.39)$$

Da auch die temperaturabhängige 2-Punkt-Funktion nur von der Differenzvariablen abhängt, erhalten wir analog das CP-Potential bei der inversen Temperatur  $\beta$  in Anwesenheit der statischen Dielektrika zu

$$V_{\epsilon_1, 2}^{CP, \beta}(d) = -\frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_2 + \epsilon_1} \frac{\alpha_0\hbar c \left( \coth\left(\frac{2d\pi}{\beta\hbar c}\right) \hbar^2 c^2 \beta^2 + 2d\pi \left[ \hbar c \beta + 2d\pi \coth\left(\frac{2d\pi}{\beta\hbar c}\right) \right] \sinh\left(\frac{2d\pi}{\beta\hbar c}\right)^{-2} \right)}{4d^3(\hbar c)^3 \beta^3}. \quad (2.40)$$

Für hohe Temperaturen bekommen wir näherungsweise

$$V_{\epsilon}^{CP}(d) = -\frac{\alpha_0 kT(\epsilon_2 - \epsilon_1)}{4d^3\pi(\epsilon_2 + \epsilon_1)}. \quad (2.41)$$

Befindet sich das Atom im Vakuum gegenüber eines Mediums der Dielektrizität  $\epsilon$ , so erhalten wir

$$V_{\epsilon}^{CP}(d) = -\frac{\alpha_0 kT(\epsilon - 1)}{4d^3\pi(\epsilon + 1)}. \quad (2.42)$$

Dieses Ergebnis stimmt mit Formel (20) aus [37] überein. Außerdem erhalten wir im Limes  $\epsilon \rightarrow \infty$  des idealen Leiter (2.22) zurück. Die direkte Berechnung der CP-Kraft bei Anwesenheit statischer Dielektrika wurde hier meines Wissens zum ersten Mal beschrieben. Interessanterweise stimmt nur der Hochtemperatur-Limes mit der Literatur überein, in welcher der statische Fall als Grenzfall einer allgemeineren Theorie berechnet wird und von uns in Abschnitt 4.2 betrachtet wird. Die Ergebnisse unterscheiden sich um eine Funktion  $f(\epsilon)$ , welche Werte zwischen 0.76 und 1 annimmt. Wir konnten im Rahmen dieser Diplomarbeit nicht klären, welcher Ansatz näher an der physikalischen Wirklichkeit ist. Wir vermuten jedoch, dass der in Abschnitt 4.2 beschriebene Ansatz auf Grund der realistischeren Beschreibung des dielektrischen Mediums näher an der Wirklichkeit liegt als der hier berechnete. Da sich aber beispielsweise für ein Atom vor einer Silizium-Wand die Ergebnisse um 20% unterscheiden, kann ein Experiment bei heutiger Messgenauigkeit von unter 1% diesen Sachverhalt klären.

Nachdem wir nun das CP-Potential für endliche Temperaturen und im Falle elektrostatisch beschriebener Medien berechnet haben, möchten wir zum Abschluss dieses Kapitels die eingeführte Methode verwenden, um auch die Casimir-Kraft bei endlicher Temperatur auszurechnen.

## 2.4 Die Casimir-Kraft

Die Casimir-Kraft beschreibt die Anziehung zwischen zwei idealen Leitern und soll hier nach [18] berechnet werden. Wir gehen abermals davon aus, dass die auf Grund der Randbedingungen an das Vakuumfeld nicht verschwindende Feldenergie zwischen den Leiterplatten als Potential einer Kraft interpretiert werden kann. Wie auch bei dem CP-Potential berechnen wir die Feldenergie über die 2-Punkt-Funktion des elektromagnetischen Feldstärketensors (2.5). Die ideal leitenden Platten seien in der X-Y-Ebene bei  $x^3 = 0$  und  $x^3 = a$  positioniert. Die Randbedingungen lauten dann

$$\lim_{x^3 \vee y^3 \rightarrow 0 \vee a} W_{0101}(x, y) = \lim_{x^3 \vee y^3 \rightarrow 0 \vee a} W_{0202}(x, y) = \lim_{x^3 \vee y^3 \rightarrow 0 \vee a} W_{1212}(x, y) = 0, \quad (2.43)$$

$$\lim_{x^3 \vee y^3 \rightarrow 0 \vee a} \partial_3 W_{0303}(x, y) = \lim_{x^3 \vee y^3 \rightarrow 0 \vee a} \partial_3 W_{1313}(x, y) = \lim_{x^3 \vee y^3 \rightarrow 0 \vee a} \partial_3 W_{2323}(x, y) = 0. \quad (2.44)$$

Das Randwertproblem können wir in der Elektrodynamik lösen, indem wir Spiegelladungen an den durch die Spiegelungen an den Platten erzeugten Punkten hinzunehmen (siehe z.B. [18] oder [9]).  $G$  sei die Gruppe dieser Spiegelungen

$$G = \{g_{\pm}^n \forall n \in \mathbb{Z} \mid g_{\pm}^n(x^0, x^1, x^2, x^3)^t = (x^0, x^1, x^2, \pm x^3 + 2na)^t\}, \quad (2.45)$$

mit  $\text{sign}(g_{\pm}^n) = \pm 1$ . Wir machen nun für die, die Randbedingungen erfüllenden 2-Punkt-Funktion, den Ansatz

$$\langle F_{01}(x)F_{01}(y) \rangle = (-\partial_0^2 + \partial_1^2) \sum_{S \in G} \text{sign}(S) D_+(x - Sy), \quad (2.46)$$

$$\langle F_{02}(x)F_{02}(y) \rangle = (-\partial_0^2 + \partial_2^2) \sum_{S \in G} \text{sign}(S) D_+(x - Sy), \quad (2.47)$$

$$\langle F_{12}(x)F_{12}(y) \rangle = (-\partial_0^2 - \partial_2^2) \sum_{S \in G} \text{sign}(S) D_+(x - Sy), \quad (2.48)$$

$$\langle F_{03}(x)F_{03}(y) \rangle = (-\partial_0^2 + \partial_3^2) \sum_{S \in G} D_+(x - Sy), \quad (2.49)$$

$$\langle F_{13}(x)F_{13}(y) \rangle = (-\partial_1^2 + \partial_3^2) \sum_{S \in G} D_+(x - Sy), \quad (2.50)$$

$$\langle F_{23}(x)F_{23}(y) \rangle = (-\partial_2^2 + \partial_3^2) \sum_{S \in G} D_+(x - Sy). \quad (2.51)$$

Durch die Normalordnung müssen wir den Term des Einheitselements der Spiegelungen abziehen. Nutzen wir nun noch aus, dass  $D_+(x)$  eine Lösung der Wellengleichung ist und summieren die 2-Punkt-Funktion auf, fallen die Ausdrücke der  $g_{\pm}^n$ -Spiegelungen weg und wir erhalten

$$\begin{aligned} \langle w_C(x) \rangle &= \langle \frac{1}{2} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) \rangle \\ &= -4 \sum_{n=1}^{\infty} (\partial_0^2 D_+(0, 0, 0, 2na)) \\ &= -4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^5 \pi^2 a^4 n^4} \\ &= -\frac{1}{2^3 \pi^2 a^4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} \\ &= -\frac{1}{2^3 \pi^2 a^4} \zeta(4) \\ &= -\frac{1}{2^3 \pi^2 a^4} \frac{\pi^4}{90} \\ &= -\frac{\pi^2}{720 a^4}. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Die Kraft pro Fläche ist dann

$$f_A(x) = -\frac{\pi^2}{240 a^4}. \quad (2.53)$$

Da wir außerhalb der Platten einen Erwartungswert der Energiedichte von 0 haben, ziehen sich die Platten an. Die Casimir-Kraft ist also proportional zu den fundamentalen Konstanten  $\hbar$  und  $c$

$$f_A(x) = -\frac{\pi^2 \hbar c}{240 a^4}. \quad (2.54)$$

Berechnen wir nun, auf dem gleichen Wege wie oben, die Casimir-Kraft zwischen zwei Leitern bei endlicher Temperatur, erhalten wir unter Benutzung der temperaturabhängigen 2-Punkt-Funktion (2.17)

$$\begin{aligned} F(a) &= -12 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\pi \coth\left(\frac{2an\pi}{\beta}\right) \sinh^{-2}\left(\frac{2an\pi}{\beta}\right)}{4an\beta^3} \\ &= -12 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\pi \cosh\left(\frac{2an\pi}{\beta}\right)}{4an\beta^3 \sinh^3\left(\frac{2an\pi}{\beta}\right)}, \end{aligned} \quad (2.55)$$

wobei wir die Konstante, welche wir durch die Normalordnung zur endlichen Temperatur bekommen haben, gleich weggelassen haben. Das Ergebnis stimmt mit dem, über Bose-Verteilte Modensummen berechneten Ergebnis aus [39] überein.

Im Falle von  $T = 0$  erhalten wir

$$F(a) = -\frac{\pi^2}{240a^4} \quad (2.56)$$

zurück. Dies lässt sich wie folgt einsehen

$$\begin{aligned} &\lim_{\beta \rightarrow \infty} -12 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\pi \cosh\left(\frac{2an\pi}{\beta}\right)}{4an\beta^3 \sinh^3\left(\frac{2an\pi}{\beta}\right)} \quad (2.57) \\ &= -12 \sum_{n=1}^{\infty} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\left(e^{-\frac{2an\pi}{\beta}} + e^{\frac{2an\pi}{\beta}}\right) \pi}{a \left(-e^{-\frac{2an\pi}{\beta}} + e^{\frac{2an\pi}{\beta}}\right)^3 n\beta^3} \\ &= -12 \sum_{n=1}^{\infty} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{e^{\frac{4an\pi}{\beta}} \left(1 + e^{\frac{4an\pi}{\beta}}\right) \pi}{a \left(-1 + e^{\frac{4an\pi}{\beta}}\right)^3 n\beta^3} \\ &\approx -12 \sum_{n=1}^{\infty} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\left(\frac{4a\pi n}{\beta} + 1\right) \left(\frac{4a\pi n}{\beta} + 2\right)}{64a^4 n^4 \pi^2} \\ &= -12 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{32a^4 n^4 \pi^2} \\ &= -\frac{\pi^2}{240a^4}, \end{aligned} \quad (2.58)$$

wobei wir nach Anhang D die Summe und den Limes in der zweiten Zeile vertauschen dürfen. Dies ist das Ergebnis, welches Casimir bereits 1948 berechnete [12].

### 3 Quantenfeldtheorie in dielektrischen Medien

Bisher haben wir das CP-Potential für sehr stark idealisierte Systeme berechnet. Wir haben angenommen, dass sich ein Atom vor einer ideal leitenden Platte oder an der Grenzfläche zweier statischer Dielektrika befindet. Auch wenn wir dies bereits für endliche Temperaturen ausrechnen konnten, möchten wir nun experimentnähere Anordnungen berechnen. Dazu bleiben wir zwar bei der statischen Anordnung "Atom an einer Grenzfläche", gehen jedoch davon aus, dass die Grenzfläche aus zwei frequenzabhängigen, absorbierenden dielektrischen Medien besteht.

Die phänomenologische Herangehensweise, das direkte Übertragen der klassischen makroskopischen Formeln in die Quantentheorie, führt, bei nicht vernachlässigter Dispersion, zu nicht lokalen Ausdrücken [4], welche die Kausalität verletzen. Huttner und Barnett [4] quantisierten erstmals ein Modell, welches ein homogenes absorbierendes Dielektrikum mit Dispersion beschreiben kann. Dazu gehen sie von einem Ein-Oszillator-Modell der Polarisation des Mediums und einer Familie von Oszillator-Feldern zur Beschreibung der Absorption aus und quantisieren die entsprechende Lagrangefunktion kanonisch. Die dielektrische Funktion des Modells erfüllt die Kramers-Kronig-Relationen und die Felder die Maxwell-Gleichungen in Dielektrika. Eine auf dem Modell von Huttner und Barnett beruhende phänomenologische Quantisierung inhomogener Dielektrika veröffentlichten Gruner und Welsch (unter anderem in [51] oder [24]). Mit Hilfe dieser phänomenologischen Quantisierung konnten Sie die Casimir- und CP-Kraft an einer dielektrischen Grenzschicht berechnen (unter anderem [10], [26] oder [11]). Das phänomenologische Modell von Welsch lässt sich auf nichtlineare [41], anisotrope und verstärkende [24] Medien erweitern, es ist jedoch nicht von vornherein klar, dass das Modell kausal ist und die Felder die Vertauschungsrelationen der Quantenelektrodynamik erfüllen. Für die gleichzeitige Vertauschungsrelationen lässt sich dies jedoch zeigen [40]. Im Jahre 2004 gelang es Suttorp und van Wonderen [44] eine Hamiltonfunktion anzugeben, deren kanonische Quantisierung die Ergebnisse des phänomenologischen Modells von Welsch wiedergibt. Das Modell erfüllt nach Definition die richtigen gleichzeitigen Vertauschungsrelationen und die Bewegungsgleichungen der Felder sind die Maxwell-Gleichungen in Dielektrika. Die dielektrische Funktion des Modells erfüllt die Kramers-Kronig-Relationen und hängt nur von den Kopplungskonstanten der Lagrange-Funktion ab. Die Diagonalisierung des Hamiltonoperators, welche im Gegensatz zu dem Fall homogener Medien [4] im Ortsraum ausgeführt wird und sehr übersichtlich ist, führt auf elementare Anregungen des elektrischen Feldes und der das Medium beschreibenden Felder, welche wir aus der Festkörperphysik als Polaritonen kennen. Das Modell lässt sich ebenfalls auf anisotrope und magnetische Medien erweitern ([43] und [2]).

Im Folgendem werden wir das Modell von Suttorp und van Wonderen beschreiben (dabei werden wir uns sehr eng an [44] halten), dann die zeitabhängigen Vertauschungsrelationen diskutieren und anschließend an einem Beispiel aufzeigen, wie wir die Absorption, die das Modell beschreibt, verstehen können.

### 3.1 Kanonische Quantisierung eines Oszillator-Modells für absorbierende inhomogene dispersive Medien

Zur Berechnung der CP-Kraft an einem dielektrischen Interface benötigen wir eine Formulierung der Quantenelektrodynamik in dielektrischen Medien in Abwesenheit von geladenen Teilchen<sup>5</sup>. Das Medium werden wir durch ein die Polarisation beschreibendes Feld  $\mathbf{X}(\mathbf{r}, t)$  und durch ein die Absorption beschreibendes Reservoir, welches durch eine Einparameter-Familie von harmonischen Oszillatoren  $\mathbf{Y}_\omega$  mit positiven Eigenfrequenzen simuliert wird, beschreiben. Das elektrische Feld koppelt durch minimale Kopplung, mit der Kopplungskonstante  $\alpha(\mathbf{r}) > 0$ , an das Polarisationsfeld, welches wiederum durch minimale Kopplung ( $\nu_\omega(\mathbf{r}) > 0$ ) an die Familie von harmonischen Oszillatoren koppelt. Die Lagrangedichte, die das Modell definiert, lautet

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{em}} + \mathcal{L}_{\text{Materie}} + \mathcal{L}_{\text{Reservoir}} + \mathcal{L}_{\text{ww}}, \quad (3.1)$$

mit

$$\mathcal{L}_{\text{em}} = \frac{\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)^2}{2} - \frac{\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)^2}{2}, \quad (3.2)$$

$$\mathcal{L}_{\text{Materie}} = \frac{\rho(\mathbf{r})}{2} \dot{\mathbf{X}}(\mathbf{r}, t)^2 - \frac{\rho(\mathbf{r})\omega_0^2}{2} \mathbf{X}(\mathbf{r}, t)^2, \quad (3.3)$$

$$\mathcal{L}_{\text{Reservoir}} = \int_0^\infty d\omega \left( \frac{\rho(\mathbf{r})}{2} \dot{\mathbf{Y}}_\omega(\mathbf{r}, t)^2 - \frac{\rho(\mathbf{r})\omega^2}{2} \mathbf{Y}_\omega(\mathbf{r}, t) \right), \quad (3.4)$$

$$\mathcal{L}_{\text{ww}} = -\alpha(\mathbf{r}) (\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{X}}) - \int_0^\infty d\omega \nu_\omega(\mathbf{r}) \mathbf{X} \cdot \dot{\mathbf{Y}}_\omega. \quad (3.5)$$

Schreiben wir das elektrische Feld in Coulomb-Eichung<sup>6</sup> und führen das Vektorpotential  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  ein, erhalten wir

$$\mathcal{L}_{\text{em}} = \frac{\dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)^2}{2} + (\alpha(\mathbf{r})\mathbf{X}(\mathbf{r}, t))_\parallel^2 - \frac{\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)^2}{2}, \quad (3.6)$$

mit dem in Transversal- und Longitudinalanteil zerlegten elektrischen Feld

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\partial_t \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + (\alpha(\mathbf{r})\mathbf{X}(\mathbf{r}, t))_\parallel. \quad (3.7)$$

Die kanonisch konjugierten Impulse zu den kanonischen Variablen  $\mathbf{A}, \mathbf{X}, \mathbf{Y}_\omega$  ergeben sich zu

$$\mathbf{\Pi}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{A}}} = \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t), \quad (3.8)$$

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{X}}} = \rho(\mathbf{r})\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{r}, t) - \alpha(\mathbf{r})\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad (3.9)$$

$$\mathbf{Q}_\omega(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{Y}}_\omega} = \rho(\mathbf{r})\dot{\mathbf{Y}}_\omega(\mathbf{r}, t) - \nu_\omega(\mathbf{r})\mathbf{X}(\mathbf{r}, t). \quad (3.10)$$

<sup>5</sup>Da wir keine Wechselwirkung zwischen geladenen Teilchen beschreiben möchten, ist es nicht nötig eine Spinor-Quantenelektrodynamik zu quantisieren.

<sup>6</sup>Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass die Quantisierung der Elektrodynamik in Coulomb-Eichung zu Problemen mit der Kovarianz der Theorie führen kann [6], dies soll hier jedoch nicht weiter behandelt werden.



Auf Grund der Coulomb-Eichung müssen wir bei den Funktionalableitungen die durch diese Eichung gegebene Zwangsbedingung beachten, dies führt dazu, dass auch  $\mathbf{\Pi}(\mathbf{r}, t)$  rein transversal ist. Legendre-Transformation des Systems und Integration über den gesamten Raum liefert die Hamiltonfunktion

$$\begin{aligned}
 H &= \int d^3\mathbf{r} \left[ \mathbf{\Pi}(\mathbf{r}, t) \dot{\mathbf{A}} + P(\mathbf{r}, t) \dot{\mathbf{X}} + \int d\omega Q_\omega(\mathbf{r}, t) \dot{\mathbf{Y}}_\omega - \mathcal{L}(\mathbf{A}, \mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{\Pi}, \mathbf{P}, \mathbf{Q}_\omega) \right] \\
 &= \int d^3\mathbf{r} \left[ \frac{\mathbf{\Pi}(\mathbf{r}, t)^2}{2} + \frac{1}{2} (\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2 + \frac{1}{2\rho(\mathbf{r})} \mathbf{P}(\mathbf{r}, t)^2 + \frac{1}{2} \rho(\mathbf{r}) \tilde{\omega}_0^2 \mathbf{X}(\mathbf{r}, t)^2 \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2\rho(\mathbf{r})} \int_0^\infty d\omega \mathbf{Q}_\omega(\mathbf{r}, t)^2 + \frac{\rho(\mathbf{r})}{2} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \mathbf{Y}_\omega(\mathbf{r}, t)^2 + \frac{\alpha(\mathbf{r})}{2\rho(\mathbf{r})} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \dot{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, t) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\alpha(\mathbf{r})^2}{2\rho(\mathbf{r})} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)^2 + \frac{1}{\rho(\mathbf{r})} \int_0^\infty d\omega \nu_\omega(\mathbf{r}) \mathbf{X}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{Q}_\omega(\mathbf{r}, t) \right] \\
 &\quad + \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \frac{\nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\alpha(\mathbf{r}) \mathbf{X}(\mathbf{r}, t)) \nabla_{\mathbf{r}'} \cdot (\alpha(\mathbf{r}') \mathbf{X}(\mathbf{r}', t))}{2|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \tag{3.11}
 \end{aligned}$$

mit  $\tilde{\omega}_0 = \omega_0^2 + \int_0^\infty d\omega \frac{\nu_\omega}{\rho^2}$ . Wir quantisieren die Hamiltonfunktion kanonisch, dazu fassen wir die Felder als Schrödinger-Operatoren<sup>7</sup> auf und fordern gleichzeitige kanonische Vertauschungsrelationen zwischen den zueinander kanonisch konjugierten Variablen

$$[\mathbf{A}(\mathbf{r}), \mathbf{\Pi}(\mathbf{r}')] = i\hbar \delta_{\text{trans}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = i(\delta - \delta_L)(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \tag{3.12}$$

$$[\mathbf{X}(\mathbf{r}), \mathbf{P}(\mathbf{r}')] = i\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{1}, \tag{3.13}$$

$$[\mathbf{Y}_\omega(\mathbf{r}), \mathbf{Q}_{\omega'}(\mathbf{r}')] = i\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\omega - \omega') \mathbf{1}, \tag{3.14}$$

wobei die transversale und die longitudinale Delta-Distribution nach [5] wie folgt definiert sind: Sei

$$\delta(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}, \tag{3.15}$$

dann ist die longitudinale Delta-Distribution ein symmetrisches Tensor-Feld und definiert über

$$(\delta_L)_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k} \frac{k_i k_j}{\mathbf{k}^2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \tag{3.16}$$

und die transversale Delta-Distribution erklärt über

$$(\delta_{\text{trans}})_{ij}(\mathbf{x}) = \delta_{ij} \delta(\mathbf{x}) - (\delta_L)_{ij}(\mathbf{x}). \tag{3.17}$$

Da der Hamiltonoperator quadratisch in den kanonischen Variablen ist, können wir ihn auf Diagonalform bringen, sodass er sich schreiben lässt als

$$H = \int d^3\mathbf{r} \int_0^\infty d\omega \mathbf{C}^*(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{C}(\mathbf{r}, \omega), \tag{3.18}$$

dabei sind  $C^*(\mathbf{r}, t)$  und  $C(\mathbf{r}, t)$  bosonische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Die elementaren Anregungen können wir als neue Quasiteilchen interpretieren. Diese sind in der

<sup>7</sup>Wir müssen die Felder als operatorwertige Distributionen auffassen, da die Auswertung an einem Punkt für die operatorwertigen Felder nicht definiert ist. Dies sollten wir stets bedenken, wollen aber an dieser Stelle auf eine solche Darstellung verzichten.

Festkörperphysik in etwas einfacheren Modellen als Polaritonen bekannt und wurden erstmals in [20] beschrieben. Die Operatoren erfüllen die Standard-Vertauschungsrelationen

$$[\mathbf{C}(\mathbf{r}, \omega), \mathbf{C}^*(\mathbf{r}', \omega')] = \delta(\omega - \omega')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\mathbf{1}, \quad [\mathbf{C}(\mathbf{r}, \omega), \mathbf{C}(\mathbf{r}', \omega')] = 0. \quad (3.19)$$

Die kanonischen Variablen des nicht diagonalisierten Hamiltonoperators sollten alle durch die elementaren Operatoren ausgedrückt werden können

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r}' \int_0^\infty d\omega \left( f_A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)\mathbf{C}(\mathbf{r}', \omega) + \overline{f_A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)}\mathbf{C}^*(\mathbf{r}', \omega) \right). \quad (3.20)$$

Für die anderen Operatoren definieren wir analog die Größen  $f_X, f_Q, f_\Pi, f_P$  und  $f_Y$ . Das elektrische Feld lautet dann in den Polaritonen-Operatoren

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r}' \int_0^\infty d\omega \left( f_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)\mathbf{C}(\mathbf{r}', \omega) + \overline{f_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)}\mathbf{C}^*(\mathbf{r}', \omega) \right), \quad (3.21)$$

mit  $f_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -f_\Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \alpha f_X(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)_{\text{long}}$ . Unter Benutzung der kanonischen Vertauschungsrelationen (3.19) erhalten wir die Polaritonen-Operatoren ausgedrückt durch die kanonischen Operatoren des Hamiltonoperators (3.11)

$$\begin{aligned} \mathbf{C}(\mathbf{r}, \omega) = & -i \int d^3\mathbf{r}' \left[ \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot \overline{f_\Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)} - \mathbf{\Pi}(\mathbf{r}') \cdot \overline{f_A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)} \right. \\ & + \mathbf{X}(\mathbf{r}') \cdot \overline{f_P(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)} - \mathbf{P}(\mathbf{r}') \cdot \overline{f_X(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)} \\ & \left. + \int_0^\infty d\omega' \left[ \mathbf{Y}_\omega(\mathbf{r}') \cdot \overline{f_Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega', \omega)} - \mathbf{Q}_\omega(\mathbf{r}') \cdot \overline{f_Y(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega', \omega)} \right] \right]. \quad (3.22) \end{aligned}$$

Zur Bestimmung der Koeffizienten in (3.20) lösen wir die Eigenwertgleichung

$$[\mathbf{C}(\mathbf{r}, \omega), H] = \omega\mathbf{C}(\mathbf{r}, \omega). \quad (3.23)$$

Das Lösen dieser Eigenwertgleichung wird in der Literatur zur Quantenfeldtheorie in dielektrischen Medien mit Fano-Diagonalisierung bezeichnet, dieser hat das Verfahren erstmals im Zusammenhang mit Polaritonen benutzt [17]. Einsetzen des Hamiltonoperators (3.11) und des Polaritonen-Operators (3.22) liefert durch Koeffizientenvergleich einen Satz an Gleichungen

$$i\omega f_\Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\Delta f_A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \left( \frac{\alpha^2}{\rho} f_A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \right)_{\text{trans}} + \left( \frac{\alpha}{\rho} f_P(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \right)_{\text{trans}}, \quad (3.24a)$$

$$i\omega f_A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -f_\Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega), \quad (3.24b)$$

$$i\omega f_X(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\frac{\alpha}{\rho} f_X(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - \frac{1}{\rho} f_P(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega), \quad (3.24c)$$

$$i\omega f_P(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \rho\tilde{\omega}_0^2 f_X(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \alpha \left( \alpha f_X(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \right)_{\text{long}} + \frac{1}{\rho} \int d\omega' \nu_{\omega'} f_Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega', \omega), \quad (3.24d)$$

$$i\omega f_Y(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega', \omega) = -\frac{1}{\rho} \nu_{\omega'} f_X(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega', \omega) - \frac{1}{\rho} f_Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega', \omega), \quad (3.24e)$$

$$i\omega f_Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega', \omega) = \rho\omega'^2 f_Y(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega', \omega), \quad (3.24f)$$

wobei wir, um die Notation zu vereinfachen, die Ortsabhängigkeit der Kopplungskonstanten nicht mehr explizit mitgeschrieben haben. Die erste Gleichung in (3.24) ist eine elliptische

Differentialgleichung zweiter Ordnung, die anderen Gleichungen sind rein algebraisch. Lösen wir nun zunächst die Algebraischen. Eliminieren wir in Gleichung (3.24e)  $f_Y$  mit Hilfe von (3.24f) erhalten wir

$$(\omega^2 - \omega'^2) f_Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega', \omega) = \omega'^2 \nu_{\omega'} f_X(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega). \quad (3.25)$$

Damit haben wir  $f_Q$  bis auf an der Stelle  $\omega = \omega'$  durch  $f_X$  ausdrücken können

$$f_Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega', \omega) = \frac{\omega'^2 \nu_{\omega'}}{(\omega + i \cdot 0)^2 - \omega'^2} f_X(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \delta(\omega - \omega'), \quad (3.26)$$

mit einen noch unbestimmten Tensor  $s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ . Setzen wir nun (3.26) in (3.24d) ein und eliminieren  $f_P$  und  $f_A$  mit Hilfe von (3.24b) und (3.24c), erhalten wir

$$\begin{aligned} & -\omega^2 \rho f_X(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - \alpha f_{\Pi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \\ & = \rho \tilde{\omega}_0^2 f_X(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \alpha (\alpha f_X(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega))_{\text{long}} \\ & + \frac{1}{\rho} \int d\omega' \nu_{\omega'} \left( \frac{\omega'^2 \nu_{\omega'}}{(\omega + i \cdot 0)^2 - \omega'^2} f_X(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \delta(\omega - \omega') \right). \end{aligned} \quad (3.27)$$

Unter Benutzung der Koeffizienten für das elektrische Feld, erhalten wir eine lineare Beziehung zwischen der Polarisation  $-a\mathbf{X}$  und dem elektrischen Feld  $\mathbf{E}$ , welche uns die Definition der frequenz- und ortsabhängigen dielektrischen Suszeptibilität  $\xi(\mathbf{r}, \omega)$  nahe legt

$$-\alpha f_X(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \xi(\mathbf{r}, \omega) f_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \frac{1}{\rho \alpha} \nu_{\omega} \xi(\mathbf{r}, \omega) s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega), \quad (3.28)$$

mit

$$\xi(\mathbf{r}, \omega) = -\frac{\alpha^2}{\rho} \left[ \omega^2 - \tilde{\omega}_0^2 - \frac{1}{\rho^2} \int d\omega' \frac{\omega'^2 \nu_{\omega'}^2}{(\omega + i \cdot 0)^2 - \omega'^2} \right]^{-1}. \quad (3.29)$$

Wir müssen nun noch die Differentialgleichung (3.24a) lösen und den Tensor  $s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$  bestimmen. Schreiben wir die Differentialgleichung in Abhängigkeit von  $f_{\Pi}$  und  $f_X$ , erhalten wir

$$\Delta f_{\Pi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \omega^2 f_{\Pi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\omega^2 (\alpha f_X(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega))_{\text{trans}}. \quad (3.30)$$

Da das Feld  $\mathbf{\Pi}$  rein transversal ist und somit auch der entsprechende Koeffizient, können wir an Stelle von  $\Delta f_{\Pi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$  auch  $-\nabla \times \nabla \times f_{\Pi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$  schreiben. Benutzen wir nun wieder die Definition des Koeffizienten für das elektrische Feld, erhalten wir eine inhomogene Wellengleichung im Frequenzraum

$$-\nabla \times \nabla \times f_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \omega^2 (1 + \xi(\mathbf{r}, \omega)) f_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\frac{\omega^2}{\rho \alpha} \nu_{\omega} \xi(\mathbf{r}, \omega) s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega). \quad (3.31)$$

Diese Gleichung lösen wir im Sinne von Greenschen Funktionen, derart dass für die Greensche Funktion gelte

$$-\nabla \times \nabla \times G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \omega^2 (1 + \xi(\mathbf{r}, \omega)) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \mathbf{1} \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.32)$$

Dann lässt sich  $f_E$  schreiben als

$$f_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\omega^2 \int d^3\mathbf{r}'' \frac{1}{\rho''\alpha''} \nu''_\omega \xi(\mathbf{r}'', \omega) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) s(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega), \quad (3.33)$$

mit  $\rho(\mathbf{r}'') = \rho''$  und analog für die anderen Kopplungen. Bis auf die Bestimmung des Tensors  $s(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega)$  haben wir die Diagonalisierung nun abgeschlossen, die Koeffizienten lauten

$$f_A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\frac{i}{\omega} (f_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega))_{\text{trans}}, \quad (3.34a)$$

$$f_\Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = - (f_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega))_{\text{trans}}, \quad (3.34b)$$

$$f_X(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\frac{1}{\rho\alpha^2} \nu_\omega \xi(\mathbf{r}, \omega) s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - \frac{1}{\alpha} \xi(\mathbf{r}, \omega) f_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega), \quad (3.34c)$$

$$f_P(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\frac{i}{Q^2} \omega \nu_\omega \xi(\mathbf{r}, \omega) s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \frac{i\alpha}{\omega} \xi(\mathbf{r}, \omega) (f_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega))_{\text{trans}} \\ + \frac{i\rho}{\alpha} \omega \xi(\mathbf{r}, \omega) f_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega), \quad (3.34d)$$

$$f_Y(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{i}{\rho\omega} s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \delta(\omega - \omega') - \frac{i}{\rho^2\alpha^2} \frac{\omega\nu_\omega\nu_{\omega'}}{(\omega + i0)^2 - \omega'^2} \xi(\mathbf{r}, \omega) s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \\ - \frac{i}{\rho\alpha} \frac{\omega\nu_{\omega'}}{(\omega + i0)^2 - \omega'^2} \xi(\mathbf{r}, \omega) f_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega), \quad (3.34e)$$

$$f_Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -i\rho \frac{\omega'^2}{\omega} f_Y(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega'), \quad (3.34f)$$

wobei für  $f_E$  (3.33) einzusetzen ist. Zur Bestimmung von  $s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$  benutzen wir die nicht triviale Vertauschungsrelation aus (3.19), welche uns die Bedingung

$$\int d^3\mathbf{r}'' \left[ f_A^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega) f_\Pi(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega') - f_\Pi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega) f_A(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega') \right. \\ \left. + f_X^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega) f_P(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega') - f_P^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega) f_X(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega') \right. \\ \left. + \int_0^\infty d\omega'' [f_Y^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega'', \omega) f_Q(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega'', \omega') - f_Q^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega'', \omega) f_Y(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega'', \omega')] \right] \\ = -i\delta(\omega - \omega') \mathbf{1} \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.35)$$

liefert. Setzen wir die Ausdrücke aus (3.34) ein und benutzen die Definition der dielektrischen Suszeptibilität, vereinfacht sich die rechte Seite der obigen Bedingung zu einem Term der proportional zu

$$\int d^3\mathbf{r}'' [(\nabla'' \times \nabla'' \times f_E^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega')) f_E(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega') - f_E^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega) (\nabla'' \times \nabla'' \times f_E(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega'))] \quad (3.36)$$

ist. Die Koeffizienten  $f_E$  werden in (3.33) als Integral über die Greensche Funktion dargestellt. Diese sollte im räumlich unendlichen abfallen<sup>8</sup>, so dass der Ausdruck (3.36) Null wird, wie man

<sup>8</sup>Es ist mir, in dem diesem Abschnitt zu Grunde liegenden Paper, nicht klar geworden, ob dieser Ausdruck wirklich verschwindet. Führen wir jedoch die ortsabhängigen Kopplungskonstanten als Funktionen mit kompakten Träger ein (das wäre dann eine Beschreibung eines endlichen Mediums) ist zumindest ersichtlich, dass das elektrische Feld außerhalb des kompakten Gebietes das freie elektrische Feld ist (vergleiche [51], dort wird betrachtet, wie sich das elektrische Feld nach (3.40) unter verschwindender Absorption verhält). Dies bedeutet aber keinesfalls, dass  $f_E$  im räumlich unendlichen verschwinden muss.

durch partielle Integration sehen kann. Der einzige Term, der nicht verschwindet, lautet

$$-\frac{2i}{\omega}\delta(\omega - \omega') \int d^3\mathbf{r}'' \frac{1}{\rho''} s^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega) s(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega). \quad (3.37)$$

Wir erhalten also als Bedingung an  $s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$

$$\int d^3\mathbf{r}'' \frac{1}{\rho''} s^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega) s(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega) = \frac{\omega}{2} \mathbf{1} \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.38)$$

$s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$  ist also proportional zu einer unitären Matrix

$$s(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \sqrt{\frac{\omega\rho}{2}} U(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \omega). \quad (3.39)$$

Setzen wir die so gewonnen Koeffizienten in (3.22) ein, sehen wir, dass die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren der Polaritonen bis auf eine unitäre Transformation, welche den Hamiltonoperator invariant lässt, bestimmt sind. Wählen wir  $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = i \frac{\xi(\mathbf{r}, \omega)}{|\xi(\mathbf{r}, \omega)|} \mathbf{1} \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , so erhalten wir den Heisenbergoperator des elektrischen Feldes zu

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -i \int d^3\mathbf{r}' \int d\omega \omega e^{-i\omega t} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathbf{J}(\mathbf{r}', \omega) + i \int d^3\mathbf{r}' \int d\omega \omega e^{i\omega t} \overline{G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)} \mathbf{J}^*(\mathbf{r}', \omega), \quad (3.40)$$

mit dem Stromdichte-Operator

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) = \sqrt{\frac{\mathbf{Im}\xi(\mathbf{r}, \omega)}{\pi}} \omega \mathbf{C}(\mathbf{r}, \omega). \quad (3.41)$$

Auf den ersten Blick sieht Gleichung (3.40) so aus, als ob für  $\mathbf{J} \rightarrow 0$  auch das elektrische Feld gegen Null strebt, dies ist jedoch nicht der Fall. Das elektrische Feld geht dann wie erwartet gegen das freie elektrische Feld [51].

Betrachten wir an dieser Stelle noch einmal die eingeführte Suszeptibilität

$$\xi(\mathbf{r}, \omega) = -\frac{\alpha^2}{\rho} \left[ \omega^2 - \tilde{\omega}_0^2 - \frac{1}{\rho^2} \int d\omega' \frac{\omega'^2 \nu_{\omega'}^2}{(\omega + i0)^2 - \omega'^2} \right]^{-1}. \quad (3.42)$$

Nehmen wir an, dass die Kopplungsfunktion  $\nu(\omega)$  analytisch ist und im unendlichen schnell genug abfällt, können wir das Integral mit Hilfe des Residuensatzes lösen. Wir erhalten dann für die dielektrische Suszeptibilität

$$\xi(\mathbf{r}, \omega) = \frac{\alpha^2}{\rho} \frac{1}{\tilde{\omega}_0^2 - \omega^2 - i\frac{\pi}{\rho} \nu(\omega)}, \quad (3.43)$$

dies ist die dielektrische Suszeptibilität des 1-Oszillator-Modells, wie sie beispielsweise in [22] klassisch berechnet wird. Es gelten die Kramers-Kronig-Relationen (G.35), ohne dass diese a priori vorausgesetzt wurden. Das Modell lässt sich durch weitere Polarisierungen zu anderen Resonanzfrequenzen  $\tilde{\omega}_0$  leicht auf ein N-Oszillator-Modell erweitern. Für dielektrische Funktionen, welche sich nicht im Rahmen dieses Modells beschreiben lassen, müssen wir phänomenologisch quantisieren, in dem wir den Strom a priori einführen oder eine geeignete Lagrangedichte finden. Eine Erweiterung des Modells auf magnetische und anisotrope Medien wird in ([43] und [2]) beschrieben.

### 3.2 Zeitabhängige Vertauschungs-Relation

Wir möchten an dieser Stelle auf die Kausalität der soeben quantisierten Theorie eingehen und dazu die zeitabhängige Vertauschungsrelation des elektrischen Feldes bestimmen. Dazu brauchen wir zunächst eine Eigenschaft der Greenschen Funktion der Wellengleichung (3.32), welche uns auch später noch nützlich sein wird. Multiplizieren wir die Gleichung (3.32) mit  $\overline{G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega)}$ , integrieren über  $\mathbf{r}'$  und integrieren den Term mit der Rotation partiell, wobei wir verwenden, dass die Greensche Funktion auf Grund der Absorption im räumlich unendlichen verschwindet, folgt

$$\begin{aligned} & \omega^2 \int d^3 \mathbf{r}' (1 + \xi(\mathbf{r}, \omega)) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \overline{G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega)} \\ & = \int d^3 \mathbf{r}' \nabla \times G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \nabla \times \overline{G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega)} + \overline{G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}, \omega)}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Ziehen wir von dieser Gleichung die komplex konjugierte Gleichung mit vertauschtem  $\mathbf{r}, \mathbf{r}''$  ab, erhalten wir die Integral-Gleichung

$$\int d^3 \mathbf{r}' \omega^2 \mathbf{Im} \epsilon(\mathbf{r}', \omega) G_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \overline{G_{jk}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega)} = \mathbf{Im} G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega). \quad (3.45)$$

Ausgehend von dieser Relation können wir die zeitabhängige Vertauschungsrelation des elektrischen Feldes bestimmen. Wir gehen dazu von der Darstellung (3.40) des elektrischen Feldes aus, benutzen die kanonischen Vertauschungsrelationen für die Polaritonen-Operatoren (3.19) und die oben bewiesene Integral-Gleichung (3.45)

$$[E_i(\mathbf{x}, t), E_j(\mathbf{y}, t')] = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \mathbf{Im} G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega) \sin(-\omega(t - t')). \quad (3.46)$$

Konsistenterweise erhalten wir die zeitabhängigen Vertauschungs-Relation des elektrischen Feldes (siehe z.B. [18] oder [48]) zurück, wenn wir für die Greensche Funktion die des Vakuums einsetzen. Eine weitere fundamentale Größe einer quantisierten Theorie ist die 2-Punkt-Funktion, diese möchten wir im nächsten Abschnitt berechnen.

### 3.3 Die 2-Punkt-Funktion des elektrischen Feldes in dielektrischer Materie

Wir haben im ersten Abschnitt gesehen, dass sich die Berechnung der CP-Kraft im Wesentlichen auf die Berechnung der 2-Punkt-Funktion des elektrischen Feldes zurückführen lässt, daher möchten wir nun die 2-Punkt-Funktion des elektrischen Feldes in dielektrischer Materie berechnen. Dazu werten wir das Quadrat des elektrischen Feldes (3.40) auf dem Fock-Raum-Vakuum aus, auf dem die Polaritonen-Operatoren  $C^*(\mathbf{r}, t)$  und  $C(\mathbf{r}, t)$  die Erzeugungs- und

Vernichtungsoperatoren sind.

$$\begin{aligned}
W_{ij}^\epsilon(x, y) &= (\Omega, E_i(\mathbf{x}, t) E_j(\mathbf{y}, t') \Omega) \\
&= \int d\omega \int d\omega' \left( \Omega, \left( \frac{-i}{\sqrt{\pi}} \omega^2 \int d^3\mathbf{r} e^{-i\omega t} \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega)} G_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \omega) C_k(\mathbf{r}, \omega) + h.c. \right) \right. \\
&\quad \left. \left( \frac{i}{\sqrt{\pi}} \omega'^2 \int d^3\mathbf{r}' e^{-i\omega' t'} \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}', \omega')} G_{jl}(\mathbf{y}, \mathbf{r}', \omega') C_l(\mathbf{r}', \omega') + h.c. \right) \Omega \right) \\
&= \int d\omega \int d\omega' e^{-i\omega t} e^{i\omega' t'} \frac{1}{\pi} \omega^2 \int d^3\mathbf{r} \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega)} G_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \omega) \omega'^2 \\
&\quad \int d^3\mathbf{r}' \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}', \omega')} \cdot \overline{G_{jl}(\mathbf{y}, \mathbf{r}', \omega')} (\Omega, C_k(\mathbf{r}, \omega) C_l^*(\mathbf{r}', \omega') \Omega) \\
&= \int d\omega \int d\omega' e^{-i\omega t} e^{i\omega' t'} \frac{1}{\pi} \omega^2 \int d^3\mathbf{r} \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega)} G_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \omega) \omega'^2 \\
&\quad \int d^3\mathbf{r}' \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}', \omega')} \cdot \overline{G_{jl}(\mathbf{y}, \mathbf{r}', \omega')} (\Omega, [C_k(\mathbf{r}, \omega), C_l^*(\mathbf{r}', \omega')] \Omega) \\
&= \int d\omega \int d\omega' e^{-i\omega t} e^{i\omega' t'} \frac{1}{\pi} \omega^2 \int d^3\mathbf{r} \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega)} G_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \omega) \omega'^2 \\
&\quad \int d^3\mathbf{r}' \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}', \omega')} \cdot \overline{G_{jl}(\mathbf{y}, \mathbf{r}', \omega')} \delta_{kl} \delta(\omega - \omega') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\
&= \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} \frac{1}{\pi} \omega^2 \int d^3\mathbf{r} \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega)} G_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \omega) \omega^2 \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega)} \cdot \overline{G_{jk}(\mathbf{y}, \mathbf{r}, \omega)} \\
&= \int d\omega \frac{\omega^2}{\pi} \mathbf{Im} G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega) e^{-i\omega(t-t')} \tag{3.47}
\end{aligned}$$

$$= \hbar \int d\omega \frac{\omega^2}{\pi} \mathbf{Im} G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega) e^{-i\omega(t-t')}, \tag{3.48}$$

wobei wir im vorletzten Schritt die Integral-Gleichung (3.45) benutzt haben. Die 2-Punkt-Funktion entspricht korrekterweise dem negativen Frequenzanteil der Kommutator-Funktion.

### 3.4 Absorption elektromagnetischer Strahlung im 1-Oszillator-Modell

Durch die oben beschriebene kanonische Quantisierung haben wir eine Quantenelektrodynamik in absorbierenden, inhomogenen und dispersiven Dielektrika formuliert, welche unter sehr allgemeinen Voraussetzungen kausale Vertauschungsrelationen besitzt. Wir möchten uns in diesem Abschnitt die Absorption, die das Modell beschreibt, anhand eines einfachen Beispiels verdeutlichen. Das Beispiel ist angelehnt an ein Beispiel zur Absorption aus [51], welches jedoch auf einem phänomenologischen Modell aufbaut. In der klassischen Elektrodynamik interpretieren wir den Imaginärteil der dielektrischen Funktion als Faktor, welcher für die Absorption der Strahlung sorgt [22]. Das oben beschriebene Modell sollte mit dieser Interpretation konsistent sein. Betrachten wir zur Veranschaulichung das Vektorpotential, welches sich um einen Faktor  $\frac{1}{-i\omega}$  von (3.40) unterscheidet, in einer Dimension im Schrödinger-Bild

$$\begin{aligned}
A(x) &= \sqrt{\frac{1}{\pi F}} \int_0^\infty d\omega \int dx' \omega \sqrt{\mathbf{Im}\xi(x', \omega)} G(x, x', \omega) C(x', \omega) + h.c. \\
&= \sqrt{\frac{1}{\pi F}} \int_0^\infty d\omega \int dx' \omega \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(x', \omega)} G(x, x', \omega) C(x', \omega) + h.c., \tag{3.49}
\end{aligned}$$

mit der Normierungsfläche  $F$  (siehe z.B. [4]) und  $\xi(x', \omega) - 1 = \epsilon(x', \omega)$ . Als Beispiel wählen wir nun die Ausbreitung der elektromagnetischen Strahlung in einem homogenen Medium. Die Greensche Funktion ist dann die, welche die eindimensionale Wellengleichung

$$-\partial_x^2 G(x, x', \omega) - \omega^2 \epsilon(\omega) G(x, x', \omega) = \delta(x, x') \quad (3.50)$$

löst. Die Greensche Funktion soll die Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingungen (siehe Anhang F.1) erfüllen und ist damit eindeutig bestimmt

$$G(x, x', \omega) = -\frac{1}{2i\omega\sqrt{\epsilon(\omega)}} e^{i\omega n(\omega)|x-x'|}. \quad (3.51)$$

Definieren wir nun die Operatoren

$$a_{\pm}(x, \omega) = i\sqrt{2\omega n_I(\omega)} e^{\mp\omega x} \int_{\text{Prüfe das Vorzeichen}-\infty}^{\pm x} dx' e^{-in(\omega)x'} C(\pm x', \omega), \quad (3.52)$$

mit  $n(\omega) = \sqrt{\epsilon(\omega)} = n_R(\omega) + in_I(\omega)$ , so können wir das Vektorpotential schreiben als

$$A(x) = \int_0^{\infty} d\omega \left[ \sqrt{\frac{1}{4\pi\omega n_R(\omega)F}} \frac{n_R(\omega)}{n(\omega)} \left( e^{in_R(\omega)\omega x} a_+(x, \omega) + e^{-in_R(\omega)\omega x} a_-(x, \omega) \right) + h.c. \right]. \quad (3.53)$$

Die Operatoren (3.52) erfüllen die Vertauschungs-Relation

$$[a_{\pm}(x, \omega), a_{\pm}^*(x', \omega')] = e^{-n_I(\omega)\omega|x-x'|} \delta(\omega - \omega'). \quad (3.54)$$

Sie beschreiben also gedämpfte Amplituden in  $x$  und  $-x$  Richtung, deren Dämpfung durch den Imaginärteil der dielektrischen Funktion bestimmt ist. Dies sehen wir auch, wenn wir die Änderung der Operatoren im Ort betrachten

$$\partial_x a_{\pm}(x, \omega) = \mp n_I(\omega)\omega a_{\pm}(x, \omega) + F_{\pm}(x, \omega), \quad (3.55)$$

mit  $F_{\pm}(x, \omega) = \pm i\sqrt{2n_I(\omega)\omega} e^{\mp n_R(\omega)\omega x} C(x, \omega)$ . Die Gleichung (3.55) ist das quantenmechanische Analogon zur Beschreibung von sich vorwärts bzw. rückwärts ausbreitenden Wellenamplituden. Nachdem wir nun definiert haben, was wir unter der Quantenelektrodynamik in dielektrischen Medien verstehen wollen, möchten wir uns der Berechnung der CP-Kraft an einem dielektrischen Interface zuwenden.



## 4 Die Casimir-Polder-Kraft in dielektrischen Medien

Nachdem wir im vorigen Kapitel eine quantenfeldtheoretische Beschreibung der makroskopischen Elektrodynamik studiert haben, sind wir nun in der Lage, das CP-Potential an einer dielektrischen Grenzschicht zu berechnen. Dafür gehen wir von folgendem Modell aus:

Ein neutrales Atom der Polarisierbarkeit  $\alpha(\omega)$  befindet sich in einem Halbraum  $V_1$  der Dielektrizität  $\epsilon_1$  im Abstand  $d$  (in  $z$ -Richtung) zum anderen Halbraum  $V_2$  der Dielektrizität  $\epsilon_2$ . Wir berechnen wieder die elektrostatische Energie, der durch das Vakuumfeld induzierten Polarisation des Atoms und interpretieren den ortsabhängigen Teil als Potential. Das Potential berechnet sich dann aus

$$V_{CP}^{\epsilon_1,2} = \left( \Omega, \frac{\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \mathbf{P}(\mathbf{r}, t)}{2} : \Omega \right) \Big|_{\mathbf{r}^t=(0,0,d), t=0}. \quad (4.1)$$

Wir benötigen also die 2-Punkt-Funktion des elektrischen Feldes an dem dielektrischen Interface. Diese bekommen wir aus (3.48), indem wir für die Greensche Funktion die des dielektrischen Randwertproblems einsetzen. Diese Greensche Funktion lautet

$$G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \begin{cases} G_{ij}^\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + R_{ij}^\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) & \text{für } \mathbf{r}, \mathbf{r}' \in V_\alpha, \\ T_{ij}^{\alpha, \alpha'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) & \text{für } \mathbf{r} \in V_\alpha, \mathbf{r}' \in V_{\alpha'}, \end{cases} \quad (4.2)$$

wobei die Reflexions- und Transmissions-Funktionen  $R_{ij}^\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$  und  $T_{ij}^{\alpha, \alpha'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ , sowie die Greensche Funktion  $G_{ij}^\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$  im Anhang F definiert sind. Setzen wir die Greensche Funktion in (4.1) ein, erhalten wir für das CP-Potential

$$\begin{aligned} V_{CP}^{\epsilon_1,2} &= \left( \Omega, \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) : \Omega \right) \Big|_{\mathbf{r}^t=(0,0,d), t=0} \\ &= 2\pi \mathbf{Im} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^2 \alpha(\omega)}{\pi} [G_{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega) + G_{22}(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega) + G_{33}(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega)] \Big|_{\text{Normalordnung}} \\ &= 2\mathbf{Im} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \alpha(\omega) \left( [G_{11}^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega) + G_{22}^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega) + G_{33}^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega)] \right. \\ &\quad \left. + [R_{11}^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega) + R_{22}^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega) + R_{33}^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega)] \right. \\ &\quad \left. - [G_{11}^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega) + G_{22}^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega) + G_{33}^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega)] \right), \end{aligned} \quad (4.3)$$

wobei der letzte Ausdruck (der Anteil der Greenschen Funktion ohne Randbedingungen) auf Grund der Normalordnung subtrahiert wurde. Das CP-Potential ist also durch den Reflexions-Anteil der klassischen Greenschen Funktion bestimmt

$$\begin{aligned} V_{CP}^{\epsilon_1,2} &= 2\mathbf{Im} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \alpha(\omega) [R_{11}^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega) + R_{22}^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega) + R_{33}^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega)] \\ &= 2\mathbf{Im} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \alpha(\omega) \left[ \int \frac{d^2 \mathbf{k}_\parallel}{(2\pi)^2} \sum_{i=1}^3 R_{ii}^1(\mathbf{k}_\parallel, \omega; z, z) \right] \\ &= -2\mathbf{Im} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \alpha(\omega) \left[ \int \frac{dk_\parallel}{2\pi} \frac{ik_\parallel}{2\beta_1} e^{2i\beta_1 z} \left( -r_{12}^p + r_{12}^s + 2 \frac{k_\parallel^2}{q_1^2} r_{12}^p \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Dieses Ergebnis stimmt mit dem Ausdruck überein, den wir erhalten würden, wenn wir im Rahmen der Quantenelektrodynamik in Dielektrika stationäre Störungstheorie in zweiter Ordnung mit dem Wechselwirkungs-Hamiltonoperator

$$H_{int} = -\mathbf{dE} \quad (4.5)$$

durchführen würden, wobei  $\mathbf{d}$  der Dipoloperator ist. Eine knappe Darstellung dieses Ansatzes ist in [48] zu finden.

Das CP-Potential eines neutralen Atoms in einem Dielektrikum  $\epsilon_1(\omega)$  gegenüber eines Dielektrikums  $\epsilon_2(\omega)$  ist also

$$V_{CP}^{\epsilon_{1,2}} = -\hbar \mathbf{Im} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \alpha(\omega) \left[ \int \frac{dk_{\parallel}}{2\pi} \frac{ik_{\parallel}}{2\sqrt{\omega^2/c^2 \epsilon_1(\omega) - k_{\parallel}^2}} e^{2i\sqrt{\omega^2 \epsilon_1(\omega) - k_{\parallel}^2} z} \right. \\ \left. \times \left( -r_{12}^p + r_{12}^s + \frac{2k_{\parallel}^2}{\omega^2/c^2 \epsilon_1(\omega)} r_{12}^p \right) \right]. \quad (4.6)$$

Im Grenzfall des idealen Leiters im Vakuum erhalten wir wie erwartet (2.1) zurück.

Es ist uns also gelungen, das CP-Potential an einer dielektrischen Grenzschicht auf die 2-Punkt-Funktion des elektrischen Feldes in einer kanonisch quantisierten makroskopischen Quantenelektrodynamik zurückzuführen und so das Ergebnis der einschlägigen Literatur zum Thema (u.a. [16], [32], [31], [30] und [48]), mittels einer sehr kurzen Rechnung, basierend auf klar definierten Methoden, zu reproduzieren. Eine kurze Beschreibung einiger Methoden aus der Literatur zur Berechnung der CP-Kraft finden sich im Anhang H.

#### 4.1 Casimir-Polder Kraft bei endlicher Temperatur in Anwesenheit dielektrischer Medien

An dieser Stelle möchten wir den Ausdruck für (4.4) auf den Fall endlicher Temperaturen erweitern. Dazu benötigen wir die temperaturabhängige 2-Punkt-Funktion an einem dielektrischen Interface. Diese werden wir ähnlich wie die 2-Punkt-Funktion zur Temperatur Null berechnen, mit dem Unterschied, dass wir die Korrelationen auf KMS-Zuständen zu berechnen haben

$$W_{ij}^{\epsilon, \beta}(x, y) = (\Omega, E_i(\mathbf{x}, t) E_j(\mathbf{y}, t') \Omega) \\ = \int d\omega \int d\omega' \left( \Omega, \left( \frac{i}{\sqrt{\pi}} \omega^2 \int d^3 \mathbf{r} e^{-i\omega t} \sqrt{\mathbf{Im} \epsilon(\mathbf{r}, \omega)} G_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \omega) C_k(\mathbf{r}, \omega) + h.c. \right)_{\text{KMS}} \right. \\ \left. \left( \frac{i}{\sqrt{\pi}} \omega'^2 \int d^3 \mathbf{r}' e^{-i\omega' t'} \sqrt{\mathbf{Im} \epsilon(\mathbf{r}', \omega')} G_{jl}(\mathbf{y}, \mathbf{r}', \omega') C_l(\mathbf{r}', \omega') + h.c. \right) \Omega \right) \\ = - \int d\omega \int d\omega' e^{-i\omega t} e^{i\omega' t'} \frac{1}{\pi} \omega^2 \int d^3 \mathbf{r} \sqrt{\mathbf{Im} \epsilon(\mathbf{r}, \omega)} G_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \omega) \omega'^2 \\ \int d^3 \mathbf{r}' \sqrt{\mathbf{Im} \epsilon(\mathbf{r}', \omega')} \cdot \overline{G_{jl}(\mathbf{y}, \mathbf{r}', \omega')} (\Omega, C_k(\mathbf{r}, \omega) C_l^*(\mathbf{r}', \omega') \Omega)_{\text{KMS}} \\ + \int d\omega \int d\omega' e^{i\omega t} e^{-i\omega' t'} \frac{1}{\pi} \omega^2 \int d^3 \mathbf{r} \sqrt{\mathbf{Im} \epsilon(\mathbf{r}, \omega)} \cdot \overline{G_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \omega)} \omega'^2 \\ \int d^3 \mathbf{r}' \sqrt{\mathbf{Im} \epsilon(\mathbf{r}', \omega')} \cdot G_{jl}(\mathbf{y}, \mathbf{r}', \omega') (\Omega, C_k^*(\mathbf{r}, \omega) C_l(\mathbf{r}', \omega') \Omega)_{\text{KMS}}$$

$$\begin{aligned}
& \stackrel{(6.5),(6.7)}{=} - \int d\omega \int d\omega' e^{-i\omega t} e^{i\omega' t'} \frac{1}{\pi} \omega^2 \int d^3 \mathbf{r} \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega)} G_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \omega) \omega'^2 \\
& \quad \int d^3 \mathbf{r}' \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}', \omega')} \cdot \overline{G_{jl}(\mathbf{y}, \mathbf{r}', \omega')} \delta_{kl} \delta(\omega - \omega') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{1}{2} \left( \coth\left(\frac{\omega\beta}{2}\right) + 1 \right) \\
& + \int d\omega \int d\omega' e^{i\omega t} e^{-i\omega' t'} \frac{1}{\pi} \omega^2 \int d^3 \mathbf{r} \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega)} \cdot \overline{G_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \omega)} \omega'^2 \\
& \quad \int d^3 \mathbf{r}' \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}', \omega')} \cdot G_{jl}(\mathbf{y}, \mathbf{r}', \omega') \delta_{kl} \delta(\omega - \omega') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{1}{2} \left( \coth\left(\frac{\omega\beta}{2}\right) - 1 \right) \\
& = - \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} \frac{1}{\pi} \omega^2 \int d^3 \mathbf{r} \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega)} G_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \omega) \omega'^2 \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega)} \\
& \quad \cdot \overline{G_{jk}(\mathbf{y}, \mathbf{r}, \omega)} \left( \coth\left(\frac{\omega\beta}{2}\right) + 1 \right) \\
& + \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} \frac{1}{\pi} \omega^2 \int d^3 \mathbf{r} \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega)} \cdot \overline{G_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \omega)} \omega'^2 \sqrt{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega)} \\
& \quad \cdot G_{jk}(\mathbf{y}, \mathbf{r}, \omega) \left( \coth\left(\frac{\omega\beta}{2}\right) - 1 \right) \\
& = \int d\omega \frac{\omega^2}{\pi} \mathbf{Im} G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega) e^{-i\omega(t-t')} \coth\left(\frac{\omega\beta}{2}\right), \tag{4.7}
\end{aligned}$$

im letzten Schritt haben wir die Integral-Gleichung (3.45) benutzt.

Das CP-Potential erhalten wir auf die selbe Weise wie im vorigen Kapitel, benutzen jedoch jetzt die temperaturabhängige 2-Punkt-Funktion. Da sich bis auf den Faktor  $\coth\left(\frac{\omega\beta}{2}\right)$  an der 2-Punkt-Funktion nichts geändert hat, ergibt sich das temperaturabhängige CP-Potential an einem dielektrischen Interface zu

$$V_{\text{CP}}^{\beta, \epsilon}(z) = -2\mathbf{Im} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \alpha(\omega) \coth\left(\frac{\omega\beta}{2}\right) \left[ \int \frac{dk_{\parallel}}{(2\pi)} \frac{ik_{\parallel}}{2\beta_1} e^{2i\beta_1 z} \left( -r_{12}^p + r_{12}^s + 2\frac{k_{\parallel}^2}{q_1^2} r_{12}^p \right) \right]. \tag{4.8}$$

Da die dielektrische Funktion im Allgemeinen temperaturabhängig ist, müssen wir die Formel so interpretieren, dass wir zur Berechnung der CP-Kraft die dielektrische Funktion bei der inversen Temperatur  $\beta$  einsetzen. Wir können den Ausdruck (4.8) umschreiben, indem wir das  $\omega$ -Integral ausführen. Dazu betrachten wir zunächst den Integranden und sehen, dass dieser sich auf die obere komplexe Halbebene zu einer meromorphen Funktion ( $\omega = \omega_R + i\omega_I$ ) fortsetzen lässt, da die Greensche Funktion (siehe (4.7)) eine kausale Antwort-Funktion ist (siehe Anhang G)

$$\begin{aligned}
V_{\text{CP}}^{\beta, \epsilon}(z) &= - \lim_{\omega_I \searrow 0} 2\mathbf{Im} \int_0^\infty d\omega_R (\omega_R + i\omega_I)^2 \alpha(\omega_R + i\omega_I) \coth\left(\frac{\omega_R + i\omega_I\beta}{2}\right) \\
& \quad \left[ \int \frac{dk_{\parallel}}{(2\pi)} \frac{ik_{\parallel}}{2\beta_1} e^{2i\beta_1 z} \left( -r_{12}^p + r_{12}^s + 2\frac{k_{\parallel}^2}{q_1^2} r_{12}^p \right) \right] \\
&= - \lim_{\omega_I \searrow 0} 2\mathbf{Im} \int_0^\infty d\omega_R f(z, \omega_R + i\omega_I) \coth\left(\frac{\omega_R + i\omega_I\beta}{2}\right). \tag{4.9}
\end{aligned}$$

Da  $f(z, \omega_R + i\omega_I)$  in der oberen Halbebene analytisch ist, hat der Integrand die Pole des Cotangens-Hyperbolicus bei  $\omega_n = \frac{2n\pi}{\beta}$  mit  $n \in \mathbb{N}$  und wir können das  $\omega$ -Integral nun mit Hilfe

des Residuensatzes lösen. Da der Integrand für rein imaginäre Frequenzen reell ist und somit verschwindet und darüber hinaus in positiver imaginärer Richtung in  $\omega_i$  exponentiell gegen Null geht, können wir über den Weg aus Abbildung 4 integrieren.

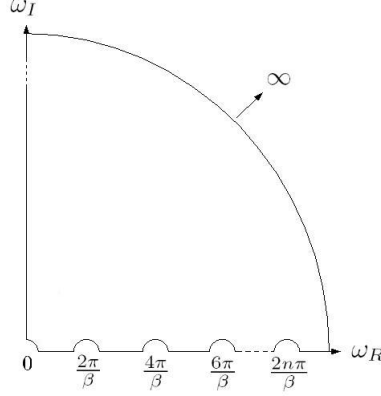


Abbildung 4: Integrationsweg um die Pole des Cotangens-Hyperbolicus

Das Potential lautet dann

$$\begin{aligned} V_{\text{CP}}^{\beta, \epsilon}(z) &= -2\text{Im} \sum_{n=0}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{2}\delta_{n0}\right) \frac{1}{i\beta} f(z, \omega_n) \\ &= -2\text{Im} \sum_{n=0}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{2}\delta_{n0}\right) \frac{\omega_n^2 \alpha(\omega_n)}{\beta} \left[ \int \frac{dk_{\parallel}}{(2\pi)} \frac{k_{\parallel}}{2\beta_1} e^{2i\beta_1 z} \left( -r_{12}^p + r_{12}^s + 2\frac{k_{\parallel}^2}{q_1^2} r_{12}^p \right) \right]_{\omega=\omega_n}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Nehmen wir an, dass sich das Atom im Vakuum befindet ( $\epsilon_1 = 1$ ), so können wir den Ausdruck mit dem, aus der Lifschitz-Formel [16] für die temperaturabhängige Casimir-Kraft gewonnenen, Potential [37] vergleichen. Dazu schreiben wir (4.10) um, indem wir folgende Variablentransformation vornehmen

$$p := +\sqrt{\frac{k_{\parallel}^2}{\omega^2} + 1}. \quad (4.11)$$

Das CP-Potential ergibt sich dann zu

$$V_{\text{CP}}^{\beta, \epsilon_2}(z) = -\text{Im} \sum_{n=0}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{2}\delta_{n0}\right) \omega_n^3 \alpha(\omega_n) \int_1^{\infty} \frac{dp}{2\pi} i e^{2ipz\omega_n} \left[ \frac{\beta_{\alpha'} - p}{\beta_{\alpha'} + p} + (1 - 2p^2) \frac{\beta_{\alpha'} - p\epsilon_2}{\beta_{\alpha'} + p\epsilon_2} \right]_{\omega=\omega_n}. \quad (4.12)$$

Dies stimmt genau mit Formel (17) aus [37] überein.

Im Fall idealer Randbedingungen (idealer Leiter im Vakuum) vereinfachen sich die Reflexionskoeffizienten zu

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon_2 \rightarrow \infty} r_{12}^p &= 1, \\ \lim_{\epsilon_2 \rightarrow \infty} r_{12}^s &= -1, \end{aligned}$$

und wir erhalten das temperaturabhängige CP-Potential für alle Abstände

$$V_{\text{CP}}^{\alpha(\omega)}(z) = -2\mathbf{Im} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \alpha(\omega) \coth\left(\frac{\omega\beta}{2}\right) \left[ \int \frac{dk_{\parallel}}{(2\pi)} \frac{ik_{\parallel}}{2\sqrt{\omega^2 - k_{\parallel}^2}} e^{2i\sqrt{\omega^2 - k_{\parallel}^2}z} \left(-2 + 2\frac{k_{\parallel}^2}{\omega^2}\right) \right]. \quad (4.13)$$

Substituieren wir nun mit  $u = -i\sqrt{k_{\parallel}^2 - \omega^2}$  erhalten wir

$$\begin{aligned} V_{\text{CP}}(z) &= -\mathbf{Im} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \alpha(\omega) \coth\left(\frac{\omega\beta}{2}\right) \int_\omega^{i\infty} \frac{du}{2\pi} e^{-2uz} \left(-2 + 2\frac{\omega^2 - u^2}{\omega^2}\right) \\ &= - \int_0^\infty d\omega \frac{\alpha(\omega) \coth\left(\frac{\omega\beta}{2}\right)}{4\pi z^3} e^{-2z\omega} (1 + 2z\omega + 2(z\omega)^2). \end{aligned} \quad (4.14)$$

Im Fall großer Abstände können wir die Polarisierbarkeit als die bei der Frequenz 0 nähern und erhalten dann erneut das Potential (2.19). Der Ausdruck für das CP-Potential (4.6) ermöglicht es uns, auch einen Ausdruck für das nicht retardierte London-Van-der-Waals-Potential für kleine Abstände zu berechnen. *Klein* bedeutet hier klein gegenüber der thermischen Wellenlänge  $\beta$ . Dazu führen wir wieder, wie oben beschrieben, das Integral über  $\omega$  in (4.14) mit Hilfe des Residuensatzes aus und erhalten

$$V_{\text{CP}}(z) = -2\pi i \sum_{n=0}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{2}\delta_{n0}\right) \frac{\alpha(\omega_n)}{4\pi z^3} e^{-2z\omega_n} (1 + 2z\omega_n + 2(z\omega_n)^2), \quad (4.15)$$

mit  $\omega_n = \frac{2n\pi}{\beta}$ . Für kleine Abstände, also  $z\omega_n \ll 1$ , erhalten wir dann das London-Van-der-Waals-Potential

$$V_{\text{LvdW}}^\beta(z) = -\frac{1}{4\pi z^3} 2\pi i \sum_{n=0}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{2}\delta_{n0}\right) \alpha(\omega_n). \quad (4.16)$$

An dieser Stelle erkennen wir, dass der von uns im statischen Fall (Kapitel 2) benutzte Energieansatz auf das retardierte Potential (2.1) bzw. (2.19) und nicht auf das London-Van-der-Waals-Potential (4.16) führte, da wir mit einer frequenzunabhängigen Polarisierbarkeit gerechnet haben. Das London-Van-der-Waals-Potential lässt sich im Rahmen der Quantenmechanik gewinnen, es berücksichtigt die Frequenzabhängigkeit der Polarisierbarkeit, jedoch keine Retardierungseffekte. Das Verhalten des CP-Potentials hängt also wesentlich vom Abstand des Atoms von der Wand ab. Versuchen wir dies, an dieser Stelle, quantitativ zu formulieren. Dazu möchten wir das temperaturabhängige CP-Potential in Abhängigkeit vom Abstand in verschiedenen Näherungen betrachten. Wir haben gesehen, dass sich für  $z \ll \beta$  das CP-Potential gut durch (4.16) beschreiben lässt. Für  $\beta \gg z$ , also für große Temperaturen, können wir das CP-Potential durch (2.22) beschreiben. Dazwischen muss also die Beschreibung des Potentials durch (2.1) liegen. Zur Quantifizierung der Aussage vergleichen wir als erstes das Potential (4.16) mit dem Potential (2.1) und sehen, dass sich diese bei der optischen Wellenlänge

$$\lambda_{\text{optisch}} = \frac{3c\alpha_0}{2} \left(2\pi i \sum_{n=0}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{2}\delta_{n0}\right) \alpha(\omega_n)\right)^{-1} \quad (4.17)$$

gleichem. Bei einem Abstand kleiner als  $\lambda_{\text{optisch}}$  dominiert also (4.16), bei einem größeren Abstand (2.1). Dieses Potential wird allerdings ab der thermischen Wellenlänge

$$\lambda_T = \lambda_{\text{thermisch}} = \hbar c \beta \quad (4.18)$$

von dem Potential (2.22) dominiert. In Abbildung 5 ist dieser Sachverhalt abgebildet. Der Ausdruck (4.14) gibt in allen Bereichen den exakten Wert und interpoliert zwischen den 3 Näherungen.

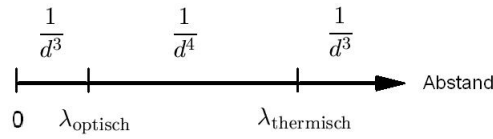


Abbildung 5: Abstandsabhängigkeit des CP-Potentials

## 4.2 Casimir-Polder-Kraft im Limes statischer Dielektrika

Das oben beschriebene Modell zur Quantisierung des elektrischen Feldes in Materie geht von der physikalischen Vorstellung aus, dass durch die Wechselwirkung zwischen dem Lichtfeld und der Materie ein Strom im Medium induziert wird, welcher zur einer Polarisierung führt und so das elektrische Feld im Medium ändert. Im Falle idealer metallischer Randbedingungen ist dieser Strom Null und die CP-Kraft der elektrostatischen Rechnung stimmt mit der der elektrodynamischen Rechnungen überein. Sind die Randbedingungen jedoch nicht ideal, wird ein nicht divergenzfreier Strom im Medium erzeugt. Nach der Kontinuitäts-Gleichung existiert dann eine sich zeitlich ändernde Ladungsverteilung und wir müssen statt der Elektrostatik die Elektrodynamik anwenden. Interessanterweise unterscheiden sich die Rechnungen nur um eine Funktion, die vom Betrag her zwischen 0 und 1 liegt. Es bleibt die Frage: Welche physikalische Interpretation haben die elektrostatischen Rechnungen aus Kapitel 2.3?

Wir wollen an dieser Stelle das CP-Potential für den Fall statisch beschriebener Dielektrika bestimmen. Dazu lassen wir in (4.4) die Frequenzabhängigkeit der dielektrischen Funktionen und der Polarisierbarkeit weg. Dies ist also der "statische Limes", in dem angenommen wird, dass die Antwort des Mediums auf das Lichtfeld und die Polarisierbarkeit des Atoms frequenzunabhängig ist. Man geht dann davon aus, dass die dielektrische Funktion durch die reelle Konstante  $\epsilon_i(\omega = 0) = \epsilon_i$  und die Polarisierbarkeit durch die Konstante  $\alpha(\omega = 0) = \alpha$  beschrieben werden kann. Dann lautet das CP-Potential

$$\begin{aligned} V_{CP}^{\epsilon_{1,2}} &= 2\mathbf{Im} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \alpha [R_{11}^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega) + R_{22}^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega) + R_{33}^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega)] \\ &= 2\mathbf{Im} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \alpha(\omega) \left[ \int \frac{d^2 \mathbf{k}_{\parallel}}{(2\pi)^2} \sum_{i=1}^3 R_{ii}^1(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega; z, z) \right] \\ &= -2\mathbf{Im} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \alpha(\omega) \left[ \int \frac{dk_{\parallel}}{(2\pi)} \frac{ik_{\parallel}}{2\beta_1} e^{2i\beta_1 z} \left( -r_{12}^p + r_{12}^s + 2 \frac{k_{\parallel}^2}{q_1^2} r_{12}^p \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Führen wir die Variablen  $\xi = i\omega$  sowie  $x = 1 + \frac{k_{\parallel}^2}{\xi^2}$  ein, so sehen wir, dass der Integrand entlang der imaginären Achse rein reell ist und erhalten

$$V_{CP}^{\epsilon_1, 2} = \int_0^{\infty} d\xi \int_1^{\infty} dx \left[ \frac{e^{-2z\xi\sqrt{x^2+\epsilon_1-1}} x \alpha \xi^3 (\epsilon_1 - \epsilon_2)}{\pi \epsilon_1 \sqrt{x^2 + \epsilon_1 - 1} (\sqrt{x^2 + \epsilon_1 - 1} + \sqrt{x^2 + \epsilon_2 - 1}) (\sqrt{x^2 + \epsilon_2 - 1} \epsilon_1 + \sqrt{x^2 + \epsilon_1 - 1} \epsilon_2)} \right] \quad (4.20)$$

$$\times \left( \sqrt{x^2 + \epsilon_1 - 1} \sqrt{x^2 + \epsilon_2 - 1} \epsilon_1 + (x^2 - 1) \left( x^2 + \sqrt{x^2 + \epsilon_1 - 1} \sqrt{x^2 + \epsilon_2 - 1} - 1 \right) \right) \quad (4.21)$$

Die Berechnung der Integrale gelingt mit Mathematica, das CP-Potential ergibt sich dann zu

$$V_{CP}^{\epsilon_1, 2} = -\frac{3\alpha (\epsilon_1 - \epsilon_2)}{8z^4 (\epsilon_1 + \epsilon_2)} f(\epsilon_1, \epsilon_2), \quad (4.22)$$

mit der Funktion

$$f(\epsilon_1, \epsilon_2) = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{12\epsilon_1^3 (\epsilon_1 - \epsilon_2)} \left[ \frac{12 \left( \operatorname{artanh} \left( \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} + 1} \right) - \operatorname{artanh} \left( \sqrt{\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} + 1} \right) \right) \epsilon_2^2}{\sqrt{\epsilon_1 + \epsilon_2}} \right] \quad (4.23)$$

$$+ 3\pi \left( \frac{1}{\epsilon_1 - \epsilon_2} \right)^{3/2} (\epsilon_1^3 + 3\epsilon_2\epsilon_1^2 - 4\epsilon_2^2\epsilon_1 + 2\epsilon_2^3) \quad (4.24)$$

$$+ \frac{-20\epsilon_1^{5/2} + 6\sqrt{\epsilon_2}\epsilon_1^2 + 8\epsilon_2\epsilon_1^{3/2} + 6\epsilon_2^{3/2}\epsilon_1 - 12\epsilon_2^2\sqrt{\epsilon_1}}{\epsilon_1 - \epsilon_2} \quad (4.25)$$

$$+ 6 \frac{\operatorname{artanh} \left( \frac{1}{\sqrt{1-\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}}} \right) (\epsilon_1^3 + 3\epsilon_2\epsilon_1^2 - 4\epsilon_2^2\epsilon_1 + 2\epsilon_2^3)}{(\epsilon_2 - \epsilon_1)^{3/2}} \right]. \quad (4.26)$$

Der Areatangens-Hyperbolicus ist hier als seine eindeutige analytische Fortsetzung so zu verstehen, dass auf der reellen Achse gilt

$$\operatorname{artanh}(x) = \ln \left( \sqrt{\frac{1+x}{1-x}} \right) - i\frac{\pi}{2} \quad \text{für } |x| > 1. \quad (4.27)$$

Da  $\epsilon_i(0) > 1$  gilt [27] schließt der Fall  $|x| > 1$  alle auftretenden Möglichkeiten ein. Benutzen wir nun noch die Beziehung

$$\operatorname{artanh}(x) = \operatorname{arsinh} \left( \frac{1}{\sqrt{x^2 - 1}} \right) - i\frac{\pi}{2} \quad \text{für } |x| > 1, \quad (4.28)$$

vereinfacht sich die Funktion  $f(\epsilon_1, \epsilon_2)$  zu

$$f(\epsilon_1, \epsilon_2) = \frac{\pi (\epsilon_1 + \epsilon_2)}{12\epsilon_1^3 (\epsilon_1 - \epsilon_2)} \left[ \frac{2 \left( -10\epsilon_1^{5/2} + 3\sqrt{\epsilon_2}\epsilon_1^2 + 4\epsilon_2\epsilon_1^{3/2} + 3\epsilon_2^{3/2}\epsilon_1 - 6\epsilon_2^2\sqrt{\epsilon_1} \right)}{\pi (\epsilon_1 - \epsilon_2)} \right. \\ + \frac{12 \left( \operatorname{arsinh} \left( \sqrt{\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}} \right) - \operatorname{arsinh} \left( \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}} \right) \right) \epsilon_2^2}{\pi \sqrt{\epsilon_1 + \epsilon_2}} \\ \left. - 6 \frac{\operatorname{arsinh} \left( \sqrt{\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} - 1} \right) (\epsilon_1^3 + 3\epsilon_2\epsilon_1^2 - 4\epsilon_2^2\epsilon_1 + 2\epsilon_2^3)}{\pi (\epsilon_2 - \epsilon_1)^{3/2}} \right]. \quad (4.29)$$

Im Limes  $\epsilon_1 \rightarrow 1, \epsilon_2 \rightarrow \infty$  ist  $f(\epsilon_1, \epsilon_2) = -1$  und wir erhalten das CP-Potential (2.9) bei idealen Randbedingungen. Für den Fall, dass sich das Atom im Vakuum vor einer Wand mit der Dielektrizität  $\epsilon$  befindet, erhalten wir

$$V_{CP}^\epsilon = -\frac{3\alpha(1-\epsilon)}{8z^4(1+\epsilon)}f(\epsilon), \quad (4.30)$$

mit

$$f(\epsilon) = \frac{\pi(\epsilon+1)}{12(1-\epsilon)} \left[ \frac{2(6\epsilon^2 - 3\epsilon^{3/2} - 4\epsilon - 3\sqrt{\epsilon} + 10)}{\pi(\epsilon-1)} - \frac{6(2\epsilon^3 - 4\epsilon^2 + 3\epsilon + 1) \operatorname{arsinh}(\sqrt{\epsilon-1})}{\pi(\epsilon-1)^{3/2}} + \frac{12\epsilon^2 \left( \operatorname{arsinh}(\sqrt{\epsilon}) - \operatorname{arsinh}\left(\sqrt{\frac{1}{\epsilon}}\right) \right)}{\pi\sqrt{\epsilon+1}} \right]. \quad (4.31)$$

In dieser vereinfachten Form ist das Ergebnis in [37] Formel (22) und (23) zu finden.  $f(\epsilon_1, \epsilon_2)$  beschreibt (abgesehen vom Vorzeichen) den relativen Unterschied zwischen dem CP-Potential aus den elektrostatischen Rechnungen und denen im "statischen Limes". Wie am Anfang des Abschnittes erwähnt, müssen wir hier die Frage nach der physikalischen Interpretation der Rechnungen aus Kapitel 2.3 offen lassen. Nachdem wir nun die CP-Kraft in einer sehr allgemeinen Form berechnet haben, möchten wir uns die Ergebnisse anhand von für Experimente interessanten Beispielen verdeutlichen.



### 4.3 Numerische Resultate

Bisher sind unsere Rechnungen abstrakter Natur und wir könnten uns fragen, ob der Einfluss der dielektrischen Eigenschaften der Wand eine messbare Änderung der CP-Kraft im Vergleich zum idealen Fall zur Folge hat. Diese Frage möchten wir nun anhand von zwei Beispielen klären. Dazu werden wir das CP-Potential eines Rubidium-Atoms ( $\alpha_0 = 50 \times 10^{-30} m^3$ ) im Vakuum vor einer metallischen Wand (z.B. Magnesium) und einem Dielektrikum (z.B. Silizium) berechnen. Diese werden wir mit dem CP-Potential bei idealen Randbedingungen (Metall) bzw. bei konstanter dielektrischer Funktion (Dielektrikum) vergleichen.

Um das Metall und das Dielektrikum mit frequenzabhängiger dielektrischer Funktion zu beschreiben, benutzen wir das 1-Resonanz-Drude-Lorentz-Modell (1-RDLM) [22], die dielektrische Funktion lautet dann

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\Omega^2}{\omega^2 - i\omega\gamma - \omega_0^2}, \quad (4.32)$$

wobei  $\Omega, \gamma$  und  $\omega_0$  Materialparameter sind. Zur Simulation von Silizium werden wir  $\omega_0 = 10^9 \text{sec}^{-1}$ ,  $\Omega = 1.6176 \times 10^{16} \text{sec}^{-1}$ ,  $\gamma = 9.7 \times 10^{14} \text{sec}^{-1}$  und zur Simulation des Metalls  $\omega_0 = 2 \times 10^{15} \text{sec}^{-1}$ ,  $\Omega = 6.536 \times 10^{15} \text{sec}^{-1}$ ,  $\gamma = 9.859 \times 10^{12} \text{sec}^{-1}$  wählen<sup>9</sup>. Das CP-Potential berechnen wir aus (4.6) für die dielektrische Funktion (4.32) und die gewählten Materialparameter mit Hilfe von Mathematica numerisch. Das CP-Potential bei Anwesenheit des Metalls vergleichen wir dann mit (2.9) und das des Dielektrikums mit (4.31), unter Verwendung der statischen Dielektrizitätskonstante von Silizium ( $\epsilon_{\text{Si}} = 9.4$ ). Abbildung 6 zeigt das CP-Potential eines

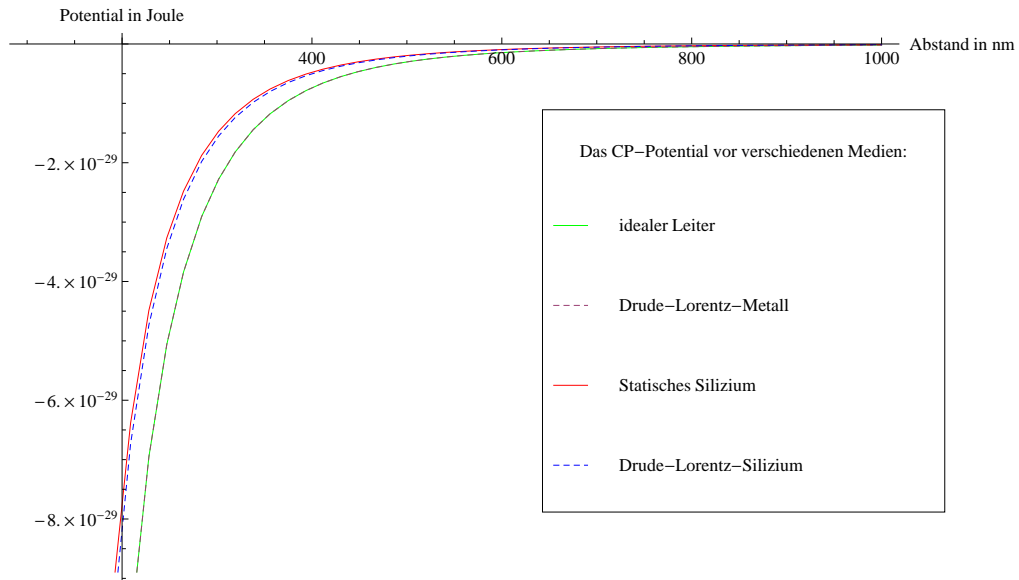


Abbildung 6: Das CP-Potential eines Rubidium-Atoms für den idealen Leiter, ein Metall im 1-RDLM, Silizium mit statischer dielektrischer Funktion und Silizium im 1-RDLM.

Rubidium-Atoms vor vier verschiedenen Wänden. Die unteren beiden Potential-Verläufe beschreiben das CP-Potential des idealen Leiters und eines Leiters mit endlicher Leitfähigkeit.

<sup>9</sup>Die Parameter sind wie in [26] gewählt, dort wird anhand dieser die Casimir-Kraft ausgerechnet.

Die oberen beiden Verläufe beschreiben das CP-Potential vor einer Silizium-Wand im Limes einer statischen dielektrischen Funktion und im 1-RDLM. Wir sehen, dass die idealisierten Modelle die Potential-Verläufe sehr gut wiedergeben und wir mit heutiger Messgenauigkeit von ca. 1% nicht entscheiden können, welches der Modelle die Wirklichkeit besser beschreibt. Diese Aussage gilt unabhängig von der Größe der Polarisierbarkeit des Teilchens vor der Wand, da diese in beiden Modellen linear ins Potential eingeht. An dem Vergleich zwischen den Metallen und den Halbleitern sehen wir, dass das CP-Potential scheinbar umso stärker ist, je höher die Reflexion des Materials ist. Diese Aussage können wir bestätigen, indem wir das CP-Potential im 1-RDLM gegen die Plasmfrequenz  $\Omega$  des Mediums auftragen. Abbildung 7 zeigt den Betrag des Potentials gegen die Plasmfrequenz im logarithmisch-logarithmischen Plot. Das CP-Potential steigt also mit zunehmender Plasmfrequenz an. Da die Plasmfrequenz beschreibt, ab welcher Frequenz Strahlung in das Medium eindringen kann und nicht mehr reflektiert wird, bestätigt das Ansteigen des CP-Potentials mit zunehmender Plasmfrequenz, dass das Potential umso stärker ist, je mehr Strahlung von dem Medium reflektiert wird. Darüberhinaus sehen wir, dass das Potential ab der Resonanzfrequenz des 1-RDLM von  $\omega_0 = 2 \times 10^{15} \text{sec}^{-1}$  nicht mehr exponentiell anwächst.

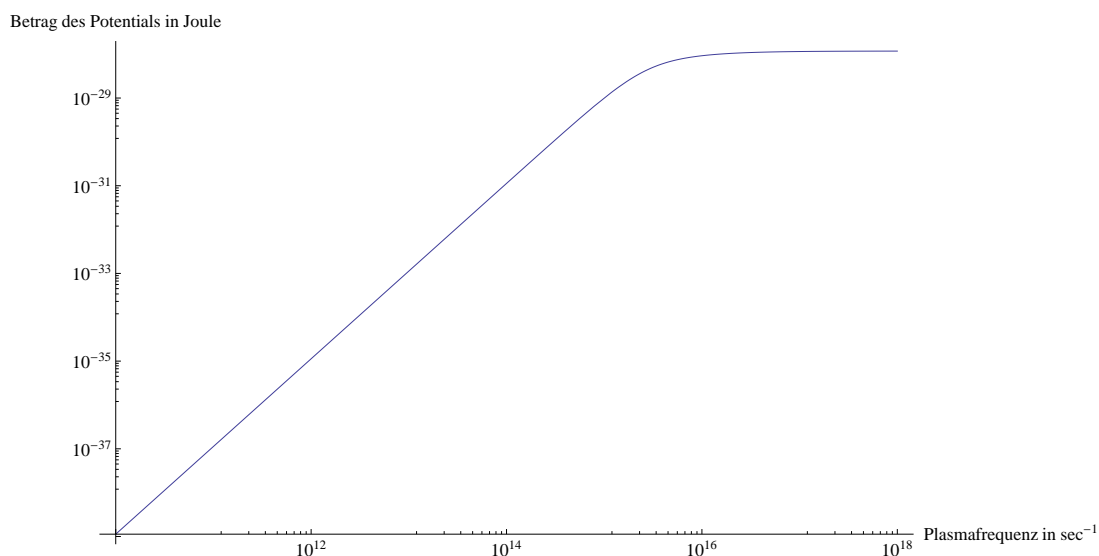


Abbildung 7: Logarithmisch-logarithmischer-Plot des CP-Potentials im 1-RDLM gegen die Plasmfrequenz des Modells bei einem Abstand von 200nm, einer Resonanzfrequenz von  $2 \times 10^{15} \text{sec}^{-1}$  und  $\gamma = 9.859 \times 10^{12} \text{sec}^{-1}$ .

Die CP-Kraft nimmt jedoch auch nach der Resonanzfrequenz weiter mit der Plasmalfrequenz zu, wie man an dem Verlauf des Potentials in Abbildung 8 sehen kann.

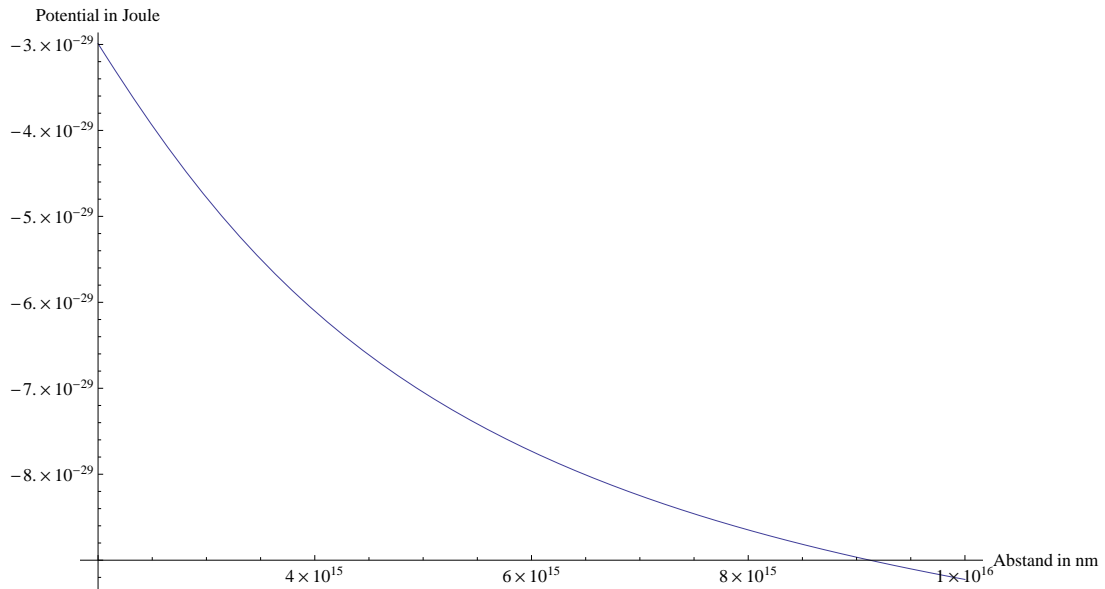


Abbildung 8: Das CP-Potential im 1-RDLM gegen die Plasmalfrequenz des Modells bei einem Abstand von 200nm, einer Resonanzfrequenz von  $2 \times 10^{15} \text{sec}^{-1}$  und  $\gamma = 9.859 \times 10^{12} \text{sec}^{-1}$ .

Nachdem wir die CP-Kraft in vielen interessanten Details betrachtet haben, ist das Ziel des nächsten Abschnitts die Berechnung der Van-der-Waals-Wechselwirkung zwischen zwei polarisierbaren Atomen. Dies kann auf sehr ähnliche Art und Weise gemacht werden wie die Berechnung der CP-Kraft.

## 5 Van-der-Waals-Wechselwirkung

Wir haben gesehen, dass sich die Casimir- und die Casimir-Polder-Kraft als Vakuum-Effekt verstehen lassen und deren Verhalten unter verschiedenen physikalischen Gegebenheiten berechnet. Die Casimir-Kraft ist eine Kraft zwischen zwei makroskopischen Objekten, die CP-Kraft zwischen einem makroskopischen und einem als punktförmig genäherten Teilchen, wie sieht es nun mit der Van-der-Waals-Wechselwirkung zwischen zwei als punktförmig genäherten Teilchen aus, können wir diese auch als Vakuum-Effekt verstehen?

Ziel dieses Abschnittes wird es sein, die langreichweitige Van-der-Waals-Wechselwirkung zwischen zwei neutralen, polarisierbaren Atomen, unter Einfluss der endlichen Ausbreitungsgeschwindigkeit des Lichtes, bei beliebigen Temperaturen zu berechnen. Wir berechnen zunächst das Van-der-Waals-Potential bei Temperatur  $T = 0$  und für einen Abstand, in dem wir die Polarisierbarkeit  $\alpha_1$  bzw.  $\alpha_2$  der punktförmige Teilchen als konstant betrachten können. Das Koordinatensystem sei der Einfachheit halber so gewählt, dass die Atome auf der z-Achse liegen und einen Abstand  $r$  voneinander haben. Wir interpretieren die vom Abstand abhängige Energie-Korrektur des Systems als das Potential der Kraft zwischen den Atomen. Diese berechnen wir in 2. Ordnung stationärer Störungstheorie. Die erste Ordnung Störungstheorie verschwindet, auf Grund der Normalordnung in der elektrostatischen Energie. Die Normalordnung lässt sich hier wie folgt physikalisch interpretieren; Im realen Experiment haben die Teilchen eine endliche Ausdehnung und der singuläre Ausdruck  $\mathbf{E}(0)$  wird endlich. Da dieser nicht vom Abstand der beiden Atome abhängt, trägt er nicht zum Potential bei.

Die Hamiltonfunktion des Systems lautet

$$H = \int d^3\mathbf{x} \frac{\mathbf{E}(0, \mathbf{x})^2}{2} + \frac{\mathbf{B}(0, \mathbf{x})^2}{2} + 2\pi\alpha_1^{ij}(0) : E_i(0, \mathbf{x})E_j(0, \mathbf{r}_1) : \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{r}_1) \quad (5.1)$$

$$+ 2\pi\alpha_2^{nm}(0) : E_n(0, \mathbf{x})E_m(0, \mathbf{r}_2) : \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{r}_2),$$

mit  $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = r$  und  $\alpha_{ij}^k = \alpha^k(0)\delta_{ij}$ .

Die 2. Ordnung Störungstheorie ist bei verschwindender Grundzustandsenergie gegeben als

$$V_{\text{vdW}}(r) = E^{(2)}$$

$$= -\frac{1}{2} (\Omega, H_{\text{int}}(0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) H_0^{-1} H_{\text{int}}(0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) H_0 \Omega)$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} -\frac{(4\pi)^2 i}{2} \int_0^\infty dt (\Omega, H_{\text{int}}(0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{-iH_0(t-i\epsilon)} H_{\text{int}}(0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{iH_0(t-i\epsilon)} e^{-iH_0(t-i\epsilon)} \Omega)$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} -\frac{(4\pi)^2 i}{2} \int_0^\infty dt (\Omega, H_{\text{int}}(0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) H_{\text{int}}(t-i\epsilon, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Omega), \quad (5.2)$$

im letzten Schritt haben wir die Translationsinvarianz des Vakuums ausgenutzt. Setzen wir den Ausdruck für die Korrektur des Hamiltonoperators ein, sehen wir, dass wir wieder nur den Vakuumerwartungswert von elektrischen Feldstärke-Operatoren ausrechnen müssen

$$V_{\text{vdW}}(r) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} -\frac{(4\pi)^2 i}{2} \int_0^\infty dt$$

$$\left( \Omega, \left( \alpha_1^{ij}(0) : E_i(0, \mathbf{r}_1)E_j(0, \mathbf{r}_1) : + \alpha_2^{nm}(0) : E_n(0, \mathbf{r}_2)E_m(0, \mathbf{r}_2) : \right) \right.$$

$$\left. \left( \alpha_1^{ij}(0) : E_i(t-i\epsilon, \mathbf{r}_1)E_j(t-i\epsilon, \mathbf{r}_1) : + \alpha_2^{nm}(0) : E_n(t-i\epsilon, \mathbf{r}_2)E_m(t-i\epsilon, \mathbf{r}_2) : \right) \Omega \right).$$

Wir können diesen Ausdruck (4-Punkt-Funktion des elektrischen Feldstärketensors) in 2-Punkt-Funktion des elektromagnetischen Feldstärketensors schreiben. Dazu schreiben wir die Felder in Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, beachten die Normalordnung und die Kommutator-Relationen. Allgemein können wir für freie Felder die n-Punkt-Funktionen (Erwartungswerte von dem Produkt von n Feldern) vollständig durch die 2-Punkt-Funktion beschreiben. Für die Produkte von normalgeordneten Potenzen von skalaren Feldern (Wickpotenzen) gilt, u.a. nach [18]

$$(\Omega, : \phi(x_1)^{n_1} : \cdots : \phi(x_k)^{n_k} : \Omega) = \sum_{G \in \mathcal{G}_+(n_1, \dots, n_k)} c_G \Pi_l \Delta_+(x_{s(l)} - x_{r(l)}), \quad (5.3)$$

wobei  $\mathcal{G}_+(n_1, \dots, n_k)$  die Menge aller Graphen, mit k Vertices  $1, \dots, k$ , bei dem vom i-ten Vertex  $n_i$  Linien ausgehen, ist. Die Linien verbinden jeweils zwei verschiedene Vertices und sind zum Vertex mit dem größeren Index gerichtet.  $c_G$  ist ein kombinatorischer Faktor. Unter Berücksichtigung der Vektorindizes ist die benötigte 4-Punkt-Funktion das Produkt von zwei 2-Punkt-Funktion (2.5) derart, dass sich

$$\begin{aligned} V_{\text{vdW}}(r) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} -8\pi^2 \alpha_1 \alpha_2 i \int dt W_{0i0j}(t - i\epsilon, r) W_{0i0j}(t - i\epsilon, r) \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} -8\pi^2 \alpha_1 \alpha_2 i \int dt \frac{3r^4 + 2t^2 r^2 + 3t^4}{\pi^4 (t^2 - r^2)^6} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} -8\pi^2 \alpha_1 \alpha_2 i 2\pi i \text{Res}_{t=-r} \left[ \frac{3r^4 + 2t^2 r^2 + 3t^4}{\pi^4 (t^2 - r^2)^6} \right] \\ &= 8\pi^2 \alpha_1 \alpha_2 i^2 2\pi \frac{23}{64\pi^4 r^7} \\ &= -\frac{23\alpha_1 \alpha_2}{4\pi r^7} \end{aligned} \quad (5.4)$$

ergibt. Das Wechselwirkungspotential zweier elektrisch neutraler Atome ist also

$$V_{\text{vdW}}(r) = -\frac{23\hbar c \alpha_1 \alpha_2}{4\pi r^7}. \quad (5.5)$$

Dies ist genau das Ergebnis von Casimir und Polder [13]. Unser einfaches Modell der beiden polarisierbaren Atome, welche mit den elektromagnetischen Vakuum-Fluktuationen wechselwirken, reicht also aus, um das retardierte Van-der-Waals-Potential zu verstehen. Es wurde an dieser Stelle erstmals das Van-der-Waals-Potential im Rahmen dieses Modells hergeleitet. Diese Form der Herleitung ermöglicht es uns die Van-der-Waals-Kraft bei endlichen Temperaturen zu verstehen.

### 5.1 Temperaturabhängige Van-der-Waals-Wechselwirkung

Zur Berechnung der temperaturabhängigen Van-der-Waals-Wechselwirkung gehen wir genau wie bei der Rechnung oben vor, jedoch unter Verwendung der temperaturabhängigen 2-Punkt-Funktion (6.13). Das Potential berechnet sich wieder aus der Feldenergie in 2. Ordnung Störungstheorie

$$\begin{aligned}
V_{\text{vdW}}^\beta(r) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} -8\pi^2 \alpha_1 \alpha_2 i \int dt W_{0i0j}^\beta(t - i\epsilon, r) W_{0i0j}^\beta(t - i\epsilon, r) \\
&= \int dt \frac{-8\pi^2 \alpha_1 \alpha_2 i}{16\pi^2 z^6 \beta^4} \left[ \left\{ \beta \coth\left(\frac{\pi(z-r)}{\beta}\right) + \beta \coth\left(\frac{\pi(t+r)}{\beta}\right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \pi r \left( \sinh\left(\frac{\pi(r-t)}{\beta}\right)^{-2} + \sinh\left(\frac{\pi(t+r)}{\beta}\right)^{-2} \right) \right\}^2 \right. \\
&\quad \left. + \left\{ \coth\left(\frac{\pi(r-t)}{\beta}\right) \left( \beta^2 + 2\pi^2 r^2 \sinh^{-2}\left(\frac{\pi(r-t)}{\beta}\right) \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \pi r \beta \left( \sinh\left(\frac{\pi(r-t)}{\beta}\right)^{-2} + \sinh\left(\frac{\pi(t+r)}{\beta}\right)^{-2} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \coth\left(\frac{\pi(t+r)}{\beta}\right) \left( \beta^2 + 2\pi^2 r^2 \sinh\left(\frac{\pi(t+r)}{\beta}\right)^{-2} \right) \right\}^2 \right]. \quad (5.6)
\end{aligned}$$

Im letzten Ausdruck behalten wir im Auge, dass dieser im Sinne von  $t \rightarrow \lim_{\epsilon \rightarrow 0} t - i\epsilon$  gemeint ist. Dies ermöglicht uns, das Integral mit Hilfe des Residuensatzes auszurechnen, da der Integrand für große  $t$  gegen Null strebt. Wir nehmen also den Pol bei  $t = z$  mit und erhalten

$$\begin{aligned}
V_{\text{vdW}}^\beta(r) &= -\frac{1}{8r^6 \beta^5 \sinh^4\left(\frac{2\pi r}{\beta}\right)} \\
&\quad \left[ \left( 96\pi^4 \coth\left(\frac{\pi r}{\beta}\right) r^4 + 96\pi^4 \tanh\left(\frac{\pi r}{\beta}\right) r^4 + 64\pi^3 \beta r^3 - 24\pi \beta^3 r \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + 8\pi \beta (4\pi^2 r^2 + 3\beta^2) \cosh\left(\frac{4\pi r}{\beta}\right) r + 3\beta^4 \sinh\left(\frac{8\pi r}{\beta}\right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + (32\pi^4 r^4 + 40\pi^2 \beta^2 r^2 - 6\beta^4) \sinh\left(\frac{4\pi r}{\beta}\right) \right) \right]. \quad (5.7)
\end{aligned}$$

Dies ist das, noch nie berechnete, retardierte temperaturabhängige Van-der-Waals-Potential. Für KMS-Zustände gibt es eine Störungstheorie, in der die Zeit-Integrale in der Dyson-Reihe in imaginärer Richtung ausgeführt werden und von 0 bis  $\frac{\beta}{2}$  integriert wird. Diese Störungstheorie liefert die gleichen Ergebnisse wie die von uns oben ausgeführte, wie wir in Anhang C zeigen. Um das asymptotische Verhalten zu studieren, führen wir wieder die dimensionslose Größe  $\rho = \frac{2\pi r}{\beta}$  ein und erhalten

$$\begin{aligned}
V_{\text{vdW}}^\beta(r) &= -\frac{\alpha_1 \alpha_2 \rho}{4\pi r^7} \\
&\quad \times \left( 6 \coth(\rho) + 3\rho^3 (\rho \coth(\rho) + 1) \sinh^{-4}(\rho) + \rho (2(\rho^2 + 3) + \rho(\rho^2 + 5) \coth(\rho)) \sinh^{-2}(\rho) \right). \quad (5.8)
\end{aligned}$$

Für kleine Abstände, also  $\rho \ll 1$ , verhalten sich die Hyperbolicus-Funktionen wie

$$\begin{aligned}\coth(x) &\approx \frac{1}{x}, \\ \sinh(x)^{-1} &\approx \frac{1}{x}\end{aligned}$$

und die Klammer in (5.8) ergibt 23. Wir erhalten dann das Potential (5.4) für  $T = 0$  zurück

$$V_{\text{vdW}}^\beta(r) \approx -\frac{23\alpha_1\alpha_2\hbar c}{4\pi r^7}. \quad (5.9)$$

Für große Temperaturen ( $\rho \gg 1$ ) geht  $\coth(\rho) \rightarrow 1$  und der  $\sinh(\rho)^{-1}$  fällt exponentiell gegen Null ab, wir erhalten dann, wenn wir  $\rho = \frac{2\pi r}{\beta}$  zurück einsetzen

$$V_{\text{vdW}}^\beta(r) \approx -\frac{3kT\alpha_1\alpha_2}{r^6}. \quad (5.10)$$

Dieser Ausdruck ist wieder rein klassisch und entspricht dem Limes  $\hbar \rightarrow 0$  von (5.7), dazu mehr in Kapitel 7.

Wie schon bei dem CP-Potential ist das Abstandsverhalten des Van-der-Waals-Potentials sehr stark vom Verhältnis zwischen der Temperatur und dem Abstand selbst abhängig. Dies möchten wir nun auch hier quantifizieren. Quantenmechanische Rechnung (siehe z.B. [30]) führen auf das nicht retardierte Van-der-Waals-Potential zwischen zwei Atomen gleicher Polarisierbarkeit

$$V_{\text{VdW}}^{\text{nicht retardiert}}(r) = -\frac{3\alpha^2\hbar\omega_0}{4r^6}, \quad (5.11)$$

wobei  $\hbar\omega_0$  die Energiedifferenz zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand der Atome ist. Vergleichen wir dieses Potential mit dem Van-der-Waals-Potential (5.4) bei  $T = 0$ , sehen wir, dass bei Abständen unterhalb von ungefähr

$$\lambda_{\text{optisch},2} = \frac{c}{\omega_0} \quad (5.12)$$

das nicht retardierte Potential (5.11) dominiert und bei Abständen größer  $\lambda_{\text{optisch},2}$  das retardierte Van-der-Waals-Potential (5.4) die bessere Beschreibung liefert. Bei Abständen oberhalb der thermischen Wellenlänge

$$\lambda_T = \beta\hbar c \quad (5.13)$$

dominiert dann das Potential (5.10). Dieser Sachverhalt ist in Abbildung 9 dargestellt. Die

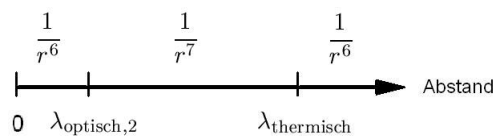


Abbildung 9: Abstandsabhängigkeit des Van-der-Waals-Potentials

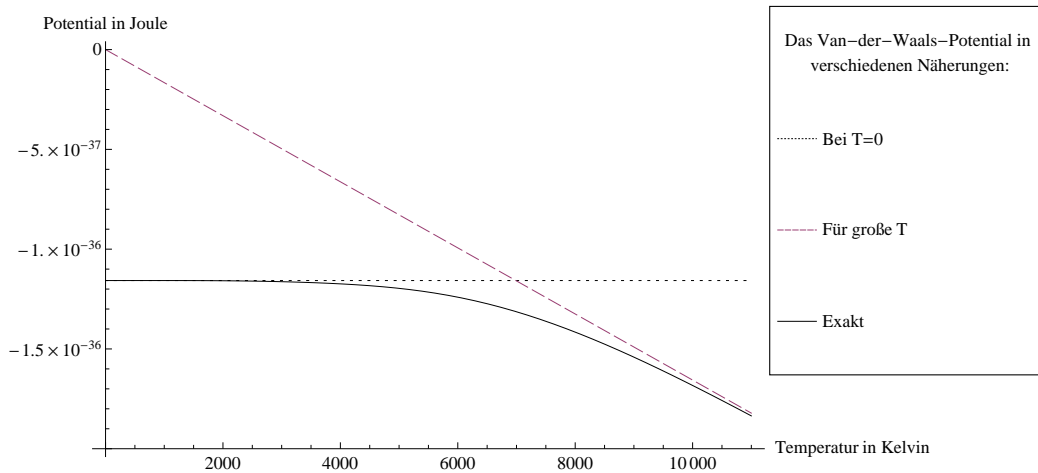


Abbildung 10: Das Van-der-Waals-Potential zwischen zwei Lithium-Atomen der Polarisierbarkeit  $\alpha = 16 \cdot 10^{-30} m^3$  im Abstand  $r = 200 nm$  in Abhängigkeit von der Temperatur.

Van-der-Waals-Kraft bei endlicher Temperatur steigt also mit steigender Temperatur an. Je höher die Temperatur des elektromagnetischen Hintergrundfeldes ist, desto stärker ist die Van-der-Waals-Bildung der beiden Atome. Da wir an dieser Stelle erstmals die Abhängigkeit der Van-der-Waals-Kraft von der Temperatur des elektromagnetischen Vakuums<sup>10</sup> berechnet haben, sollten wir überlegen, was dies für physikalische Konsequenzen hat. Da die asymptotische Kraft (5.10) im Gegensatz zur Van-der-Waals-Kraft bei  $T = 0$  mit einer Potenz weniger im Abstand abfällt, ist die Kraft bei endlicher Temperatur langreichweitiger als bisher angenommen. Vergleichen wir die Van-der-Waals-Kraft mit der Gravitationskraft, sehen wir, dass sich die Kräfte für den Abstand

$$r_{\text{VdWGrav}} = \left( \frac{18T\alpha_1\alpha_2k}{Gm_1m_2} \right)^{\frac{1}{5}} \quad (5.14)$$

gleichem. Für zwei Lithium-Atome in einem Hintergrundfeld der Temperatur  $T = 300$  Kelvin entspricht dies einem Abstand von  $r_{\text{VdWGrav}} = 3mm$ . Für kosmische Abstände spielt also auch die temperaturabhängige Van-der-Waals-Kraft keine Rolle.

Die Berechnung der temperaturabhängigen Vakuum-Kräfte gelang uns auf eine sehr elegante Art und Weise, indem wir mit KMS-Zuständen gearbeitet haben, diese möchten wir nun kurz einführen.

<sup>10</sup>In [7] wird die Van-der-Waals-Kraft für den Fall ausgerechnet, dass sich die Atome mit der elektromagnetischen Strahlung im Temperatur-Gleichgewicht befinden, dies führt scheinbar auf grundsätzlich andere Ergebnisse. Eine genaue Antwort darauf, warum sich die Ergebnisse so unterscheiden, können wir bisher nicht liefern.



## 6 KMS-Zustände und die 2-Punkt-Funktion des skalaren Feldes

In den vorigen Kapiteln haben wir die 2-Punkt-Funktion zu endlichen Temperaturen benutzt, diese erhalten wir durch die Bildung des Erwartungswertes des Produktes zweier Felder in KMS-Zuständen. Die Definition dieser Zustände und die Berechnung der 2-Punkt-Funktion des elektrischen Feldes soll Inhalt dieses Kapitels sein.

Zur Beschreibung der KMS-Zustände gehen wir von einer algebraisch formulierten Feldtheorie aus. Die physikalischen Observablen sind Elemente einer  $C^*$ -Algebra und Zustände sind positive, normierte, lineare Funktionale auf diesen. Die Zustände ordnen den Observablen eine Zahl zu, den Erwartungswert. Seien  $A, B$  zwei Observablen, wobei die Zeitentwicklung für  $B$  analytisch sein soll, dann muss ein KMS-Zustand<sup>11</sup>  $\omega$  zusätzlich die KMS-Bedingung

$$\omega(A\tau_t(B))|_{t=i\beta} = \omega(BA) \quad (6.1)$$

erfüllen. Wählen wir nun eine Algebra mit kanonischen Vertauschungsrelationen von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ( $[a(f), a^*(g)] = (f, g)$ ), so können wir zunächst den Erwartungswert von Produkten von diesen berechnen

$$\omega(a^*(f)a(g)) = \omega(a(g)a^*(e^{-\beta H}f)) = (g, e^{-\beta H}f) + \omega(a^*(e^{-\beta H}f)a(g)) \quad (6.2)$$

$$\Rightarrow \omega(a^*(f)a(g) - a^*(e^{-\beta H}f)a(g)) = (g, e^{-\beta H}f). \quad (6.3)$$

Unter Benutzung von  $f' = (1 - e^{-\beta H})f$  folgt

$$\omega(a^*(f')a(g)) = (g, e^{-\beta H} (1 - e^{-\beta H})^{-1} f').$$

Umbenennung führt dann auf

$$\omega(a^*(f)a(g)) = (g, e^{-\beta H} (1 - e^{-\beta H})^{-1} f) \quad (6.4)$$

$$= (g, \frac{1}{2} \left( \coth \left( \frac{\beta H}{2} \right) + 1 \right) f). \quad (6.5)$$

Analog erhält man

$$\omega(a(g)a^*(f)) = (f, e^{\beta H} (-1 + e^{\beta H})^{-1} g) \quad (6.6)$$

$$= (f, \frac{1}{2} \left( \coth \left( \frac{\beta H}{2} \right) - 1 \right) g). \quad (6.7)$$

Das skalare Feld definieren wir wie üblich als operatorwertige Distribution

$$\phi(f) = a(f) + a^*(f) \quad (6.8)$$

<sup>11</sup>für eine genauere Beschreibung und viele Anwendungen sei insbesondere auf [8] verwiesen.

und erklären es in einem formalen Sinne punktweise über

$$a(f) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2E(p)} a(p) \overline{f(\mathbf{p})}, \quad (6.9a)$$

$$a^*(f) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2E(p)} a^*(p) f(\mathbf{p}), \quad (6.9b)$$

$$a(x) = (2\pi)^{-3/2} \int \frac{d^3p}{2E(\mathbf{p})} e^{-ipx} a(p), \quad (6.9c)$$

$$a^*(x) = (2\pi)^{-3/2} \int \frac{d^3p}{2E(\mathbf{p})} a^*(p) e^{ipx}, \quad (6.9d)$$

$$\phi(x) = a(x) + a^*(x), \quad (6.9e)$$

mit der Energie  $E(\mathbf{p}) = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$ . Nun haben wir alles, um die 2-Punkt-Funktion des massiven, skalaren Feldes auszurechnen, deren Masse-Null-Grenzfall wir in den Rechnungen der letzten Kapitel nutzten

$$\begin{aligned} \Delta_\beta(f, g) &= \left( \Omega, \phi(f) \phi(g) \Omega \right)_{KMS} \\ &= \left( \Omega, (a(f) + a^*(f)) (a(g) + a^*(g)) \Omega \right)_{KMS} \\ &= \left( \Omega, a(f) a^*(g) \Omega \right)_{KMS} + \left( \Omega, a^*(f) a(g) \Omega \right)_{KMS} \\ &= \left( \Omega, a^*(g) a(e^{itH} f) \Omega \right)_{KMS} \Big|_{t=i\beta} + \left( g, e^{-\beta E(\mathbf{p})} \left( 1 - e^{-\beta E(\mathbf{p})} \right)^{-1} f \right) \\ &= \left( e^{-\beta E(\mathbf{p})} \left( 1 - e^{-\beta E(\mathbf{p})} \right)^{-1} e^{itE(\mathbf{p})} f, g \right)_{t=i\beta} + \left( g, e^{-\beta E(\mathbf{p})} \left( 1 - e^{-\beta E(\mathbf{p})} \right)^{-1} f \right) \\ &= \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2E(\mathbf{p})} \overline{e^{itE(\mathbf{p})} f(p)} e^{-\beta E(\mathbf{p})} \left( 1 - e^{-\beta E(\mathbf{p})} \right)^{-1} g(p) \Big|_{t=i\beta} \\ &\quad + \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2E(\mathbf{p})} e^{-\beta E(\mathbf{p})} \left( 1 - e^{-\beta E(\mathbf{p})} \right)^{-1} f(p) \overline{g(p)} \\ &= \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2E(\mathbf{p})} \left( 1 - e^{-\beta E(\mathbf{p})} \right)^{-1} \overline{f(p)} g(p) \\ &\quad + \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2E(\mathbf{p})} e^{-\beta E(\mathbf{p})} \left( 1 - e^{-\beta E(\mathbf{p})} \right)^{-1} f(p) \overline{g(p)} \\ &= \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2E(\mathbf{p})} \frac{\overline{f(p)} g(p)}{1 - e^{-\beta E(\mathbf{p})}} + \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2E(\mathbf{p})} \frac{f(p) \overline{g(p)}}{e^{\beta E(\mathbf{p})} - 1}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Einsetzen der fouriertransformierten Testfunktionen führt zu

$$\Delta_\beta(f, g) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^4x \int d^4y \left( \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2E(\mathbf{p})} \frac{e^{-ip(x-y)} f(x) \overline{g(y)}}{1 - e^{-\beta E(\mathbf{p})}} + \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2E(\mathbf{p})} \frac{e^{ip(x-y)} f(x) \overline{g(y)}}{e^{\beta E(\mathbf{p})} - 1} \right). \quad (6.11)$$

Also lautet die 2-Punkt-Funktion des massiven, skalaren Feldes zur inversen Temperatur  $\beta$

$$\Delta_\beta(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2E(\mathbf{p})} \left( \frac{e^{-ip(x-y)}}{1 - e^{-\beta E(\mathbf{p})}} + \frac{e^{ip(x-y)}}{e^{\beta E(\mathbf{p})} - 1} \right). \quad (6.12)$$

Im Masse-Null-Fall bestimmt sich die 2-Punkt-Funktion zu

$$D_\beta(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2|\mathbf{p}|} \left( \frac{e^{-ip(x-y)}}{1 - e^{-\beta|\mathbf{p}|}} + \frac{e^{ip(x-y)}}{e^{\beta|\mathbf{p}|} - 1} \right). \quad (6.13)$$

Die algebraische Formulierung der Feldtheorie ermöglicht es, auch für klassische Feldtheorie KMS-Zustände zu erklären. Wir wollen dies im Folgenden machen um die Hochtemperatur-Näherungen der Vakuum-Kräfte klassisch zu berechnen.

## 7 Klassische KMS-Zustände und klassische Vakuum-Kräfte

Ziel dieses Abschnittes ist es, KMS-Zustände in der klassischen statistischen Physik zu definieren, um die 2-Punkt-Funktion des klassischen elektrischen Feldes bei endlicher Temperatur zu berechnen. Mit Hilfe dieser können wir dann die CP- und die Van-der-Waals-Kraft im Grenzfall großer Temperaturen rein klassisch berechnen.

Auch in der klassischen statistischen Physik können wir Zustände als positive, normierte, lineare Funktionale auf einer Observablen-Algebra verstehen. In diesem Zusammenhang wird oft von Erwartungswertfunktionalen gesprochen. Einen KMS-Zustand definieren wir wieder über die KMS-Bedingung (6.1), welche im klassischen Grenzfall zur klassischen KMS-Bedingung wird

$$\beta\omega(A, \{H, B\}) = \omega(\{A, B\}). \quad (7.1)$$

Für eine detaillierte Beschreibung der klassischen KMS-Zustände und dem Zusammenhang mit den Ensemble-Theorien sei z.B. auf [35] und insbesondere auf die Referenzen darin verwiesen.

### 7.1 Die klassische 2-Punkt-Funktion zu endlicher Temperatur

Wir wollen nun, ausgehend von der klassischen KMS-Bedingung, die klassische 2-Punkt-Funktion berechnen. Mit Hilfe dieser können wir dann das CP-Potential und das Van-der-Waals-Potential für große Temperaturen berechnen. Da die 2-Punkt-Funktion eine Funktion der Differenzvariablen ist, können wir die klassische KMS-Bedingung schreiben als

$$\langle \{\phi(x_1), \phi(x_2)\} \rangle_{\text{cl}} |_{t_1=0} = \beta \langle \phi(x_2) \{ \phi(\mathbf{x}_1, 0), H \} \rangle_{\text{cl}}. \quad (7.2)$$

Der Ausdruck ist im Sinne von Distributionen zu verstehen. Da die Poisson-Klammer von  $\phi(x_1)$  mit der Hamiltonfunktion die zeitliche Ableitung von  $\phi(x_1)$  beschreibt, ist dies eine lineare, inhomogene Differentialgleichung erster Ordnung für die klassische 2-Punkt-Funktion, welche wir durch Integration lösen möchten:

$$\partial_{t_1} \langle \phi(x_1) \phi(x_2) \rangle_{\text{cl}} |_{t_1=0} = -\frac{1}{\beta} \langle \{ \phi(\mathbf{x}_1, 0), \phi(x_2) \} \rangle_{\text{cl}}, \quad (7.3)$$

wobei die linke Seite die Ableitung nach der Zeit von der klassischen, temperaturabhängigen 2-Punkt-Funktion  $D_\beta^{\text{cl}}$  und die rechte Seite des Ausdrucks die klassische Kommutator-Funktion (Poisson-Klammer-Funktion)

$$\Delta_\beta^{\text{cl}}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4\pi} \frac{\delta(t - |\mathbf{x}|) - \delta(t + |\mathbf{x}|)}{|\mathbf{x}|} \quad (7.4)$$

ist. Führen wir das Integral über die Zeit in (7.3) aus, erhalten wir

$$D_\beta^{\text{cl}}(\mathbf{x}, t) = D_\beta^{\text{cl}}(\mathbf{x}, 0) - \frac{1}{4\pi\beta|\mathbf{x}|} (\Theta(|\mathbf{x}| - t) - \Theta(|\mathbf{x}| + t)). \quad (7.5)$$

Die klassische masselose skalare 2-Punkt-Funktion ist also bis auf den Term  $D_\beta^{\text{cl}}(\mathbf{x}, 0)$ , welchen wir auf Grund der Nichteindeutigkeit der KMS-Zustände erhalten haben, bestimmt. Wählen wir diesen zu 0, erhalten wir

$$D_\beta^{\text{cl}}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{4\pi\beta|\mathbf{x}|} (\Theta(|\mathbf{x}| - t) - \Theta(|\mathbf{x}| + t)). \quad (7.6)$$

Wir haben also die klassische 2-Punkt-Funktion gefunden. Mit Hilfe dieser können wir nun das CP- und das Van-der-Waals-Potential berechnen.

## 7.2 Klassische Vakuumkräfte bei endlicher Temperatur

Bisher haben wir die Vakuumkräfte, wie die CP-Kraft, als reinen quantenfeldtheoretischen Effekt des Vakuums kennen gelernt. Wir haben jedoch festgestellt, dass die Kräfte bei hohen Temperaturen nicht mehr von  $\hbar$  abhängen und so als klassische Kräfte interpretiert werden müssen. Wir möchten dies nun bestätigen, indem wir die Kräfte zu hohen Temperaturen aus der klassischen statistischen Physik berechnen. Wir haben das CP-Potential als den abstandsabhängigen Teil der elektrostatischen Energie des Systems (polarisierbares Teilchen vor einer Wand) interpretiert. Dies möchten wir weiterhin tun, interpretieren dabei jedoch den Erwartungswert der Energie in einem klassischen KMS-Zustand und nicht den quantenfeldtheoretischen Erwartungswert. Da der Erwartungswert der Energie proportional zur klassischen 2-Punkt-Funktion des elektrischen Feldes ist, erhalten wir das CP-Potential analog zu den Rechnungen in Kapitel 2 zu

$$V_{\text{CP}}(d) = 2\pi\alpha \times \sum_{i=1}^3 \langle F_{0i}(x)F_{0i}(y) \rangle_{\text{cl}} |_{x-y=(0,0,0,2d)^t}, \quad (7.7)$$

wobei die rechte Seite das Randwertproblem lösen muss und im Koinzidenzlimites ( $y \rightarrow x$ ) zu verstehen ist. Das Potential ergibt sich dann zu

$$\begin{aligned} V_{\text{CP}}(d) &= 2\pi i\alpha \left( (-\partial_0^2 + \partial_1^2)(-D_\beta^{\text{cl}}(x - Sy)) \right. \\ &\quad + (-\partial_0^2 + \partial_2^2)(-D_\beta^{\text{cl}}(x - Sy)) \\ &\quad \left. + (-\partial_0^2 + \partial_3^2)(+D_\beta^{\text{cl}}(x - Sy)) \right) |_{x-Sy=(0,0,0,2d)^t} \\ &= -\frac{\alpha}{4d^3\beta}, \end{aligned} \quad (7.8)$$

wobei wir den Anteil der Eins-Spiegelung bereits in (7.7) abgezogen haben (vergleiche Kapitel 2), da dieser nicht vom Abstand des Teilchens von der Platte abhängt und somit nur eine Konstante zum Potential beitragen würde. Dies entspricht wie erwartet dem Limes  $\hbar \rightarrow 0$  von (2.20) und dem CP-Potential für große Temperaturen (2.22).

Die Casimir-Kraft hat im Gegensatz zur CP-Kraft keinen klassischen Anteil bei endlicher Temperatur. Dies können wir sofort sehen, wenn wir im Summanden in (2.55)  $\hbar$  einführen ( $\beta \rightarrow \beta\hbar$  und die Multiplikation des gesamten Ausdrucks mit  $\hbar$ ) und den Limes  $\hbar \rightarrow 0$  bilden, da dann jeder einzelne Summand verschwindet. Gehen wir von der klassischen 2-Punkt-Funktion aus, sehen wir, dass die Zeitableitungen dieser verschwinden und somit auch die klassische Casimir-Kraft (vergleiche Kapitel 2.4). Die Casimir-Kraft hat also in Einklang mit der Erwartung aus der Quantentheorie keinen klassischen Anteil.

Das Van-der-Waals-Potential hat jedoch, genau wie das CP-Potential, einen klassischen Anteil bei endlicher Temperatur. Diesen berechnen wir wieder in 2. Ordnung Störungstheorie. Dazu entwickeln wir die Freie Energie des statistischen System bis in 2. Ordnung in der Kopplung  $\alpha_i$  und interpretieren den abstandsabhängigen Teil der freien Energie als das Van-der-Waals-Potential. Die Freie Energie lautet

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln(Z) = -\frac{1}{\beta} \ln \left( \int d\Omega e^{-\beta H} \right), \quad (7.9)$$

mit der Hamiltonfunktion (5.1), wobei die Normalordnung nun so zu interpretieren ist, dass wir die nicht vom Abstand der Atome abhängigen Anteile später weglassen. Entwickeln wir nach der Polarisierbarkeit  $\alpha$ , erhalten wir bis zur 2. Ordnung

$$F = \langle H_{\text{int}} \rangle_{\text{cl}} - \frac{\beta}{2} \left( \langle H_{\text{int}}^2 \rangle_{\text{cl}} - \langle H_{\text{int}} \rangle_{\text{cl}}^2 \right). \quad (7.10)$$

Da der Erwartungswert von  $H_{\text{int}}$  nicht vom Ort abhängt, erhalten wir das klassische Van-der-Waals-Potential aus dem abstandsabhängigen Anteil von

$$\begin{aligned} V_{\text{VdW}}^{\text{cl}}(r) &= -\frac{\beta}{2} \langle H_{\text{int}}^2(r) \rangle_{\text{cl}} \\ &= -\frac{16\pi^2\alpha_1\alpha_2\beta}{2 \cdot 4} \langle \mathbf{E}(0, \mathbf{x})^2 \cdot \mathbf{E}(0, \mathbf{y})^2 \rangle_{\text{cl}} |_{x-y=(0,0,0,d)^t}, \end{aligned} \quad (7.11)$$

mit  $r = |\mathbf{x} - \mathbf{y}|$ . Entwickeln wir die 4-Punkt-Funktion analog zum Quantenfall (siehe Kapitel 5) erhalten wir

$$\begin{aligned} V_{\text{VdW}}^{\text{cl}}(r) &= -\frac{16\pi^2\alpha_1\alpha_2\beta}{2} W_{0i0j}^{\text{cl}}(r) W_{0i0j}^{\text{cl}}(r) \\ &= -\frac{3\alpha_1\alpha_2}{\beta r^6}, \end{aligned} \quad (7.12)$$

wobei  $W_{0i0j}^{\text{cl}}$  die klassische 2-Punkt-Funktion des elektrischen Feldes ist. Diese erhalten wir, wenn wir in (2.5)  $D_{\beta}^{\text{cl}}(x)$  anstelle von  $D_+(x)$  einsetzen.

Es ist uns also gelungen, das CP-Potential, sowie das Van-der-Waals-Potential bei hohen Temperaturen im Rahmen einer klassischen Theorie zu berechnen. Die Ergebnisse stimmen mit denen aus der Quantentheorie im Limes  $\hbar \rightarrow 0$  überein. Wir müssen die Vakuum-Kräfte also als Summe aus Quantenfluktuationen und thermischen Fluktuationen verstehen. Die thermischen Fluktuationen sind in der quantenfeldtheoretischen Berechnung bereits enthalten, verschwinden jedoch im klassischen Limes nicht. Es könnte sich als sehr interessant herausstellen, andere Quantenphänomene bei endlicher Temperatur zu berechnen und deren klassische Limiten mit den entsprechenden Rechnungen aus einer algebraisch formulierten, klassischen statistischen Theorie zu vergleichen.

## 8 Zusammenfassung und Ausblick

Seitdem Casimir und Polder 1948 ihre Arbeit über die CP-Kraft und die Van-der-Waals-Kraft veröffentlicht haben, ist das Gebiet der durch Vakuum-Korrelationen hervorgerufenen Kräfte ein sehr aktives Gebiet der physikalischen Grundlagenforschung geworden. Gerade in den letzten beiden Jahrzehnten wurde viel zur Beschreibung der Quantenfeldtheorie in dielektrischen Medien, zur Berechnung der Kräfte in solchen und an dem Einfluss der Objekt-Geometrie auf diese Kräfte geforscht.

Wir haben im Rahmen einer algebraischen Formulierung der Quantenfeldtheorie die CP-Kraft eines als punktförmig genäherten, aber polarisierbaren Teilchens vor einem ideal leitenden Halbraum bei Temperatur Null und bei endlichen Temperaturen berechnet. Dabei benötigten wir nur die 2-Punkt-Funktion des elektrischen Feldes, da bei Benutzung dieses Ansatzes das CP-Potential proportional zu dieser ist. Im Falle  $T = 0$  erhielten wir die retardierte CP-Kraft, wie sie schon von Casimir und Polder im Jahre 1948 berechnet wurde. Der Fall, in welchem wir den Einfluss der Temperatur des elektrischen Hintergrundfeldes (experimentell entspricht dies der Temperatur der "off-resonanten Hintergrundstrahlung") berücksichtigt haben, liefert neue Ergebnisse und beschreibt den Übergang zwischen der Hochtemperatur-Näherung und dem Fall  $T = 0$ , welche wohlbekannt sind. Die Vermessung der Temperaturabhängigkeit der CP-Kraft in diesem Temperaturbereich wäre von großem experimentellen Interesse. Bei der Berechnung der CP-Kraft haben wir die Methode der Spiegelladungen benutzt, welche es uns ermöglicht hat, die CP-Kraft an einer statischen dielektrischen Grenzfläche zu berechnen. Anschließend konnten wir auch die Casimir-Kraft mit Hilfe der Methode der Spiegelladungen bei Temperatur Null und bei endlichen Temperaturen berechnen.

Wir haben dann ein kanonisch quantisiertes 1-Oszillator-Modell, welches in der Lage ist, inhomogene, dispersive, absorbierende Dielektrika zu beschreiben und erst im Jahre 2004 formuliert wurde, eingeführt. Im Rahmen dieses Modells konnten wir dann die 2-Punkt-Funktion des elektrischen Feldes berechnen und mit dieser, genau wie oben, die CP-Kraft eines Punkt-Teilchens angeben. Das Ergebnis beschreibt das CP-Potential eines Atoms mit frequenzabhängiger Polarisierbarkeit an einem dielektrischen Interface, bestehend aus dispersiven und absorbierenden Medien. Die Art der Beschreibung der Medien lässt sich darüber hinaus im Rahmen einer kanonisch quantisierten Erweiterung des 1-Oszillator-Modells auf anisotrope und magnetisierbare Medien erweitern. Zum Verständnis der in dieser Theorie eingeführten Absorption haben wir ein eindimensionales Beispiel angeführt.

Im Rahmen der algebraisch formulierten Quantenelektrodynamik konnten wir dann die Van-der-Waals-Kraft zwischen zwei polarisierbaren Punkt-Teilchen bei Temperatur Null und bei endlicher Temperatur, in 2. Ordnung Störungstheorie, berechnen. Zur Berechnung der Kraft haben wir wieder nur die 2-Punkt-Funktion des elektrischen Feldes benutzt. Wir konnten erstmals die Abhängigkeit der Van-der-Waals-Kraft von der Temperatur des elektromagnetischen Hintergrunds berechnen. Die Van-der-Waals-Kraft nimmt asymptotisch im Ort, bei  $T \neq 0$ , sowie asymptotisch in der Temperatur, linear mit der Temperatur zu. Eine experimentelle Bestätigung dieser Aussage ist zu erhalten, wenn wir die Abhängigkeit der Streulänge eines Bose-Einstein-Kondensats von der Temperatur des elektromagnetischen Hintergrunds messen, da die Streulänge direkt vom Van-der-Waals-Potential abhängt. Bei einer heutigen Messgenauigkeit für die Streulänge von etwa 1% und einem mittleren Abstand der Atome eines Bose-Einstein-Kondensats von 100nm müsste man jedoch Temperaturen von mehreren 1000 Kelvin realisieren, um diesen Effekt sichtbar zumachen. Da dies die Schmelztemperatur der benutzten Materialien übersteigt, ist der Effekt heute noch nicht messbar. Eine Möglichkeit,

den Effekt doch sichtbar zu machen, wäre es, die Dichte des Kondensats stark zu verringern um den mittleren Abstand der Atome in einen Bereich von  $\mu m$  zu bringen, dort wird der Effekt dann auch unterhalb von 1000 Kelvin sichtbar.

Das Verhalten der CP-Kraft sowie der Van-der-Waals-Kraft wird für große Temperaturen und/oder für große Abstände bei  $T > 0$  unabhängig von der Konstante  $\hbar$  und gleicht dem Limes  $\hbar \rightarrow 0$  der quantenfeldtheoretisch berechneten Kräfte. Diese Kräfte sollten also klassischen Ursprungs sein. Dies konnten wir im Rahmen einer algebraisch formulierten statistischen Feldtheorie bestätigen, in der wir mit den gleichen Methoden (dort jedoch klassisch) wie oben die selben Formeln für die Kräfte berechneten. Da wir auch dies wieder allein mit Hilfe der 2-Punkt-Funktion des elektrischen Feldes gemacht haben, stellt sich die Frage, ob wir nicht die Quantenfeldtheorie, in der wir die Erwartungswerte physikalischer Observablen immer mit Hilfe der 2-Punkt-Funktionen ausdrücken können, bei hohen Temperaturen als klassische temperaturabhängige Feldtheorie ansehen können. Ein Beweis auf Ebene der algebraischen Formulierungen wäre interessant und würde die Interpretation stützen, dass bei hohen Temperaturen die Quanten-Korrekturen gegen die thermischen Korrekturen vernachlässigt werden können.



## Anhang

### A Zusammenhang zwischen der normalgeordneten Feldenergie und der Kraft auf einen elektrisch neutralen Körper

In der gesamten Arbeit haben wir die normalgeordnete Feldenergie des Vakuums, welche bei Anwesenheit von Randbedingungen nicht verschwindet, als Potential der auf einen elektrisch neutralen Körper wirkenden Kraft angesehen. An dieser Stelle soll gezeigt werden, warum dies möglich ist.

Die klassische Elektrodynamik wird über die Maxwell-Gleichungen und die Lorentzkraft beschrieben. Die Gleichungen können wir aus der bekannten Lagrangedichte für das elektromagnetische Feld in Anwesenheit einer Punktladung  $a$

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - j_{\mu}A^{\mu} + \frac{\mathbf{P}_a^2}{2m_a} \quad (\text{A.1})$$

gewinnen, wenn wir minimale Kopplung fordern

$$\mathbf{p}_a \rightarrow \mathbf{p}_a - q_a \mathbf{A}(\mathbf{r}_a). \quad (\text{A.2})$$

Alternativ dazu können wir die Wechselwirkung des Teilchens mit dem elektromagnetischen Feld durch die multipolare Kopplung beschreiben. Dafür führen wir eine zu dem Teilchen gehörende Polarisation und Magnetisierung ein

$$\nabla \mathbf{P}_a(\mathbf{r}) = q_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a), \quad (\text{A.3})$$

$$\nabla \times \mathbf{M}_a(\mathbf{r}) = -q_a \dot{\mathbf{r}}_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) - \dot{\mathbf{P}}_a(\mathbf{r}) \quad (\text{A.4})$$

und beschreiben die Elektrodynamik wie in Anwesenheit von Dielektrika. Der Wechselwirkungsanteil der Lagrangedichte ist dann

$$\mathcal{L}_{ww} = \mathbf{P}_a \mathbf{E}^{\perp}(\mathbf{r}) + \mathbf{M}_a(\mathbf{r}) \mathbf{B}(\mathbf{r}), \quad (\text{A.5})$$

wobei  $\mathbf{E}^{\perp}(\mathbf{r})$  der transversale Anteil des elektrischen Feldes ist, also nicht der Teil, der durch das Teilchen  $a$  selbst erzeugt wird. In elektrischer Dipolnäherung<sup>12</sup> erhalten wir dann, in multipolarer Kopplung, für den Wechselwirkungs-Hamiltonoperator für ein statisches System eines elektrisch neutralen Atoms

$$H_{ww} = -\frac{1}{2} \mathbf{d} \mathbf{E}. \quad (\text{A.6})$$

Der induzierte Dipolmoment-Operator des Atoms (Körpers) ist in linearer Näherung  $\mathbf{d} = \alpha_0 \mathbf{E}$ . Dies ist der Ansatz, welchen wir für das Wechselwirkungspotential wählten, wir haben also, in 1. und 2. Ordnung Störungstheorie, mit der Wechselwirkung

$$H_{ww} = -\frac{1}{2} \alpha_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} \quad (\text{A.7})$$

---

<sup>12</sup>Für eine genauere Beschreibung der verschiedenen Kopplungen und der Dipolnäherung sei insbesondere auf [48] verwiesen.

gerechnet. Analog dazu hätten wir die Störungstheorie mit (A.6) betreiben können und später die lineare Polarisation  $\alpha$  definieren können. Vergleichen wir den Ansatz mit der Lorentzkraft-Dichte auf das elektrisch neutrale Atom

$$\mathbf{f}(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}) + \mathbf{j}(\mathbf{r}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}), \quad (\text{A.8})$$

sehen wir, dass für den statischen Fall

$$\rho(\mathbf{r}) = -\nabla \mathbf{P}(\mathbf{r}), \quad (\text{A.9})$$

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \mathbf{d}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a), \quad (\text{A.10})$$

die Lorentzkraft auf ein neutrales Atom in Dipolnäherung im Sinne von Erwartungswerten

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}_{Atom}) = -\nabla \langle \mathbf{dE}(\mathbf{r}) \rangle |_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_{Atom}} \quad (\text{A.11})$$

lautet. Wir sehen also, dass sich die Wechselwirkungsenergie und das Potential der Lorentzkraft in Dipolnäherung wie erwartet gleichen. Physikalisch gesehen sollte jedoch nur der Teil der Energie zum Potential beitragen, welcher direkt von der Position des Atoms relativ zu der Grenzfläche abhängt. Das Potential der Lorentzkraft ist also der ortsabhängige Teil der Energieänderung, welche durch die Randbedingungen verursacht wird. Dies entspricht genau dem Vakuum Erwartungswert der normalgeordneten Feldenergie.

## B Zur temperaturabhängigen 2-Punkt-Funktion

In diesem Teil des Anhangs möchten wir einige Konsistenzüberlegungen zu der in Kapitel 2.2 berechneten, temperaturabhängigen 2-Punkt-Funktion des elektromagnetischen Feldstärke-Tensors machen.

Für gleiche Zeiten muss diese mit der temperaturabhängigen, zeitgeordneten 2-Punkt-Funktion, welche wir allein aus der Periodizität (invariant gegenüber einer Zeittranslation von  $n \cdot i\beta, n \in \mathbb{Z}$ ) konstruieren können, übereinstimmen. Wir suchen also die 2-Punkt-Funktion, welche für  $T \rightarrow 0$  mit (2.8) übereinstimmt und die KMS-Bedingung erfüllt. Wir setzen die folgende Reihe an und sehen, dass diese nach Definition die geforderte Periodizitäts-Bedingung erfüllt

$$\begin{aligned} D_\beta(0, \mathbf{x}) &= \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} D_+(in\beta, \mathbf{x}) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} \frac{-1}{(4\pi^2|\mathbf{x}| + n^2\beta^2)} \\ &= -\frac{\coth\left(\frac{\pi|\mathbf{x}|}{\beta}\right)}{4\pi|\mathbf{x}|\beta} \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

und für  $t = 0$  mit (2.17) übereinstimmt, denn

$$\begin{aligned} D_\beta(t = 0, \mathbf{x}) &= -\frac{\coth\left(\frac{\pi(|\mathbf{x}|-0)}{\beta}\right) + \coth\left(\frac{\pi|\mathbf{x}+0|}{\beta}\right)}{8\pi|\mathbf{x}|\beta} \\ &= -\frac{\coth\left(\frac{\pi|\mathbf{x}|}{\beta}\right)}{4\pi|\mathbf{x}|\beta}. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Natürlich erhalten wir im Limes  $T \rightarrow 0$ , also für  $\beta \rightarrow \infty$ , die 2-Punkt-Funktion (2.8) zurück

$$D_{\beta=\infty}(x) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1 - e^{-\frac{4\pi|x|}{\beta}}}{4 \left( -1 + e^{-\frac{2\pi(|x|-t)}{\beta}} \right) \left( -1 + e^{-\frac{2\pi(|x|+t)}{\beta}} \right) \pi|x|\beta} = \frac{-1}{4\pi x^2}. \quad (\text{B.3})$$

## C Das Van-der-Waals-Potential in KMS-Störungstheorie

Bei der Berechnung des temperaturabhängigen Van-der-Waals-Potentials haben wir stationäre quantenmechanische Störungstheorie angewandt. Diese ist äquivalent zur Störungstheorie, welche sich speziell für KMS-Zustände entwickeln lässt<sup>13</sup>. Wir möchten an dieser Stelle am Beispiel der Van-der-Waals-Kraft zeigen, dass die Ansätze das gleiche Ergebnis liefern. Dafür führen wir zunächst die KMS-Störungstheorie ein:

Gegeben sei ein  $C^*$ - oder  $W^*$ -dynamisches System, das heißt eine entsprechende  $*$ -Algebra  $\mathfrak{A}$  mit der Zeitentwicklung

$$\tau_t(A) = U_t A U_t^*, \quad (\text{C.1})$$

$U_t = e^{itH}$  und dem Hamiltonoperator des Systems  $H$ . Das System sei mit der Störung  $P$  gestört, dann existiert für jeden KMS-Zustand  $\omega$  (zur inversen Temperatur  $\beta$  und der Symmetrie unter der Translation  $\tau$ ) ein gestörter Zustand  $\omega^P$  mit

$$\omega^P(A) = \frac{(\Omega^P, \pi_\omega(A)\Omega^P)}{(\Omega^P, \Omega^P)} \quad (\text{C.2})$$

und

$$\omega^P(A) = \Omega_\omega + \sum_{n \geq 1} (-1)^n \int_0^{\frac{\beta}{2}} ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 \dots \int_0^{s_{n-1}} ds_n \pi_\omega(\tau_{is_n}(P) \cdots \tau_{is_1}(P)) \Omega^P, \quad (\text{C.3})$$

wobei  $\pi_\omega(A)$  die GNS-Hilbertraum-Darstellung<sup>14</sup> von  $A \in \mathfrak{A}$  ist. Der Beweis dieser Aussage ist in [8] zu finden.

Wenden wir diese Formulierung der Störungstheorie nun an, um die temperaturabhängige Van-der-Waals-Kraft zu berechnen. Der Hamiltonoperator des Systems

$$H = \int d^3\mathbf{x} \left( \frac{:\mathbf{E}(\mathbf{x}, 0)^2:}{2} + \frac{:\mathbf{B}(\mathbf{x}, 0)^2:}{2} \right) \quad (\text{C.4})$$

wird also durch

$$P = \frac{(4\pi)^2}{2} \int d^3\mathbf{x} \left( \alpha_1^{ij}(0) : E_i(0, \mathbf{x}) E_j(0, \mathbf{r}_1) : \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{r}_1) \right. \\ \left. + \alpha_2^{nm}(0) : E_n(0, \mathbf{x}) E_m(0, \mathbf{r}_2) : \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{r}_2) \right) \quad (\text{C.5})$$

<sup>13</sup>Dieser Ansatz zur Störungstheorie lässt sich auf Zustände bestimmter Symmetrie anwenden, die KMS-Zustände sind ein Beispiel.

<sup>14</sup>Zur genaueren Beschreibung der GNS-Konstruktion sei auf [8] und den ersten Band davon verwiesen.

gestört. Die Normalordnung in den Ausdrücken sorgt dafür, dass wir wieder nur die Terme beachten müssen, die von Abstand der beiden Atome abhängen. Setzen wir den Ausdruck für das gestörte Vakuum (C.3) in (C.2) ein, erhalten wir zwei Terme der Form

$$- \int_0^{\frac{\beta}{2}} ds \frac{(\Omega_\omega, \pi_\omega(P) \pi_\omega(\tau_{is}(P)) \Omega_\omega)}{(\Omega^P, \Omega^P)}. \quad (\text{C.6})$$

In unterster Ordnung in den Polarisierbarkeiten entspricht der Integrand der 4-Punkt-Funktion des elektrischen Feldes und wir erhalten das Van-der-Waals-Potential aus

$$\begin{aligned} V_{\text{vdW}}^\beta(r) &= -4\pi\alpha_1 4\pi\alpha_2 \frac{1}{2 \cdot 2} \int_0^{\frac{\beta}{2}} ds 2 \cdot 2 W_{0i0j}^\beta(is - i\epsilon, r) W_{0i0j}^\beta(is - i\epsilon, r) \\ &= - \frac{1}{8r^6 \beta^5 \sinh^4\left(\frac{2\pi r}{\beta}\right)} \\ &\quad \left[ \left( 96\pi^4 \coth\left(\frac{\pi r}{\beta}\right) r^4 + 96\pi^4 \tanh\left(\frac{\pi r}{\beta}\right) r^4 + 64\pi^3 \beta r^3 - 24\pi\beta^3 r \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 8\pi\beta (4\pi^2 r^2 + 3\beta^2) \cosh\left(\frac{4\pi r}{\beta}\right) r + 3\beta^4 \sinh\left(\frac{8\pi r}{\beta}\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (32\pi^4 r^4 + 40\pi^2 \beta^2 r^2 - 6\beta^4) \sinh\left(\frac{4\pi r}{\beta}\right) \right) \right], \quad (\text{C.7}) \end{aligned}$$

das Integral haben wir mit Mathematica gelöst und dann den Limes  $\epsilon \rightarrow 0$  ausgeführt. Das Potential stimmt wie erwartet mit (5.7) überein.

## D Eine kleine Grenzwertbetrachtung

Wir möchten hier beweisen, dass wir in dem Ausdruck (2.57)

$$- \lim_{\beta \rightarrow \infty} 12 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\pi \cosh\left(\frac{2an\pi}{\beta}\right)}{4an\beta^3 \sinh^3\left(\frac{2an\pi}{\beta}\right)}$$

die Limes-Bildung mit der Summe vertauschen dürfen. Reduzieren wir den Ausdruck zunächst aufs Wesentliche

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cosh\left(\frac{an}{\beta}\right)}{an\beta^3 \sinh^3\left(\frac{an}{\beta}\right)} \equiv \lim_{\beta \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} f_N(\beta), \quad (\text{D.1})$$

mit  $f_N(\beta) = \sum_{n=1}^N \frac{\cosh\left(\frac{an}{\beta}\right)}{an\beta^3 \sinh^3\left(\frac{an}{\beta}\right)}$ . Um zu zeigen, dass wir die Limiten vertauschen dürfen, müssen wir zeigen, dass die Limiten  $\lim_{N \rightarrow \infty} f_N(\beta)$  bei festgehaltenen  $\beta$  und  $\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\beta \rightarrow \infty} f_N(\beta)$  existieren und dass mindestens einer der beiden Grenzwerte gleichmäßig ist. Die Existenz des zweiten Grenzwertes haben wir bereits in (2.57) gezeigt. Die Existenz des inneren Grenzwertes sehen wir sofort. Zu zeigen bleibt, dass der innere Grenzwert  $\lim_{N \rightarrow \infty} f_N(\beta)$  gleichmäßig ist, also die Reihe

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cosh(an)}{an \sinh^3(an)} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(\beta) \quad (\text{D.2})$$

gleichmäßig konvergiert. Dazu benutzen wir das Kriterium von Weierstraß, also dass die absolut konvergente Reihe (D.2) gleichmäßig konvergiert, wenn es eine konvergente Reihe  $\sum_{n=1}^{\infty} m_n$  mit nur positiven Gliedern  $m_n$  gibt, sodass  $a_n(\beta) \leq m_n$  für fast alle  $n \in \mathbb{N}$ . Da gilt

$$\begin{aligned}
\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cosh(an)}{an \sinh^3(an)} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-an} + e^{an}}{an (-e^{-an} + e^{an})^3} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \left| \frac{e^{-an} + e^{an}}{an (-e^{-an} + e^{an})^3} \right| \\
&\leq \sum_{n=1}^{\infty} \left| \frac{1 + e^{an}}{an (-1 + e^{an})^3} \right|, \quad a > 0 \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \left| \frac{2}{an (-1 + e^{an})^3} \right| + \sum_{n=1}^{\infty} \left| \frac{-1 + e^{an}}{an (-1 + e^{an})^3} \right| \tag{D.3} \\
&\leq \sum_{n=1}^{\infty} \left| \frac{2}{(an)^4} \right| + \sum_{n=1}^{\infty} \left| \frac{1}{(an)^3} \right| \\
&:= \sum_{n=1}^{\infty} m_n \\
&= \frac{2\zeta(4)}{a^4} + \frac{\zeta(3)}{a^3} \tag{D.4}
\end{aligned}$$

existiert eine konvergente Reihe  $\sum_{n=1}^{\infty} m_n$ . Wir dürfen die Summen in (D.3) auf Grund der Konvergenz nach (D.4) auseinander ziehen. Damit haben wir die Vertauschbarkeit des Limes und der Summe in (2.57) gezeigt.

## E Das Hopfield-Huttner-Barnett-Modell nach Welsch

Wir haben in dieser Diplomarbeit eine kanonisch quantisierte Elektrodynamik genutzt, welche ein 1-Oszillator-Modell für inhomogene, dispersive, absorbierende Medien beschreibt. Mit dieser war es uns möglich, die CP-Kraft an einem dielektrischen Interface zu berechnen. Dem Modell vom [44] geht eine Beschreibung eines absorbierenden und dispersiven Mediums von Huttner und Barnett [4] voraus, welches im Rahmen einer phänomenologischen Beschreibung von Welsch et al. (u.a. [50], [51], [40], [15], [24], [26], [11], [48], [10]) auf beliebige phänomenologisch vorgegebene dielektrische Medien (u.a. verstärkende oder nichtlineare Medien) erweitert wurde. Die Ergebnisse dieser Beschreibung konnten im Rahmen der von uns benutzen kanonischen Quantisierung bestätigt werden. Da die phänomenologische Beschreibung weitere Medien zulässt, möchten wir an dieser Stelle kurz auf diese eingehen.

Die phänomenologische Beschreibung (welche wir im Folgenden als HHB-Modell bezeichnen werden) geht nicht von einer Lagrangedichte aus, sondern definiert den Strom, welcher durch das elektrische Feld im Medium erzeugt wird. Dazu definieren wir zunächst einen Satz von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren über deren Vertauschungsrelationen

$$[f_i(\mathbf{r}, \omega), f_j^*(\mathbf{r}', \omega)] = \delta(\omega - \omega') \delta_{ij} \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \tag{E.1}$$

$$[f_i(\mathbf{r}, \omega), f_j(\mathbf{r}', \omega)] = 0 = [f_i^*(\mathbf{r}, \omega), f_j^*(\mathbf{r}', \omega)]. \tag{E.2}$$

Das elektrische Feld<sup>15</sup> verstehen wir dann als Lösung der Operator-Gleichung

$$\nabla \times \nabla \times \underline{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) - \omega^2 \epsilon(\mathbf{r}, \omega) \underline{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega \underline{\mathbf{j}}_N(\mathbf{r}, \omega), \quad (\text{E.3})$$

mit dem so ebenfalls definierten Strom

$$\underline{\mathbf{j}}_N(\mathbf{r}, \omega) = i\sqrt{\frac{\text{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega)}{\pi}} \mathbf{f}(\mathbf{r}, \omega). \quad (\text{E.4})$$

Diese Definitionen sind konsistent mit der in Kapitel 3 beschriebenen Theorie. Die dielektrische Funktion  $\epsilon(\mathbf{r}, \omega)$  muss von Außen vorgegeben werden, hat jedoch, abgesehen von kausalem Verhalten, keine weiteren Einschränkungen. Die zeitgleichen Vertauschungsrelationen

$$[E_i(\mathbf{r}), B_j(\mathbf{r}')] = -i\epsilon_{ijk} \partial_k^r \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{E.5})$$

der phänomenologischen Theorie gleichen denen des kanonisch quantisierten Modells (siehe [40]), wenn wir die üblichen Analytizitätseigenschaften der dielektrischen Funktion<sup>16</sup> fordern.  $\epsilon(\omega)$  sei eine analytische Funktion in der komplexen Frequenz  $\omega$ , ohne Nullstellen unterhalb der reellen Achse, für welche gelten soll

$$\epsilon(\omega) = \overline{\epsilon(-\omega)}, \quad (\text{E.6a})$$

$$\lim_{\omega \nearrow \infty} \epsilon(\omega) = 1, \quad (\text{E.6b})$$

$$\epsilon(\omega) \leq 0 \quad \text{für} \quad \omega \leq 0, \quad (\text{E.6c})$$

$$\epsilon(\omega) \in \mathbb{R} \wedge \epsilon(\omega) \geq 1 \forall \omega \in \mathbb{C}. \quad (\text{E.6d})$$

Die Erweiterung des Modells auf Medien, welche wir nicht mit der in Kapitel 3 beschriebenen Methode beschreiben können, soll Inhalt des nächsten Abschnitts sein.

### E.1 Quantenfeldtheorie in dielektrischen, magnetooptischen, nicht linearen und weiteren Medien

In Anhang E haben wir ein Quantisierungsschema kennen gelernt, welches konsistent mit dem aus Kapitel 3 ist, sich jedoch auf weitere Arten dielektrischer Medien erweitern lässt. Im Folgenden wird diese Erweiterung für verschiedene Medien beschrieben.

Für die Beschreibung von Kramers-Kronig-Dielektrika sind wir von den Lösungen der inhomogenen Wellengleichung ausgegangen und haben unsere Theorie durch den Strom und die operatorwertigen Maxwell-Gleichungen in Materie definiert. Der elektrische Feldstärke-Operator lautet dann im Einklang mit (3.40)

$$\underline{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega \int d^3r' \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \underline{\mathbf{j}}(\mathbf{r}', \omega), \quad (\text{E.7})$$

mit dem definierenden Strom

$$\underline{\mathbf{j}}_N(\mathbf{r}, \omega) = i\sqrt{\frac{\text{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega)}{\pi}} \mathbf{f}(\mathbf{r}, \omega). \quad (\text{E.8})$$

<sup>15</sup>Wir benutzen hier die Notation aus (1.10).

<sup>16</sup>siehe Anhang G

Ausgehend von dieser Darstellung möchten wir als erstes eine phänomenologische Erweiterung auf magnetisierbare Medien, welche mit der kanonischen Quantisierung aus [23] im Einklang ist, beschreiben. Zu diesem Zweck reicht es aus, den oben beschriebenen Ansatz naiv zu erweitern [11]. Definieren wir die Theorie nun über die operatorwertigen Maxwell-Gleichungen in Anwesenheit von Magnetfeldern ((1.5) und (1.6))

$$\underline{\mathbf{D}}(\mathbf{r}, \omega) = \underline{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) + \underline{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega), \quad (\text{E.9})$$

$$\underline{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, \omega) = \underline{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) - \underline{\mathbf{M}}(\mathbf{r}, \omega). \quad (\text{E.10})$$

Die Polarisierung und die Magnetisierung wählen wir analog zu der oben beschriebenen Vorschrift zu

$$\underline{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega) = (\epsilon(\mathbf{r}, \omega) - 1) \underline{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) + \underline{\mathbf{P}}_N(\mathbf{r}, \omega), \quad (\text{E.11})$$

$$\underline{\mathbf{M}}(\mathbf{r}, \omega) = (\kappa(\mathbf{r}, \omega) - 1) \underline{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, \omega) + \underline{\mathbf{M}}_N(\mathbf{r}, \omega), \quad (\text{E.12})$$

mit der magnetischen Permeabilität  $\kappa(\mathbf{r}, \omega)$ . Die den Greenschen Tensor definierende Wellengleichung ändert sich dann zu

$$[\nabla \times \kappa(\mathbf{r}, \omega) \nabla \times - \omega^2 \epsilon(\mathbf{r}, \omega)] G(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \omega) = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{s}). \quad (\text{E.13})$$

Den Strom definieren wir analog, wie oben, durch

$$\underline{\mathbf{j}}(\mathbf{r}, \omega) = \omega \sqrt{\frac{\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega)}{\pi}} \mathbf{f}_e(\mathbf{r}, \omega) + \nabla \times \sqrt{\frac{\mathbf{Im}\kappa(\mathbf{r}, \omega)}{\pi}} \mathbf{f}_m(\mathbf{r}, \omega), \quad (\text{E.14})$$

wobei die Operatoren  $\mathbf{f}_e(\mathbf{r}, \omega)$  und  $\mathbf{f}_m(\mathbf{r}, \omega)$  Vernichtungsoperatoren auf einem bosonischen Fockraum sind. Wir interpretieren die Teilchen des Fockraums als Elementaranregungen des Materie-Strahlungsfeldes, also analog wie oben, als Polaritonen und magnetischen Polaritonen. Die zeitgleichen Vertauschungsrelationen gelten weiterhin.

Eine weitere Anwendung des phänomenologischen Quantisierungsschemas ist die Beschreibung von Verstärker-Medien, also solchen Medien, bei denen in einigen Frequenzbereichen die Absorption  $\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega)$  negativ ist. Um dieses Material zu beschreiben, definieren wir nach [40] den Strom

$$\underline{\mathbf{j}}_N(\mathbf{r}, \omega) = \omega \sqrt{\frac{|\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega)|}{\pi}} [\Theta(\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega))\mathbf{f}(\mathbf{r}, \omega) + \Theta(-\mathbf{Im}\epsilon(\mathbf{r}, \omega))\mathbf{f}^*(\mathbf{r}, \omega)] \quad (\text{E.15})$$

und setzen diesen in die Definition des elektrischen Feldstärke-Operators ein. Der Ansatz erhält ebenfalls die Vertauschungsrelationen (E.5) und erfüllt nach Definition die operatorwertigen inhomogenen Maxwell-Gleichungen. Für die Behandlung anisotroper Medien, bei denen die dielektrische Funktion tensorwertig ist, ist die Wellengleichung zu diagonalisieren, um dann den Strom analog zu (E.8) zu definieren, wobei für die dielektrische Funktion die Hauptdiagonalelemente der jeweiligen Stromkomponente einzusetzen sind [40]. Die Vertauschungsrelationen werden wieder erfüllt.

Die Beschreibung von Medien, bei denen auch nichtlineare Polarisierungen zu beachten sind und die Absorption wie oben in einer Weise integriert ist, die die Vertauschungsrelationen erhält, ist in [41] zu finden. Eine Beschreibung im Rahmen des HHB-Modells von linkshändigen Medien ist in [15] nachzulesen.

## F Greensche Funktionen der makroskopischen Elektrodynamik

An dieser Stelle möchten wir uns die Greenschen Funktionen der klassischen Elektrodynamik etwas näher anschauen. Zunächst werden wir kurz das Prinzip der Greenschen Funktionen zur Lösung von Differentialgleichungen wiederholen und uns dann speziell den Greenschen Funktionen der klassischen makroskopischen Elektrodynamik unter Randbedingungen widmen.

Gegeben sei eine inhomogene Differentialgleichung der Form

$$Pf(t) = j(t), \quad (\text{F.1})$$

wobei P ein Differentialoperator sei. Lösen wir nun die Gleichung

$$Pg(t) = \delta(t), \quad (\text{F.2})$$

so erhalten wir eine Lösung der inhomogenen Gleichung durch

$$f_{inh}(t) = \int g(t-t')j(t')dt', \quad (\text{F.3})$$

da, bei Vertauschbarkeit des Differentialoperators mit dem Integral, gilt

$$Pf_{inh}(t) = P \int g(t-t')j(t')dt' = \int \delta(t-t')j(t')dt' = j(t). \quad (\text{F.4})$$



Diese Methode können wir benutzen um die inhomogenen Maxwell-Gleichungen zu lösen [22]. Die allgemeine Lösung der Gleichung (F.1) erhalten wir dann aus der Summe der inhomogenen Lösung und der allgemeinen Lösung der homogenen Gleichung. Haben wir zusätzliche Randwerte gegeben, kann man das Randwertproblem oft durch die geeignete Addition von homogenen Lösungen lösen [3]. Dabei ist es äquivalent, ob wir die Gleichung für die Greensche Funktion so lösen, dass die Faltung mit dieser das Randwertproblem löst, oder ob wir im Nachhinein homogene Lösungen der ursprünglichen Gleichung geeignet addieren.

Um schlussendlich die Greensche Funktion an einem dielektrischen Interface anzugeben, wie wir sie zur Berechnung des CP-Potential in Kapitel 4 benötigten, soll nun eine Diskussion der Greenschen Funktion der vollen elektrodynamischen Wellengleichung unter asymptotischen Randbedingungen folgen.

### F.1 Greensche Funktion der elektrodynamischen Wellengleichung und die Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingungen

Das elektrische Feld der makroskopischen Elektrodynamik ist eine Lösung der inhomogenen, vektorwertigen, elektrodynamischen Wellengleichung

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \epsilon(\mathbf{r}, t) \partial_t^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{j}(\mathbf{r}, t). \quad (\text{F.5})$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung können wir über die Methode der Greenschen Funktionen bestimmen. Da die Gleichung vektorwertig ist, ist die Greensche Funktion ein Tensor, welcher die Gleichung

$$\nabla \times \nabla \times G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \epsilon(\mathbf{r}, t) \partial_t^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \partial_t \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \mathbf{1} \quad (\text{F.6})$$

löst. Fourier-Transformieren wir die Gleichung in der Zeit, erhalten wir

$$\nabla \times \nabla \times G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - k^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{1}, \quad (\text{F.7})$$

mit  $k^2 = \omega^2 \epsilon(\mathbf{r}, \omega)$ . Die Fourier-Transformierte des elektrische Feldes erhalten wir dann über

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = i\omega \int d^3 \mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathbf{j}(\mathbf{r}'). \quad (\text{F.8})$$

Es gilt das folgende Theorem:

**Theorem F.1.** Sei  $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$  die Lösung der skalaren Helmholtz-Gleichung (siehe Abschnitt F.1.1) unter Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingungen zur Zeitabhängigkeit  $e^{-i\omega t}$ . Dann löst

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \left( \mathbf{1} - \frac{1}{k^2} \nabla \nabla \right) G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega), \quad (\text{F.9})$$

die Gleichung (F.7) unter den oben genannten Randbedingungen eindeutig.

Zum Beweis des Theorems schreiben wir (F.7) mit Hilfe des Vektor-Laplaceoperators

$$\Delta \mathbf{A} := \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) \quad (\text{F.10})$$

als

$$(\Delta + k^2 \mathbf{1}) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = - \left( \mathbf{1} - \frac{1}{k^2} \nabla_r \nabla_{r'} \right) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (\text{F.11})$$

Setzen wir (F.9) ein, erhalten wir die beiden Gleichungen

$$(\Delta + k^2) G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (\text{F.12})$$

$$(\nabla_r + \nabla_{r'}) G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = 0. \quad (\text{F.13})$$

$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$  ist also die Lösung der skalaren Helmholtz-Gleichung, abhängig von der Differenzvariablen  $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ , welche durch die Ausstrahlungsbedingungen eindeutig ist. Bestimmen wir nun die Funktion  $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ .

### F.1.1 Die skalare Helmholtz-Gleichung unter den Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingungen

Im vorigen Abschnitt haben wir die Greensche Funktion der Helmholtz-Gleichung benutzt, um die Greensche Funktion der vollen elektromagnetischen Wellengleichung zu bestimmen. Die Greensche Funktion soll nun berechnet und im Kontext der Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingungen diskutiert werden.

Die skalare Helmholtz-Gleichung in drei Dimensionen lautet

$$\Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (\text{F.14})$$

Die Lösungen der Differentialgleichung sind bekannterweise [22] die Kugelwellen

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')_{\pm} = \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (\text{F.15})$$

Die Frage, welche Lösung zu nehmen ist, beantworten die Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingungen in drei Dimensionen. Diese lauten abhängig von der Zeitentwicklung<sup>17</sup>  $e^{\pm i\omega t}$  des Systems

$$e^{-i\omega t} : \quad \lim R \rightarrow \infty \quad R(\partial_R G - ikG) = 0, \quad G_+ = \frac{e^{+ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (\text{F.16})$$

$$e^{i\omega t} : \quad \lim R \rightarrow \infty \quad R(\partial_R G - ikG) = 0, \quad G_+ = \frac{e^{-ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (\text{F.17})$$

Sie sind äquivalent zum Prinzip der verschwindenden Verluste, nach dem man die Integrationswege (bei Fourier-Transformation in  $\mathbf{k}$ ) der Greenschen Funktionen (F.15) wählt und welche die Forderung ausdrücken, dass in einem dispersiven Medium, also für komplexe  $k$ , die Welle abklingen soll. Für Zeitabhängigkeiten der Form  $e^{-i\omega t}$  haben wir also aus physikalischen Gründen die Greensche Funktion  $G_+$  zu wählen, anderenfalls  $G_-$ .

## F.2 Die Greensche Funktion der Wellengleichung an einer dielektrischen Grenzfläche

In diesem Abschnitt wird die Greensche Funktion der makroskopischen Elektrodynamik an einer dielektrischen Grenzfläche angegeben.

<sup>17</sup>Ausgehend von der Wellengleichung haben wir den Separationsansatz  $u(\mathbf{r}, t) = G(\mathbf{r})e^{\pm i\omega t}$  gemacht, von dieser Zeitabhängigkeit hängen nun die Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingungen ab.

Der Raum sei in zwei Halbräume  $V_1$  und  $V_2$  der Dielektrizitäten  $\epsilon_{1,2}(\omega)$  an der Ebene  $z = 0$  geteilt. Das Elektrische Feld im gesamten Raum ist dann

$$\mathbf{E}_i(\mathbf{r}, \omega) = i\omega \int d^3\mathbf{r}' G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) J_j(\mathbf{r}', \omega), \quad (\text{F.18})$$

wobei  $J_j(\mathbf{r}', \omega)$  der von der Polarisation hervorgerufene Strom ist. Die Greensche Funktion  $G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$  ist nach [25]

$$G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \begin{cases} G_{ij}^\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + R_{ij}^\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) & \text{für } \mathbf{r}, \mathbf{r}' \in V_\alpha, \\ T_{ij}^{\alpha, \alpha'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) & \text{für } \mathbf{r} \in V_\alpha, \mathbf{r}' \in V_{\alpha'}. \end{cases} \quad (\text{F.19})$$

Mit den folgenden Definitionen

$$G_{ij}^\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = [\partial_i^r \partial_j^r + \delta_{ij} q_\alpha^2(\omega)] q_\alpha^{-2}(\omega) g^\alpha(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, \omega), \quad (\text{F.20})$$

$$g^\alpha(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, \omega) = \frac{e^{iq_\alpha(\omega)|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (\text{F.21})$$

$$q_\alpha^2 = q_\alpha^2(\omega) = \omega^2 \epsilon_\alpha(\omega), \quad (\text{F.22})$$

$$G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \int \frac{d^2\mathbf{k}_\parallel}{(2\pi)^2} G_{ij}(\mathbf{k}_\parallel, \omega; z, z') e^{i\mathbf{k}_\parallel(\mathbf{r}_\parallel - \mathbf{r}'_\parallel)}, \quad (\text{F.23})$$

$$R_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \int \frac{d^2\mathbf{k}_\parallel}{(2\pi)^2} R_{ij}(\mathbf{k}_\parallel, \omega; z, z') e^{i\mathbf{k}_\parallel(\mathbf{r}_\parallel - \mathbf{r}'_\parallel)}, \quad (\text{F.24})$$

$$T_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \int \frac{d^2\mathbf{k}_\parallel}{(2\pi)^2} T_{ij}(\mathbf{k}_\parallel, \omega; z, z') e^{i\mathbf{k}_\parallel(\mathbf{r}_\parallel - \mathbf{r}'_\parallel)}, \quad (\text{F.25})$$

$$R_{xx}^\alpha = \frac{i}{2\beta_\alpha} e^{i\beta_\alpha(|z|+|z'|)} \left[ \frac{r_{\alpha\alpha'}^p}{q_\alpha^2} \left( -\beta_\alpha^2 \frac{k_x^2}{k_\parallel^2} \right) + r_{\alpha\alpha'}^s \frac{k_y^2}{k_\parallel^2} \right], \quad (\text{F.26})$$

$$R_{xy}^\alpha = \frac{i}{2\beta_\alpha} e^{i\beta_\alpha(|z|+|z'|)} \left[ \frac{r_{\alpha\alpha'}^p}{q_\alpha^2} \left( -\beta_\alpha^2 \frac{k_x k_y}{k_\parallel^2} \right) + r_{\alpha\alpha'}^s \frac{k_y k_y}{k_\parallel^2} \right], \quad (\text{F.27})$$

$$R_{xz}^\alpha = \frac{i}{2\beta_\alpha} e^{i\beta_\alpha(|z|+|z'|)} \frac{r_{\alpha\alpha'}^p}{q_\alpha^2} [-\text{sign}(z') \beta_\alpha k_x], \quad (\text{F.28})$$

$$R_{yx}^\alpha = R_{xy}^\alpha, \quad R_{yy}^\alpha = R_{xx}^\alpha(k_x \leftrightarrow k_y), \quad R_{yz}^\alpha = R_{xz}^\alpha(k_x \leftrightarrow k_y), \quad (\text{F.29})$$

$$R_{zx}^\alpha = -R_{xz}^\alpha, \quad R_{zy}^\alpha = -R_{yz}^\alpha, \quad (\text{F.30})$$

$$R_{zz}^\alpha = \frac{i}{2\beta_\alpha} e^{i\beta_\alpha(|z|+|z'|)} \frac{r_{\alpha\alpha'}^p}{q_\alpha^2} k_\parallel^2, \quad (\text{F.31})$$

$$T_{xx}^{\alpha\alpha'} = \frac{i}{2\beta_\alpha} e^{i(\beta_\alpha|z|+\beta_{\alpha'}|z'|)} \left[ \frac{t_{\alpha\alpha'}^p}{q_\alpha q_{\alpha'}} \beta_\alpha \beta_{\alpha'} \frac{k_x^2}{k_\parallel^2} + t_{\alpha\alpha'}^s \frac{k_y^2}{k_\parallel^2} \right], \quad (\text{F.32})$$

$$T_{xy}^{\alpha\alpha'} = \frac{i}{2\beta_\alpha} e^{i(\beta_\alpha|z|+\beta_{\alpha'}|z'|)} \left[ \frac{t_{\alpha\alpha'}^p}{q_\alpha q_{\alpha'}} \beta_\alpha \beta_{\alpha'} \frac{k_x k_y}{k_\parallel^2} - t_{\alpha\alpha'}^s \frac{k_x k_y}{k_\parallel^2} \right], \quad (\text{F.33})$$

$$T_{xz}^{\alpha\alpha'} = \frac{i}{2\beta_\alpha} e^{i(\beta_\alpha(z+\beta_{\alpha'}|z'|)} \frac{t_{\alpha\alpha'}^p}{q_\alpha q_{\alpha'}} \text{sign}(z') \beta_{\alpha'} k_x, \quad (\text{F.34})$$

$$T_{zx}^{\alpha\alpha'} = \frac{i}{2\beta_\alpha} e^{i(\beta_\alpha(z+\beta_{\alpha'}|z'|)} \frac{t_{\alpha\alpha'}^p}{q_\alpha q_{\alpha'}} \text{sign}(z') \beta_{\alpha'} k_x, \quad (\text{F.35})$$

$$T_{yx}^{\alpha\alpha'} = T_{xy}^{\alpha\alpha'}, \quad T_{yy}^{\alpha\alpha'} = T_{xx}^{\alpha\alpha'}(k_x \leftrightarrow k_y), \quad T_{yz}^{\alpha\alpha'} = T_{xz}^{\alpha\alpha'}(k_x \leftrightarrow k_y), \quad (\text{F.36})$$

$$T_{zy}^{\alpha\alpha'} = -T_{zx}^{\alpha\alpha'}(k_x \leftrightarrow k_y), \quad (\text{F.37})$$

$$T_{zz}^{\alpha\alpha'} = \frac{i}{2\beta_\alpha} e^{i(\beta_\alpha(z|\beta_{\alpha'}|z'))} \frac{t_{\alpha\alpha'}^p}{q_\alpha q_{\alpha'}} k_{\parallel}^2, \quad (\text{F.38})$$

$$\beta_\alpha = \beta_\alpha(\omega) = \sqrt{q_\alpha^2(\omega) - k_{\parallel}^2}, \quad (\text{F.39})$$

$$r_{\alpha\alpha'}^{s,p} = \frac{\beta_\alpha - \gamma_{\alpha\alpha'}^{s,p} \beta_{\alpha'}}{\beta_\alpha + \gamma_{\alpha\alpha'}^{s,p} \beta_{\alpha'}} = -r_{\alpha'\alpha}^{s,p}, \quad (\text{F.40})$$

$$\gamma_{\alpha\alpha'}^p = \frac{\epsilon_\alpha}{\epsilon_{\alpha'}}, \quad \gamma_{\alpha\alpha'}^s = 1, \quad (\text{F.41})$$

$$t_{\alpha\alpha'}^{s,p} = \sqrt{\gamma_{\alpha\alpha'}^{s,p}} (1 + r_{\alpha\alpha'}^{s,p}) \frac{\beta_\alpha}{\beta_{\alpha'}} t_{\alpha\alpha'}^{s,p}, \quad (\text{F.42})$$

$$\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, k_y, 0)^t. \quad (\text{F.43})$$

## G Kausalität, Antwortfunktionen und die Kramers-Kronig-Relationen

In diesem Kapitel möchten wir verdeutlichen, welche Eigenschaften wir aus dem philosophisch erforderlichen und in der Relativitätstheorie manifest verankerten Axiom der Kausalität ziehen können: „Die Ursache kann nicht nach der Wirkung geschehen“ oder „keine Information kann sich schneller als mit Lichtgeschwindigkeit ausbreiten“. In der axiomatischen Quantenfeldtheorie lässt sich das Axiom wie folgt in die Sprache der Physik übersetzen: Seien  $A$  und  $B$  zwei Observablen auf dem Minkowski-Raum, so muss der Kommutator der beiden Observablen für raumartig getrennte Punkte verschwinden.

$$[A(x), B(y)] = 0 \quad \text{für } (x - y)^2 < 0. \quad (\text{G.1})$$

Dies nennen wir die Mikro-Kausalität. Eine andere Formulierung der Kausalität gelingt über Abhängigkeiten physikalischer Größen von der Zeit. Diese werden wir benutzen, um uns Eigenschaften der dielektrischen Funktion zu erarbeiten. Sei beispielsweise die dielektrische Verschiebung gegeben als

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \xi(\mathbf{x}, t') \mathbf{E}(\mathbf{x}, t'), \quad (\text{G.2})$$

so darf die dielektrische Verschiebung  $\mathbf{D}(\mathbf{x}, t)$  nicht von Zeitpunkten  $t' > t$  abhängen. Mit anderen Worten

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^t dt' \xi(\mathbf{x}, t') \mathbf{E}(\mathbf{x}, t'). \quad (\text{G.3})$$

Wäre dem nicht so, so würde die Zukunft die Gegenwart beeinflussen und das widerspricht dem Axiom der Kausalität. Verallgemeinern wir an dieser Stelle die oben getroffene Aussage: Sei

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' g(t, t') f(t') \quad (\text{G.4})$$

eine dynamische physikalische Größe welche von  $f(t)$  über die Antwort-Funktion  $g(t, t')$  abhängt.  $x(t)$  ist also ein lineares Funktional über dem Raum möglicher Inputs  $f(t)$ . Denken wir hier an das Beispiel von oben, so ist  $f(t)$  das elektrische Feld,  $x(t)$  die dielektrische Verschiebung und  $g(t, t')$  die dielektrische Funktion. Im Allgemeinen sind die Größen  $f(t)$ ,  $g(t, t')$  und  $x(t)$  Distributionen und wir müssen uns Gedanken über die Existenz des Produktes  $g(t, t')f(t')$  machen. Nehmen wir jedoch zunächst an, dass wir es nur mit Funktionen zu tun haben, um die Aussagen, die wir treffen werden, später zu verallgemeinern.

Das physikalische System soll invariant gegenüber Zeittranslationen sein, dies bedeutet für die Antwort-Funktion  $g(t, t')$ , dass sie nur von der Differenzvariablen abhängen kann. Es gilt also

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' g(t - t') f(t') = g(t) * f(t). \quad (\text{G.5})$$

Im Falle von Distributionen müssen wir uns an dieser Stelle Gedanken über die Existenz der Faltung machen. Dies soll später geschehen. Existieren die Fourier-Transformierten von  $f(t)$ ,  $g(t - t')$  und  $x(t)$ ,  $F(\omega)$ ,  $G(\omega)$  und  $X(\omega)$ , folgt

$$X(\omega) = g(\omega)F(\omega). \quad (\text{G.6})$$

Kausalität nach (G.3) fordert, dass die Antwort-Funktion in der Differenzvariablen nur Träger für  $t > 0$  hat. Damit ist die Fourier-Transformierte gegeben als

$$G(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} e^{i\omega t'} g(t') dt' \quad (\text{G.7})$$

und es existiert eine analytische Fortsetzung auf die obere komplexe Halbebene, da das Integral

$$G(\omega) = G(\omega_R + i\omega_I) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} e^{i\omega_R t'} e^{-\omega_I t'} g(t') dt' \quad (\text{G.8})$$

für  $\omega_I > 0$  existiert.

Nehmen wir an, dass  $G(\omega) \in L^2(\mathbb{R})$ , können wir die **Kramers-Kronig-Relationen** für diese Klasse von Antwortfunktionen beweisen

$$\text{Re}G(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im}G(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega', \quad (\text{G.9a})$$

$$\text{Im}G(\omega) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Re}G(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (\text{G.9b})$$

Bei diesen und den folgenden Beweisen werden wir uns eng an [34] halten. Zum Beweis der obigen Aussage zeigen wir zunächst, dass  $G(\omega) \in L^2(\mathbb{R})$  impliziert, dass  $G(\omega)$  auch auf jeder Geraden parallel zur reellen Achse, in der obere komplexen Halbebene gelegen, quadratintegabel ist. Sei

$$\int_{-\infty}^{\infty} |G(\omega)|^2 d\omega < C, \quad (\text{G.10})$$

dann ist

$$\int_0^{\infty} |g(t)|^2 dt < \frac{C}{\sqrt{2\pi}}. \quad (\text{G.11})$$

Nach Parsevals Theorem folgt dann

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |G(\omega_R + i\omega_I)|^2 d\omega_R &= \sqrt{2\pi} \int_0^{\infty} e^{-2\omega_I t} |g(t)|^2 dt \\ &< \sqrt{2\pi} \int_0^{\infty} |g(t)|^2 dt && \omega_I > 0 \\ &= C && \omega_I > 0. \end{aligned}$$

Insbesondere folgt auch, dass

$$\lim_{\omega_R \rightarrow \pm\infty} G(\omega_R + i\omega_I) = 0 \quad \omega_I \geq 0. \quad (\text{G.12})$$

Nun können wir die Cauchysche Integralformel anwenden

$$G(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \frac{G(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega', \quad (\text{G.13})$$

wobei der Weg  $\gamma$  wie in Abbildung (11) gewählt sei. Die Integrale über die rechte und die linke

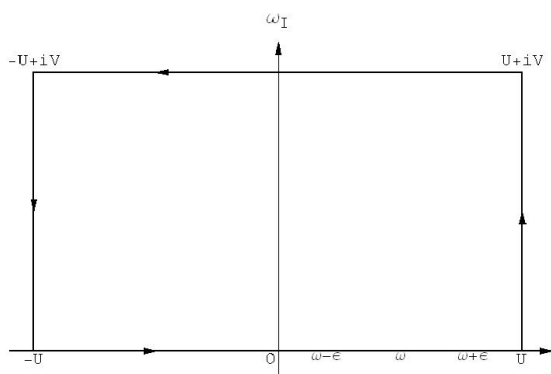


Abbildung 11: Kontur  $\gamma$

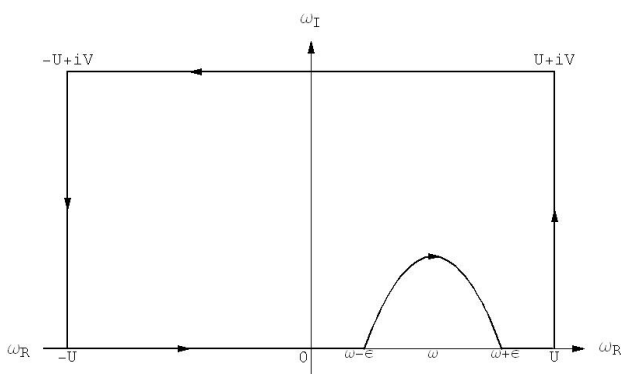


Abbildung 12: Kontur  $\gamma_2$

Seite des Rechtecks verschwinden, wie wir an der folgenden Überlegung sehen

$$\begin{aligned} &\left| \int_0^V \frac{G(U + iv) dv}{U + iv - \omega_R - i\omega_I} \right| \\ &\leq \max_{0 \leq v \leq V} |G(U + iv)| \int_0^V \frac{dv}{\left[ (U - \omega_R)^2 + (v - \omega_I)^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \\ &= \max_{0 \leq v \leq V} |G(U + iv)| \ln \left| \frac{V - \omega_I + \left[ (U - \omega_R)^2 + (V - \omega_I)^2 \right]^{\frac{1}{2}}}{\left[ (U - \omega_R)^2 + \omega_I^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \right| \rightarrow 0 \quad U \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Das Integral über das obere Wegstück verschwindet auch, wie sich sehen lässt, wenn wir nach dem Ausführen des Limes  $U \rightarrow \infty$  die Cauchy-Schwarzsche-Ungleichung benutzen

$$\begin{aligned} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(u + iV) du}{u + iV - \omega_R - i\omega_I} \right|^2 &\leq \int_{-\infty}^{\infty} |G(u + iV)|^2 du \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{(u - \omega_R)^2 + (V - \omega_I)^2} \\ &\stackrel{(\text{G.11})}{\leq} \frac{\sqrt{\pi}}{V - \omega_I} \rightarrow 0 \quad \text{für } V \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Wir erhalten also die Fourier-Transformierte der Antwort-Funktion durch das Integral

$$G(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad \mathbf{Im}\omega > 0. \quad (\text{G.14})$$

Mit anderen Worten:  $G(\omega)$  ist für  $\mathbf{Im}\omega > 0$  vollständig durch ihre Werte auf der reellen Achse bestimmt. Um  $G(\omega)$  auf der reellen Achse zu berechnen, müssen wir den Weg  $\gamma_2$  (Abbildung 12) wählen. Die Seiten und der obere Teil verschwinden wie oben. Das Residuum trägt zur Hälfte bei und es folgt

$$0 = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma_2} \frac{G(\omega') d\omega'}{\omega' - \omega} = \frac{1}{2\pi i} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \int_{-\infty}^{\omega - \epsilon} + \int_{\omega + \epsilon}^{\infty} \right) \frac{G(\omega') d\omega'}{\omega' - \omega} - \frac{G(\omega)}{2}.$$

Für reelle  $\omega$  erhalten wir also

$$G(\omega) = \frac{1}{\pi i} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(\omega') d\omega'}{\omega' - \omega}. \quad (\text{G.15})$$

Bildung des Real- und Imaginärteils liefert die Kramers-Kronig-Relationen (G.9). Der Sachverhalt lässt sich präzise in dem *Theorem von Titchmarsh* zusammenfassen:

**Theorem G.1.** *Gegeben sei eine quadratintegrale Funktion  $G(\omega)$ . Dann sind folgende Aussagen äquivalent:*

1. Für die Fourier-Transformierte von  $G(\omega)$  gilt

$$g(t) = 0 \quad t < 0.$$

2.  $\lim_{\omega_I \rightarrow 0} G(\omega_R + i\omega_I)$  ist für fast alle  $\omega_R$  Randwert einer analytischen Funktion, welche holomorph in der oberen Halbebene ist und quadratintegabel auf Parallelen zur reellen Achse

$$\int_{-\infty}^{\infty} |G(\omega_R + i\omega_I)|^2 d\omega_R < C \quad \omega_I > 0, C \in \mathbb{R}.$$

3. Es gilt die Kramers-Kronig-Relation für den Realteil

$$\mathbf{Re}G(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathbf{Im}G(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'.$$

4. Es gilt die Kramers-Kronig-Relation für den Imaginärteil

$$\mathbf{Im}G(\omega) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathbf{Re}G(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'.$$

Der Beweis des Theorems ist beispielsweise bei Titchmarsh selbst nachzulesen [46].

Bisher haben wir angenommen, dass  $G(\omega)$  eine quadratintegrale Funktion ist. Dies ist allerdings nicht der allgemeinste Fall, wir können die Bedingung abschwächen und zugleich unsere Aussagen auf Distributionen erweitern.

Zunächst lässt sich die Annahme, dass  $G(\omega)$  quadratintegrabel ist, dadurch ersetzen, dass  $G(\omega)$  beschränkt ist. Um dann trotzdem noch einen kausalen Zusammenhang zu beschreiben, müssen wir die Antwort-Funktion neu definieren

$$D(\omega) = G(\omega) - G(\omega_0). \quad (\text{G.16})$$

$D(\omega)$  beschreibt dann einen kausalen Zusammenhang. Näheres hierzu findet man beispielsweise in [34].

Um eine zum Titchmarsh Theorem äquivalente Aussage<sup>18</sup> für Distributionen zu erhalten, gehen wir zunächst ganz naiv vor. Kausalität bedingt, dass für die Antwort-Distribution  $g_t$  gilt

$$g_t(f) = \Theta(t)g_t(f). \quad (\text{G.17})$$

Fourier-Transformieren wir den Ausdruck im Sinne von Distributionen, erhalten wir

$$G_\omega = -\frac{1}{i\pi}G_\omega * P\left(\frac{1}{\omega}\right), \quad (\text{G.18})$$

wobei  $F * G$  die Faltung im Sinne von Distributionen meint. Bildung des Real- und Imaginärteils des Ausdrucks liefert

$$\mathbf{Re}G_\omega = -\frac{1}{\pi}\mathbf{Im}G_\omega * P\left(\frac{1}{\omega}\right), \quad (\text{G.19})$$

$$\mathbf{Im}G_\omega = \frac{1}{\pi}\mathbf{Re}G_\omega * P\left(\frac{1}{\omega}\right). \quad (\text{G.20})$$

Dies sind die Kramers-Kronig-Relationen für distributionelle Antwort-Funktionen. Der Ausdruck macht Sinn für alle Distributionen  $G_\omega$ , für die die Faltung mit  $P(\frac{1}{\omega})$  erklärt ist. Dies gilt insbesondere für alle quadratintegrablen Funktionen. Der Einfachheit der Herleitung schulden wir nun jedoch Überlegungen distributioneller Art. Wir müssen uns Gedanken um die Existenz der distributionellen Ausdrücke in (G.19) und (G.20) machen. Produkte von Distributionen sind im Allgemeinen nicht wohldefiniert und somit auch die Faltung zwischen Distributionen<sup>19</sup> nicht. Wir wollen uns jetzt überlegen, für welche Distributionen der Ausdruck (G.18) wohldefiniert ist. Dazu müssen wir zunächst einige Definitionen machen.

**Definition G.1.1.** Der Raum der summierbaren Distributionen  $\mathcal{D}'_L$  ist der Teilraum der Distributionen, welche wir erhalten, wenn wir nur endliche Summen von Ableitungen von  $L$ -Funktionen zulassen

$$T_\omega = \sum_{p=0}^n D^p F_p(\omega), \quad F_p(\omega) \in L. \quad (\text{G.21})$$

Falten wir eine Distribution  $G_\omega$  mit  $P(\frac{1}{\omega})$  so sollte  $\frac{G_\omega}{\omega} \in \mathcal{D}'$  sein. Um Singularitäten am Ursprung zu vermeiden, definieren wir den Raum  $\mathcal{D}'_L^{(1)}$ .

**Definition G.1.2.** Der Raum  $\mathcal{D}'_L^{(1)}$  ist der Teilraum der Distributionen  $G_\omega$ , für die gilt

$$\frac{G_\omega}{(1 + \omega^2)^{-\frac{1}{2}}} \in \mathcal{D}'_L. \quad (\text{G.22})$$

<sup>18</sup>Im Falle, dass wir die Antwort-Funktion neu definieren müssen, lässt sich das Theorem auch auf Distributionen erweitern, siehe hierzu [34]

<sup>19</sup>Für weiterführende Literatur sei hier insbesondere auf [21] verwiesen.



Fourier-Transformieren von Distributionen aus  $\mathcal{D}_L^{(1)}$  führen in den Raum  $\mathfrak{E}'_{(0)}$ <sup>20</sup>.

**Definition G.1.3.** Der Raum  $\mathfrak{E}'_{(0)}$  ist der Raum der Distributionen, welche wir als Ableitung (im Sinne von Distributionen) von stetigen Funktionen verstehen können

$$g_t = f'(t), \quad f(t) \in C^0 \rightarrow g_t \in \mathfrak{E}'_{(0)}. \quad (\text{G.23})$$

Um nun zu beweisen, dass  $\mathcal{D}_L^{(1)}$  der Raum ist, auf dem der Ausdruck (G.18) wohldefiniert ist, benötigen wir das folgende Theorem.

**Theorem G.2.** *Sei*

$$h(\omega) = P\left(\frac{1}{\omega}\right) * \phi(\omega), \quad (\text{G.24})$$

mit  $\phi(\omega) \in \mathcal{S}(\mathbb{C})$ , dann sind  $(1 + \omega^2)^{\frac{1}{2}} \times h(\omega)$  und alle Ableitungen des Ausdruck beschränkt.

Zum Beweis dieser Aussage betrachten wir die Funktion

$$F(\omega, \omega') = \frac{|\omega| (1 + (\omega - \omega')^2)^{\frac{1}{2}}}{(1 + \omega^2)^{\frac{1}{2}}}. \quad (\text{G.25})$$

Die Funktion hat für  $|\omega'| \geq 1$  eine untere Schranke A, denn für  $|\omega| \leq 1$  ist  $F \geq \frac{1}{\sqrt{2}}$ , für  $|\omega'| \geq \frac{|\omega|}{2}$  ist  $F = \frac{|\omega|}{2(1+\omega^2)^{\frac{1}{2}}}$  und für  $|\omega| \geq 1$  und  $1 \leq |\omega'| \leq \frac{|\omega|}{2}$  ist  $F \geq (1 + \omega^2)^{-\frac{1}{2}}(1 + \frac{\omega^2}{2})^{\frac{1}{2}}$ .

Die letzteren Ausdrücke haben alle eine untere Schranke. Es folgt also

$$\frac{1}{|\omega'|} \leq A \frac{(1 + (\omega - \omega')^2)^{\frac{1}{2}}}{(1 + \omega^2)^{\frac{1}{2}}}. \quad (\text{G.26})$$

Setzen wir diese Abschätzung in die Definition von  $h(\omega)$  ein, folgt

$$|h(\omega)| \leq P \int_{-1}^1 d\omega' \frac{\phi(\omega - \omega')}{\omega'} + \frac{A}{(1 + \omega^2)^{\frac{1}{2}}} \int_{|\omega'| \geq 1} (1 + (\omega - \omega')^2)^{\frac{1}{2}} |\phi(\omega - \omega')| \quad (\text{G.27})$$

$$\leq \int_{-1}^1 \frac{d\omega'}{\omega'} (\phi(\omega - \omega') - \phi(\omega)) + \frac{A}{(1 + \omega^2)^{\frac{1}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dx (1 + x^2)^{\frac{1}{2}} |\phi(x)| \quad (\text{G.28})$$

$$\leq \int_{-1}^1 d\omega' \max |\omega'| \leq 1 |\phi'(\omega - \omega')| + \frac{A}{(1 + \omega^2)^{\frac{1}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dx (1 + x^2)^{\frac{1}{2}} |\phi(x)| \quad (\text{G.29})$$

$$\leq C(1 + \omega^2)^{-\frac{1}{2}}. \quad (\text{G.30})$$

In den letzten beiden Schritten haben wir den Mittelwertsatz der Differentialrechnung und  $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{C})$  benutzt. Da alle Ableitungen einer Schwarzraum-Funktion wieder im Schwarzraum liegen, ist das Theorem damit bewiesen.

Die entscheidende Aussage ist nun das folgende Theorem:

**Theorem G.3.** *Sei  $G_\omega \in \mathcal{D}_L^{(1)}$ , dann ist  $G(\omega) * P\left(\frac{1}{\omega}\right)$  eine temperierte Distribution.*

<sup>20</sup>Für einen Beweis dieses Sachverhalts siehe [34].

Der Beweis des Theorems beruht auf dem Theorem (G.2). Wir definieren die Distribution  $G(\omega) * P\left(\frac{1}{\omega}\right)$  über

$$\left(G_\omega * P\left(\frac{1}{\omega}\right), \phi\right) = -\left((1 + \omega^2)^{-\frac{1}{2}} G_\omega, (1 + \omega^2)^{\frac{1}{2}} h(\omega)\right), \quad (\text{G.31})$$

wobei  $h(\omega)$  in (G.24) definiert ist. Mit  $G_\omega \in \mathcal{D}_L^{(1)}$  gilt auch  $(1 + \omega^2)^{-\frac{1}{2}} G_\omega \in \mathcal{D}_L^{(1)}$ . Darüber hinaus sind  $(1 + \omega^2)^{\frac{1}{2}} h(\omega)$  und alle Ableitungen davon beschränkt. Es existiert also die rechte Seite von (G.31), da wir die Testfunktion durch ihre obere Schranke abschätzen können und  $G_\omega$  summierbar ist. Demnach definiert (G.31) ein lineares Funktional auf dem Schwarzraum  $\mathcal{S}$ , es handelt sich also um eine temperierte Distribution. Damit ist gezeigt, in welchem Sinne die Kramers-Kronig-Relationen für Distributionen zu verstehen sind.

Kehren wir nun zur dielektrischen Polarisation zurück. Wir haben oben gesehen, dass der Zusammenhang zwischen der dielektrischen Polarisation und des äußeren elektrischen Feldes kausal sein sollte. Die dielektrische Suszeptibilität  $\xi = \epsilon - 1$  ist also die Antwort-Funktion des Systems. Was können wir nun über das Verhalten bei sehr großen Frequenzen aussagen?

Für Frequenzen viel größer als die Bindungsenergie der Elektronen im Medium sollten sich diese frei bewegen. Also gilt die Bewegungsgleichung

$$m\ddot{\mathbf{r}} = e\mathbf{E}_\omega e^{-i\omega t}. \quad (\text{G.32})$$

Die Polarisation sollte also für große Frequenzen wie

$$\mathbf{P} = Nex = -\frac{Ne^2}{m\omega^2}\mathbf{E} \quad (\text{G.33})$$

gehen. Die dielektrische Suszeptibilität solle also für große Frequenzen gegen Null streben

$$\epsilon(\omega) - 1 = -\frac{Ne^2}{m\omega^2} \rightarrow 0 \quad \omega \rightarrow \infty \quad (\text{G.34})$$

und ist somit in  $L^2$ . Es gilt also das Theorem von Titchmarsh und damit muss die dielektrische Funktion die Kramers-Kronig-Relationen erfüllen

$$\mathbf{Re}\epsilon(\omega) - 1 = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathbf{Im}\epsilon(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega', \quad (\text{G.35a})$$

$$\mathbf{Im}\epsilon(\omega) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathbf{Re}\epsilon(\omega') - 1}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (\text{G.35b})$$

## H Zur CP-Kraft bei Anwesenheit von dielektrischen Medien

Als letzten Teil des Anhangs möchten wir eine kurze Einführung in die historischen Berechnungen der CP-Kraft in dielektrischen Medien geben. Diese möge uns helfen, ein tieferes Verständnis für die CP-Kraft zu bekommen. Nachdem Casimir und Polder [13] ihre Berechnung der CP-Kraft für den idealen Fall (elektrisch neutrales Atom vor einer Wand mit unendlicher Leitfähigkeit) veröffentlicht haben, lieferten Lifschitz, Dzyaloshinskii und Pitaevskii u.a. in [28] und [16] eine Beschreibung der Casimir- und der Casimir-Polder-Kraft bei Anwesenheit von dielektrischen Medien. Diese Ansätze bilden historisch gesehen die Grundlage des

Verständnis' der Vakuum-Kräfte an dielektrischen Multilayer-Strukturen. Wir möchten hier nicht den sehr bekannten Ansatz von Lifschitz, sondern alternative Ansätze, beschreiben. Wir werden zunächst den Ansatz, welcher in dem Buch [30] benutzt wird und erstmal von Kampen, Nijboer und Schram [47] angewandt wurde, beschreiben und dann die Berechnung der Kräfte nach Schwinger [32] erläutern.

### H.0.1 Berechnung der Casimir-Kraft nach [30]

Milonni berechnet die Kraft nach einer Methode, die zuerst von Kampen, Nijboer und Schram (1968) angewandt wurde. Er berechnet die Nullpunktsenergie wie Casimir über die Modensumme, bekommt jedoch durch die Anwesenheit der dielektrischen Medien Randbedingungen, welche die erlaubten Frequenzen einschränken. Ausgehend von der Wellengleichung der Elektrodynamik in Dielektrika

$$\nabla^2 \mathbf{E} + \omega^2 \epsilon(\omega) \mathbf{E} = 0, \quad (\text{H.1})$$

$$\nabla^2 \mathbf{B} + \omega^2 \epsilon(\omega) \mathbf{B} = 0, \quad (\text{H.2})$$

setzen wir in folgende Geometrie

$$\epsilon(z) = \begin{cases} \epsilon_1, & \text{für } z < 0, \\ \epsilon_2, & \text{für } 0 \leq z \leq d, \\ \epsilon_3, & \text{für } z > d, \end{cases} \quad (\text{H.3})$$

ebene Wellen an. Die Normalkomponente von  $\mathbf{D}(\mathbf{x}, t) = E(\mathbf{x})e^{i\omega t}$  muss stetig sein, was der Fall ist, wenn  $\epsilon(\omega)e_z$  und  $\partial_z e_z$  stetig sind. Wobei wir Lösungen der Form

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = (e_x(z)\mathbf{e}_x + e_y(z)\mathbf{e}_y + e_z(z)\mathbf{e}_z) e^{i(k_x x + k_y y)} \quad (\text{H.4})$$

ansetzten. Lassen wir nur Lösungen zu, welche in den Rand-Dielektrika abfallen, so ergibt sich:

$$E_z(z) = A e^{K_1 z}, \quad z < 0 \quad (\text{H.5a})$$

$$E_z(z) = B e^{K_3 z} + C e^{-K_3 z}, \quad 0 \leq z \leq d \quad (\text{H.5b})$$

$$E_z(z) = A e^{-K_2 z}, \quad z > d, \quad (\text{H.5c})$$

mit  $K_j^2 = k_x^2 + k_y^2 - \epsilon_j(\omega)\omega^2$ , wobei wir durch geschickte Wahl des Koordinatensystems  $k_y = 0$  setzen können. Das Eliminieren von  $A, B, C, D$ , unter Benutzung der Randbedingungen, führt zu zwei Bedingungen an die erlaubten Frequenzen

$$\frac{(\epsilon_3 K_1 + \epsilon_1 K_3)(\epsilon_3 K_2 + \epsilon_2 K_3)}{(\epsilon_3 K_1 - \epsilon_1 K_3)(\epsilon_3 K_2 - \epsilon_2 K_3)} e^{2K_3 d} - 1 = 0 \quad (F_a(\omega)) \quad (\text{H.6})$$

$$\frac{(K_1 + K_2)(K_2 + K_3)}{(K_1 - K_2)(K_2 - K_3)} e^{2K_3 d} - 1 = 0 \quad (F_b(\omega)). \quad (\text{H.7})$$

Die Nullpunktsenergie ergibt sich nun aus

$$E(d) = \sum_n \frac{1}{2} \omega_{n,a} + \sum_n \frac{1}{2} \omega_{n,b}. \quad (\text{H.8})$$

Zur Berechnung der Modensummen benutzen wir nun eine Folgerung aus dem Residuensatz. Für eine meromorphe Funktion  $f(z)$  mit endlichen vielen Null- und Polstellen gilt für das Integral über einen nullhomologen, null- und polstellenfreien Weg  $\gamma$

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \frac{f'(\zeta)}{f(\zeta)} d\zeta = N_{\gamma} - P_{\gamma}, \quad (\text{H.9})$$

wobei  $N$ , bzw.  $P$  die Anzahl der von  $\gamma$  eingeschlossenen Null- bzw. Polstellen ist. Da die Polstellen unabhängig von  $d$  sind, können wir so die erlaubten Frequenzen herausfiltern und erhalten

$$E(d) = \frac{L^2}{4\pi} \frac{1}{2\pi i} \int_0^{\infty} dk k \left[ \oint_{\gamma} \omega \frac{F'_a(\omega)}{F_a(\omega)} d\omega + \oint_{\gamma} \omega \frac{F'_b(\omega)}{F_b(\omega)} d\omega \right], \quad (\text{H.10})$$

wobei  $\gamma$  der Halbkreis, ausgehend von der Imaginärachse, mit unendlichem Radius ist. Dies begründet sich darin, dass wir nur an positiven Frequenzen interessiert sind, aber durchaus absorbierende Dielektrika zulassen wollen. Führen wir nun  $G_a(\zeta) = F_a(i\zeta)$  ein, berechnet sich das Integral entlang der Imaginärachse zu

$$\int_{\infty}^{-\infty} (i\zeta) \frac{1}{F_a(i\zeta)} \frac{\partial F_a(i\zeta)}{\partial (i\zeta)} i d\zeta = i \int_{\infty}^{-\infty} d\zeta \ln(G_a(\zeta)) \quad (\text{H.11})$$

und Analoges für die Bedingung (H.7). Die Energie ist dann

$$E(d) = \frac{L^2}{8\pi^2} \int_0^{\infty} dk k \left[ \int_{\infty}^{-\infty} d\zeta \ln(G_a(\zeta)) + \int_{\infty}^{-\infty} d\zeta \ln(G_b(\zeta)) \right]. \quad (\text{H.12})$$

Die Casimir-Kraft pro Einheitsfläche ergibt sich dann zu

$$\begin{aligned} F(d) &= -\frac{1}{L^2} \partial_d E(d) \\ &= -\frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\infty} dk k \int_0^{\infty} d\zeta \left[ \frac{1}{G_a(k, \zeta)} \frac{1}{G_b(k, \zeta)} \right] \\ &= -\frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\infty} dk k \int_0^{\infty} d\zeta K_3 \\ &\quad \times \left( \left[ \frac{\epsilon_3 K_1 + \epsilon_1 K_3}{\epsilon_3 K_1 - \epsilon_1 K_3} \frac{\epsilon_3 K_2 + \epsilon_2 K_3}{\epsilon_3 K_2 - \epsilon_2 K_3} e^{2K_3 d - 1} \right]^{-1} \right. \\ &\quad \left. + \left[ \frac{(K_1 + K_2)(K_2 + K_3)}{(K_1 - K_2)(K_2 - K_3)} e^{2K_3 d - 1} \right]^{-1} \right). \end{aligned} \quad (\text{H.13})$$

Dies stimmt mit dem Ergebnis von Lifschitz aus [28] und der Berechnung von Schwinger aus [32] überein. Dies lässt sich einsehen, wenn man die Variablen-Umdefinition

$$k^2 = \epsilon_3 \zeta^2 (p^2 - 1) \quad (\text{H.14a})$$

$$K_3 = \sqrt{\epsilon_3} \zeta p \quad (\text{H.14b})$$

$$K_{1,2}^2 = \epsilon_3 \zeta^2 s_{1,2}^2 \quad (\text{H.14c})$$

vornimmt. Die Kraft lautet dann

$$\begin{aligned}
F(d) &= \frac{1}{2\pi^2} \int_1^\infty dp p^2 \int_0^\infty d\zeta \zeta^3 \epsilon_3^{3/2} \\
&\times \left( \left[ \frac{\epsilon_3 s_1 + \epsilon_1 p \epsilon_3 s_2 + \epsilon_2 p}{\epsilon_3 s_1 - \epsilon_1 p \epsilon_3 s_2 - \epsilon_2 p} e^{2\zeta p \sqrt{\epsilon_3} d} - 1 \right]^{-1} \right. \\
&\left. + \left[ \frac{s_1 + p s_2 + p}{s_1 - p s_2 - p} e^{2\zeta p \sqrt{\epsilon_3} d} - 1 \right]^{-1} \right). \tag{H.15}
\end{aligned}$$

### H.0.2 Berechnung der Casimir-Polder-Kraft nach Milloni

Zur Berechnung der CP-Kraft geht man nun von einem stark verdünnten Gas aus und nähert mit  $\epsilon = 1 + 4\pi N\alpha$ , wobei  $\alpha$  die Polarisierbarkeit der Gasatome ist. Teilt man nun durch  $-N$ , erhält man das Potential der CP-Kraft. Probieren wir dies zunächst für dem Fall eines Atoms gegenüber eines idealen Leiters. In diesem setzen wir  $\epsilon_3 = 1, \epsilon_2 = 1 + 4\pi\alpha$  und  $\epsilon_1 = \infty$ . Für das Potential erhalten wir dann in erster Ordnung in der Polarisierbarkeit

$$\begin{aligned}
V_{cp}(d) &= - \int_1^\infty dp \int_0^\infty d\zeta \frac{e^{-2dp\zeta} p^2 \alpha \zeta^3}{\pi} \\
&= - \frac{3\alpha}{8d^4\pi}. \tag{H.16}
\end{aligned}$$

Der Grenzfall stimmt also mit unseren Rechnungen und [13] überein. Versuchen wir nun das gleiche Konzept anzuwenden um die Casimir-Polder-Kraft in Anwesenheit von frequenzunabhängigen Dielektrika zu bekommen. Ausgehend von (H.15) setzen wir  $\epsilon_3 = 1, \epsilon_2 = 1 + 4\pi N\alpha$  und  $\epsilon_1 = \epsilon_0$  und entwickeln den Ausdruck in  $\alpha$ . In 1. Ordnung erhalten wir dann

$$\begin{aligned}
V_{cp}^\epsilon(d) &= \int_1^\infty dp \int_0^\infty d\zeta \frac{e^{-2dp\zeta} \alpha \zeta^3 (s_1 (\epsilon_0 - 1) p^3 + (p^2 - 1) \epsilon_0 p^2 + (1 - p^2) s_1^2)}{\pi (p + s_1) (s_1 + p\epsilon_0)} \\
&= \int_1^\infty dp \frac{3\alpha (s_1 (\epsilon_0 - 1) p^3 + (p^2 - 1) \epsilon_0 p^2 + (1 - p^2) s_1^2)}{8d^4 p^4 \pi (p + s_1) (s_1 + p\epsilon_0)} \\
&= - \frac{\alpha}{8\pi d^4} \frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_0 + 1} \Phi(\epsilon_0), \tag{H.17}
\end{aligned}$$

mit der Funktion

$$\begin{aligned}
\Phi(\epsilon) &= \frac{\epsilon + 1}{\epsilon - 1} \left( \epsilon + \frac{4 - \sqrt{\epsilon}(\epsilon + 1)}{2(\epsilon - 1)} + \frac{1}{3} \right. \\
&\quad - \frac{(2\epsilon(\epsilon - 1)^2 + \epsilon + 1) \sinh^{-1}(\sqrt{\epsilon - 1})}{2(\epsilon - 1)^{3/2}} \\
&\quad \left. - \frac{\epsilon^2 \left( \sinh^{-1}(\sqrt{\epsilon}) - \sinh^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{\epsilon}}\right) \right)}{\sqrt{\epsilon + 1}} \right). \tag{H.18}
\end{aligned}$$

Dies stimmt mit unseren Rechnungen zum CP-Potential bei statischen Dielektrika (Kapitel 4.2) überein.

## H.1 Berechnung der Casimir-Kraft nach Milton, bzw. Schwinger

In diesem Abschnitt soll eine kurze Zusammenfassung der Berechnung der Casimir-Kraft nach Schwinger in starker Anlehnung an [31] gegeben werden. Es werden nicht alle Rechnungen reproduziert, sondern die wesentlichen Ideen wiedergegeben.

Milton geht wie wir vor und berechnet den Vakuumerwartungswert des elektromagnetischen Feldstärke-Tensors unter den entsprechenden Randbedingungen, rechnet jedoch im Impulsraum. Hierzu leitet er zunächst den Feldstärke-Tensor zu festen Frequenzen ab und integriert dann über alle Frequenzen. Zur Berechnung der Kraft pro Fläche berechnet er dann die Normal-Normalkomponente des Feldstärketensors

$$F_{zz} = \frac{1}{2} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2) - (\mathbf{E}_z^2 + \mathbf{H}_z^2). \quad (\text{H.19})$$

Zur Berechnung der Vakuumerwartungswerte der Felder

$$(\Omega, \mathbf{E}(\mathbf{x})\mathbf{E}(\mathbf{y})\Omega) = -i\Gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad (\text{H.20})$$

$$(\Omega, \mathbf{H}(\mathbf{x})\mathbf{H}(\mathbf{y})\Omega) = \frac{i}{\omega^2} \nabla \times \Gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \times \nabla', \quad (\text{H.21})$$

ist die dyadische Greensche Funktion, unter Berücksichtigung der durch die beiden idealen Leiterplatten vorgegebenen Randbedingungen, zu berechnen. Wir können die dyadische Greensche Funktion über

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} \Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) \quad (\text{H.22})$$

definieren. Wir finden, dass der Vakuumerwartungswert der Normal-Normalkomponente des Feldstärketensors auf den Platten, bei Impuls  $\mathbf{k}$  und Frequenz  $\omega$ , gegeben ist durch

$$(\omega, t_{zz}\omega) = i\lambda \cot(\lambda a)|_{z=0,a}. \quad (\text{H.23})$$

Wobei  $a$  der Platten-Abstand und  $\lambda^2 = \omega^2 - k^2$  ist. Um die Randbedingungen zu realisieren müssen wir  $\frac{\lambda}{2}$  abziehen.

Die Kraft pro Einheitsfläche ergibt sich dann zu

$$\begin{aligned} F_{CP}(d) &= - \int \frac{d^2}{2\pi^2} \int \frac{d\zeta}{2\pi} \kappa (\coth(\kappa a) - 1) \\ &= - \frac{\pi^2}{240a^4}, \end{aligned} \quad (\text{H.24})$$

mit  $\omega = i\zeta$  und  $i\kappa = i\sqrt{k^2 + \zeta^2}$ . Das Ergebnis stimmt also mit (2.56) überein.

Zur Berechnung der Casimir-Kraft in Dielektrika wird nun die Änderung der Wirkung unter Änderung der Dielektrizitätskonstante betrachtet. Die Wirkung der Elektrodynamik bei Anwesenheit einer äußeren Polarisierung  $\mathbf{P}$ , lautet

$$S = \int dx \left[ \mathbf{P}(-\dot{\mathbf{A}} - \nabla\phi) + \epsilon \mathbf{E}(-\dot{\mathbf{A}} - \nabla\phi) - \mathbf{H}(\nabla \times \mathbf{A}) + \frac{1}{2}(\mathbf{H}^2 - \epsilon \mathbf{E}^2) \right]. \quad (\text{H.25})$$

Die Variation nach  $\epsilon$  liefert

$$\delta_\epsilon W = \int dx \frac{1}{2} \mathbf{E}(x)^2 \quad (\text{H.26})$$

$$= \frac{-i}{2} \int dx \delta\epsilon(x) \Gamma_{kk}(x, x). \quad (\text{H.27})$$

Verschieben wir die zweite Platte um ein Stück  $\delta a$ , so ändert sich die Energie pro Einheitsfläche zwischen den Platten durch die Verschiebung der Dielektrika über

$$\delta\epsilon(z) = -\delta a(\epsilon_2 - \epsilon_3)\delta(z - a) \quad (\text{H.28})$$

um

$$\delta E = \frac{i}{2} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} dz \delta\epsilon(z) g_{kk}(z, z' : \mathbf{k}, \omega) = -F_{Casimir} \delta a, \quad (\text{H.29})$$

wobei  $g_{kk}$  die Fourier-Transformierte der dyadischen Greenschen Funktion ist. Integration über  $z$  liefert die Kraft pro Einheitsfläche. Berechnen wir die dyadische Greensche Funktion für die Geometrie (H.3) und werten das Integral aus, erhalten wir wieder (H.15).

Zur Berechnung der CP-Kraft wird die dyadische Greensche Funktion für entsprechende Geometrie durch Limes-Bildung gebildet. Auswerten der Integrale liefert wieder (H.17).

## Literatur

- [1] ABRIKOSOV, A. A.: *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*. Dover Publications, überarbeitete Auflage, Oktober 1975.
- [2] AMOOSHAHI, M und F KHEIRANDISH: *Electromagnetic field quantization in an anisotropic magnetodielectric medium with spatial and temporal dispersion*. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, **41**:275402 (12pp), 2008.
- [3] ARFKEN, GEORGE B. und HANS J. WEBER: *Mathematical Methods for Physicists*. Academic Press, 6. Auflage, 8 2005.
- [4] BARNETT, STEPHEN M. und BRUNO HUTTNER: *Quantization of the electromagnetic field in dielectrics*. Phys. Rev. A, **46**(7):4306, Oktober 1992.
- [5] BELINFANTE, F.J.: *On the longitudinal and the transversal delta-function, with some applications*. Physica, **12**(1):1 – 16, 1946.
- [6] BJORKEN, JAMES D und SIDNEY D DRELL: *Relativistische Quantenfeldtheorie*. Spektrum-Akademischer Vlg, Unveränd. Neudr. Auflage, 1990.
- [7] BOYER, TIMOTHY H.: *Temperature dependence of Van der Waals forces in classical electrodynamics with classical electromagnetic zero-point radiation*. Phys. Rev. A, **11**(5):1650–1663, May 1975.
- [8] BRATTELI, OLA und DEREK W. ROBINSON: *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics: Operator Algebras Bd. 2 and Quantum Statistical Mechanics. Equilibrium States. Models in Quantum Statistical ... Bd 2 (Texts and Monographs in Physics,)*. Springer, Berlin, 2. Auflage, 7 2000.
- [9] BROWN, L. S. und G. J. MACLAY: *Vacuum Stress between Conducting Plates: An Image Solution*. Physical Review, **184**:1272–1279, August 1969.
- [10] BUHMANN, STEFAN YOSHI und DIRK-GUNNAR WELSCH: *Casimir-Polder forces on excited atoms in the strong atom-field coupling regime*. Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics), **77**(1):012110, 2008.
- [11] BUHMANN, S. Y., H. T. DUNG, T. KAMPF und D.-G. WELSCH: *Casimir-Polder interaction of atoms with magnetodielectric bodies*. The European Physical Journal D - Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics, **35**(1):15–30, 2005.
- [12] CASIMIR, H. B. G.: *On the attraction between two perfectly conducting plates*. Proceedings of the Royal Netherlands Academy of Arts and Sciences, **51**:793–795, 1948.
- [13] CASIMIR, H. B. G. und D. POLDER: *The Influence of Retardation on the London-van der Waals Forces*. Phys. Rev., **73**(4):360–372, Feb 1948.
- [14] COHEN-TANNOUJJI, CLAUDE, BERNARD DIU und FRANCK LALOE: *Quantenmechanik: Teil 2 : 2 durchgesehene und verbesserte Auflage*. Walter De Gruyter Inc, 10 1999.
- [15] DUNG, HO TRUNG, STEFAN YOSHI BUHMANN, LUDWIG KNÖLL, DIRK-GUNNAR WELSCH, STEFAN SCHEEL und JÜRGEN KÄSTEL: *Electromagnetic-field quantization and spontaneous decay in left-handed media*. Phys. Rev. A, **68**(4):043816, Oct 2003.



- 
- [16] DZYALOSHINSKII, I E, E M LIFSHITZ und LEV P PITAEVSKII: *GENERAL THEORY OF VAN DER WAALS' FORCES*. Soviet Physics Uspekhi, **4**(2):153–176, 1961.
- [17] FANO, U.: *Atomic Theory of Electromagnetic Interactions in Dense Materials*. Phys. Rev., **103**(5):1202–, September 1956.
- [18] FREDENHAGEN, KLAUS: *Vorlesungsskript zur QFT I+II*. Hamburg 2007.
- [19] HARBER, D. M.: *Experimental investigation of interaction between ultracold atoms and room-temperature surfaces*. Doktorarbeit, University of Colorado Department of Physics, 2005.
- [20] HOPFIELD, J. J.: *Theory of the Contribution of Excitons to the Complex Dielectric Constant of Crystals*. Phys. Rev., **112**(5):1555–, Dezember 1958.
- [21] HÖRMANDER, LARS: *The Analysis of Linear Partial Differential Operators I: Distribution Theory and Fourier Analysis (Classics in Mathematics)*. Springer, 8 2003.
- [22] JACKSON, JOHN DAVID: *Klassische Elektrodynamik (3. überarbeitete Auflage)*. Walter de Gruyter, 3th Auflage, 7 2002.
- [23] KHEIRANDISH, FARDIN und MORTEZA SOLTANI: *Extension of the Huttner-Barnett model to a magnetodielectric medium*. Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics), **78**(1):012102, 2008.
- [24] KNÖLL, LUDWIG, STEFAN SCHEEL und DIRK-GUNNAR WELSCH: *QED in dispersing and absorbing media*. arXiv:quant-ph/0006121v5, 2003.
- [25] KNÖLL, LUDWIG und DIRK-GUNNAR WELSCH: *Three-dimensional quantization of the electromagnetic field in dispersive and absorbing inhomogeneous dielectrics*. Phys. Rev. A, **57**(5):3931–, Mai 1998.
- [26] KNÖLL, L. und D.-G. WELSCH: *Publisher's Note: Three-dimensional Casimir force between absorbing multilayer dielectrics*. Phys. Rev. A, Oktober 2003.
- [27] LANDAU, E. M. LIFSHITZ L. D.: *Lehrbuch der theoretischen Physik, Bd. 7: Elektrodynamik der Kontinua*. Akademie-Verlag, Berlin, 1967.
- [28] LIFSHITZ, E.M.: *The theory of molecular attractive forces between solids*. Soviet Phys. JETP, Zhur. Eksptl. i Teoret. Fiz. 29, 94-110(1955) July. (In Russian), **2**:73–83, 1956.
- [29] MARADUDIN, A. A. und D. L. MILLS: *Scattering and absorption of electromagnetic radiation by a semi-infinite medium in the presence of surface roughness*. Phys. Rev. B, **11**(4):1392–1415, Feb 1975.
- [30] MILONNI, P. W.: *The Quantum Vacuum: An Introduction to Quantum Electrodynamics*. Academic, 1994.
- [31] MILTON, K. A.: *The Casimir Effect: Physical Manifestations of Zero-point Energy*. World Scientific Pub, Oktober 2001.
- [32] MILTON, K. A., L. L. DERAAD, JR. und J. SCHWINGER: *Casimir self-stress on a perfectly conducting spherical shell*. Annals of Physics, **115**:388–403, Oktober 1978.

- [33] MILTON, KIMBALL A: *The Casimir effect: recent controversies and progress*. Journal of Physics A: Mathematical and General, **37**(38):R209–R277, 2004.
- [34] NUSSENZVEIG, H.M.: *Causality and Dispersion Relations (Mathematics in science and engineering)*. Academic Press Inc, 12 1972.
- [35] PARISI, GIORGIO: *Statistical Field Theory (Frontiers in Physics)*. Addison-Wesley, 1987.
- [36] PEIERLS, RUDOLF E.: *The Commutation laws of relativistic field theory*. Proc. Roy. Soc. Lond., **A214**:143–157, 1952.
- [37] PITAEVSKII, LEV P. und SANDRO STRINGARI: *Effect of the Casimir-Polder force on the collective oscillations of a trapped Bose-Einstein condensate*. Phys. Rev. A, **70**(5):053619–, November 2004.
- [38] R HAAG, NM HUGENHOLTZ, M WINNINKM: *On the equilibrium states in quantum statistical mechanics*. Communications in Mathematical Physics, **5**(3):215–236 (12pp), 1967.
- [39] ROEPSTORFF, G.: *Skript zur Vorlesung Einführung in die Quantenfeldtheorie*. Aachen 2001.
- [40] SCHEEL, STEFAN, LUDWIG KNÖLL und DIRK-GUNNAR WELSCH: *QED commutation relations for inhomogeneous Kramers-Kronig dielectrics*. Phys. Rev. A, **58**(1):700–706, Jul 1998.
- [41] SCHMIDT, E., J. JEFFERS, S. M. BARNETT und L. KNOLL DIRK-GUNNAR WELSCH: *Quantum theory of light in nonlinear media with dispersion and absorption*. Journal of Modern Optics, **45**:377–402, Februar 1998.
- [42] SPARNAAY, M. J.: *Attractive Forces between Flat Plates*. Nature, 1957.
- [43] SUTTORP, L G: *Field quantization in inhomogeneous anisotropic dielectrics with spatio-temporal dispersion*. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, **40**(13):3697–3719, 2007.
- [44] SUTTORP, L. G. und A. J. VAN WONDEREN: *Fano diagonalization of a polariton model for an inhomogeneous absorptive dielectric*. EPL (Europhysics Letters), **67**(5):766–772, 2004.
- [45] THOMAS, M. S.: *Green function for multilayers: Light scattering in planar cavities*. Phys. Rev. A, **51**(3):2545–, März 1995.
- [46] TITCHMARSH, E. C: *Introduction to the theory of Fourier integrals*. Clarendon Press, 2. Auflage, 1948.
- [47] VAN KAMPEN, N. G., B. R. A. NIJBOER und K. SCHRAM: *On the macroscopic theory of Van der Waals forces*. Physics Letters A, Februar 1968.
- [48] VOGEL, WERNER, DIRK-GUNNAR WELSCH und SASCHA WALLENTOWITZ: *Quantum Optics An Introduction*. Wiley-VCH, 3., überarbeitete und erweiterte Auflage, 5 2006.

- 
- [49] WATSON, K. M. und J. M. JAUCH: *Phenomenological Quantum-Electrodynamics*. Phys. Rev., **74**(8):950–, Oktober 1948.
- [50] WELSCH, D.-G. und T. GRUNER: *Correlation of radiation-field ground-state fluctuations in a dispersive and lossy dielectric*. Phys. Rev. A, **51**(4):3246–, April 1995.
- [51] WELSCH, D.-G. und T. GRUNER: *Green-function approach to the radiation-field quantization for homogeneous and inhomogeneous Kramers-Kronig dielectrics*. Phys. Rev. A, **53**(3):1818–, März 1996.

# Danksagung

Dies ist das erste, größere wissenschaftliche Werk, welches ich geschaffen habe. Dabei durfte ich auf eine leitende und inspirierende Betreuung von Herrn Prof. Fredenhagen zurückgreifen, der durch seine große fachliche Kompetenz und sein Ideenreichtum immer präsent ist und begeistert seine Zeit für Gespräche zur Verfügung stellt.

Meinem Zweitgutachter Herrn Prof. Sengstock möchte ich ebenfalls im besonderen Maße danken. Er erfüllt nicht nur die Aufgabe eines Zweitgutachters, sondern war bereits an der Auswahl des Themas beteiligt und hat durch seine fortwährende Unterstützung während der Diplomarbeit die Kooperation zwischen dem 2. Institut für Theoretische Physik der Universität Hamburg und dem Institut für Laserphysik der Universität Hamburg erst ermöglicht. Seine experimentelle Sichtweise auf das Thema war eine Bereicherung, welche den Umfang der Diplomarbeit erst möglich machte.

Eine der bereichernsten Zeiten meines Arbeitstags waren die Gespräche in der AQFT-Gruppe während des Mittagessens und der Kaffeepause. Ich habe selten so eine Hilfsbereitschaft und Wissbegierde erleben dürfen und möchte mich bei allen Gruppenmitgliedern bedanken. Claudio Dappiaggi stand mir immer Rat und Tat beiseite, Nicola Pinamonti konnte mir durch sein Wissen und durch die Gespräche über gemeinsame Erfahrungen mit der Kindeserziehung das Gefühl vermitteln, dass ich in der Gruppe aufgenommen bin, Pedro Lauridsen Ribeiro hat mir mit vielen wertvollen Literatur-Tipps und neuen Ideen zur Seite gestanden, Thomas-Paul Hack und Kai J. Keller hatten nicht nur immer ein offenes Ohr und Interesse für meine Fragestellungen, sondern bildeten die Grundlage meines Freundschaftsgefühls zur Gruppe.

Nahezu gleichzeitig mit mir hat Sebastian Jakobs an seiner Diplomarbeit gearbeitet und die gesamte Zeit über ein Büro mit mir geteilt. Er ist ein guter Freund von mir und hat mich täglich in meiner Arbeit durch gemeinsames Überlegen und viele Stunden Zeit für meine Fragen unterstützt. Er ist stets hilfsbereit und ich hoffe, wir konnten beide von unseren gemeinsamen Arbeitszeiten profitieren. Des Weiteren möchte ich mich bei meinen Mitstreitern aus Gebäude 66, Marc O. Hoge, Thomas Kecker, Philipp Levermann sowie Kenan Mujkić für die gemeinsam verbrachte Zeit und die vielen fachlichen Diskussionen bedanken. Ein wichtiger Dank gilt meinem guten Freund Fabian Mügge, der mit mir, mit viel Geduld, die Diplomarbeit auf Sprach- und Rechtschreibfehler durchgesehen hat.

Weiteren Dank möchte ich hier meinen Eltern, meinen Schwestern, meiner Nichte, meinen Schwiegereltern und Schwagern und allen anderen Verwandten aussprechen, die es erst ermöglicht haben, dass ich Physik studieren konnte und mir immer beiseite stehen.

Ein besonderer Dank gilt meiner Verlobten und Mutter meiner Tochter, welche mir durch viel Geduld und Liebe zur Seite stand und steht. Ohne ihre aufopferungsvoll wahrgenommene Rolle als Mutter und Verlobte, die es ihr trotzdem noch ermöglicht hat Diplomprüfungen abzulegen, wäre diese Arbeit nicht zur Stande gekommen. Sie ist für mich immer ein Halt, der mir die nötige Motivation und Ausdauer gibt.

Zu guter Letzt danke ich meiner Tochter, welche einen Monat nach dem Start meiner Diplomarbeit geboren wurde. Ihre Neugier und Lebensfreude sorgen für viele Glücksmomente, welche mir die Kraft lieferten, auch nach schlaflosen Nächten zielorientiert und konzentriert an meiner Diplomarbeit zu arbeiten.

# Erklärung gemäß Diplomprüfungsordnung

Ich versichere, diese Arbeit selbstständig und nur mit den angegebenen Quellen und Hilfsmitteln verfasst zu haben. Ich gestatte die Veröffentlichung dieser Arbeit.

Hamburg, 25. Februar 2009

Ole Niekerken