

Der thermodynamische Casimir-Effekt mit symmetrieerhaltenden und symmetriebrechenden Randbedingungen

Von der Fakultät für Physik der Universität Duisburg-Essen
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
genehmigte Dissertation

von

Felix Schmidt

aus Duisburg

Duisburg, im April 2014

Gutachter: Prof. Dr. Hans Werner Diehl
Zweitgutachter: Prof. Dr. Siegfried Dietrich

Tag der mündlichen Prüfung: 16. Juli 2014

Zusammenfassung

Wenn makroskopische Körper sich in einem fluktuierenden Medium befinden und dieses in seiner räumlichen Ausdehnung begrenzen, so können daraus langreichweitige Kräfte zwischen diesen Körpern folgen. Das Spektrum der Fluktuationen wird modifiziert und die Energie des Systems ist dann abhängig von den Abständen zwischen den Körpern, woraus die Existenz einer Kraft zwischen diesen folgt. Die vorliegende Arbeit ist der Untersuchung des Einflusses der Randbedingungen auf den thermodynamischen Casimir-Effekt gewidmet. Hier sind thermische Fluktuationen in der Nähe eines kritischen Punktes ursächlich für diese Kräfte.

Es werden $O(n)$ -symmetrische ϕ^4 -Theorien in d -dimensionalen Filmen der Filmstärke L untersucht. Berücksichtigt man zudem externe symmetriebrechende Felder, so lauten die generischen Randbedingungen für diese Theorien $\partial_n \phi - c_j \phi = -h_j$. Dabei sind die Parameter c_j Oberflächenkopplungen, welche im Rahmen der Landau-Theorie die Rolle linear extrapolierte Eindringtiefen in die Oberflächen spielen, und h_j Oberflächenfelder.

Der Einfluss der Variablen c_j auf die Casimir-Kraft wird im Rahmen der renormierungsgruppenverbesserten Störungstheorie in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen in Zweischleifennäherung am *Bulk*-kritischen Punkt untersucht. Besondere Aufmerksamkeit kommt dabei dem Fall kritischer Verstärkung der Oberflächenkopplungen zu, da hier die gewöhnliche Schleifenentwicklung aufgrund einer Nullmode im Spektrum zusammenbricht und in der ϵ -Entwicklung daher nicht-ganzzahlige Potenzen von ϵ auftreten.

Diese störungstheoretischen Rechnungen sind auf die ungeordnete Phase mit $T \geq T_{c,\infty}$, $c_j \geq c_{sp}$ und $h_j = 0$ beschränkt. Um die Analyse für alle Temperaturen zu ermöglichen, wird der exakt handhabbare Limes $n \rightarrow \infty$ des dreidimensionalen ϕ^4 -Modells untersucht. Dazu werden selbstkonsistente Gleichungen für die freie Energie hergeleitet, welche numerisch exakt gelöst werden können. Für Dirichlet-Randbedingungen wird hier bei $h_j = 0$ eine Temperaturabhängigkeit der Casimir-Kraft gefunden, welche qualitativ mit den Messungen in der Nähe des Lambda-Übergangs in suprafluidem Helium übereinstimmt. Insbesondere hat sie ein ausgeprägtes Extremum unterhalb der *Bulk*-kritischen Temperatur. Zudem wird im *Large-n*-Modell der Einfluss der Oberflächenfelder $h_j \in \mathbb{R}$ untersucht.

Setzt man die Parameter c_j und h_j auf ihre Fixpunktwerte, so ergeben sich Kräfte, die bei $T_{c,\infty}$ mit einem Potenzgesetz abfallen und entweder attraktiv oder repulsiv sind. Ist das System samt seiner Randbedingungen spiegelsymmetrisch bezüglich einer Ebene, so wirken immer anziehende Kräfte. Brechen die Randbedingungen jedoch diese Spiegelsymmetrie, so können die Kräfte auch abstoßend sein. Es wird explizit gezeigt, dass Abweichungen von den Fixpunktwerten der Parameter zu Übergängen zwischen attraktivem und repulsivem Verhalten bei Variation der Filmstärke L führen können.

Summary

When macroscopic bodies are immersed in fluctuating media, long-range forces between these bodies may occur. The fluctuation's spectrum is modified resulting in a dependence of the system's energy on the separation between the objects, straightforwardly leading to the existence of a force between the bodies. This work is dedicated to the analysis of how boundary conditions affect the thermodynamic Casimir effect where thermal fluctuations near a critical point induce these forces.

$O(n)$ symmetric ϕ^4 theories in d -dimensional slab geometries of thickness L are considered. When symmetry breaking external fields are present as well, the generic boundary conditions of these theories read $\partial_n \phi - c_j \phi = -h_j$ where the coefficients c_j are surface couplings, serving as linearly extrapolated penetration depths into the surfaces in Landau theory, and h_j are surface fields.

The influence of the surface couplings c_j on the Casimir force is investigated by means of the renormalization-group-improved perturbation theory in $d = 4 - \epsilon$ dimensions to two-loop order at the bulk critical point. Special attention is paid to the case of critical enhancement of the surface interactions which results in the existence of a zero mode leading to a breakdown of the usual loop expansion of the free energy and implicating the emergence of non-integer powers of ϵ in the ϵ expansion.

These perturbative methods are restricted to the disordered phase with $T \geq T_{c,\infty}$, $c_j \geq c_{sp}$, and $h_j = 0$. In order to extend the analysis to the whole temperature axis, the exactly treatable limit $n \rightarrow \infty$ of the three-dimensional ϕ^4 model is investigated. A set of self-consistent equations for the free energy is derived that can be solved numerically exact. Considering Dirichlet boundary conditions and vanishing external fields, one finds a temperature dependence of the Casimir force that exhibits the qualitative features of the experimentally measured force near the lambda transition in superfluid helium. In particular the existence of an extremum below the bulk critical point is reproduced. Additionally, the influence of the surface fields $h_j \in \mathbb{R}$ is investigated in the large- n limit.

If one fixes the coefficients c_j and h_j to their respective fixed-point values, the Casimir forces decay algebraically at $T_{c,\infty}$ being either attractive or repulsive. When the system — including the boundary conditions — is mirror symmetric with respect to a plane, these interactions are guaranteed to be attractive. This does not hold when boundary conditions break mirror symmetry. In this case repulsive forces may occur. It is explicitly shown that deviations of the coefficients from their fixed-points may lead to crossovers between attractive and repulsive Casimir forces when varying the film thickness L .

Inhaltsverzeichnis

| | |
|---|------------|
| Zusammenfassung | i |
| Summary | iii |
| Inhaltsverzeichnis | v |
| 1 Einführung und Grundlagen | 1 |
| 1.1 Bereits veröffentlichte Teile dieser Arbeit | 7 |
| 1.2 Casimir-Effekt in der Quantenelektrodynamik | 7 |
| 1.3 Casimir-Effekt in der Thermodynamik | 11 |
| 1.4 Oberflächenkritische Phänomene und Skalentheorie | 19 |
| 2 Thermodynamischer Casimir-Effekt mit Robin-Randbedingungen | 26 |
| 2.1 Das Modell | 28 |
| 2.2 Schleifenentwicklung der freien Energie | 36 |
| 2.2.1 Renormierung des Modells | 44 |
| 2.2.2 Renormierungsgruppenanalyse | 50 |
| 2.3 Renormierter Finite-Size-Anteil der freien Energie und Skalenfunktionen | 55 |
| 2.4 Modifizierte renormierungsgruppenverbesserte Störungstheorie | 60 |
| 2.4.1 Effektive Nullmodentheorie | 61 |
| 2.4.2 Berechnung der Beiträge des ψ -Feldes | 66 |
| 2.4.3 Berechnung der Beiträge des φ -Feldes | 69 |
| 2.5 Extrapolation zu $d = 3$ und Diskussion der Ergebnisse | 74 |
| 3 Thermodynamischer Casimir-Effekt im Limes $n \rightarrow \infty$ | 82 |
| 3.1 Das sphärische Modell und der Limes $n \rightarrow \infty$ | 84 |
| 3.2 Das Kontinuumsmodell | 87 |
| 3.2.1 Exakte Lösung des halbunendlichen Systems | 95 |
| 3.3 Diskretisierung des Problems | 97 |
| 3.3.1 Berechnung der Exzess-Freien-Energie | 102 |
| 3.4 Numerik I: Casimir-Amplitude für endliche g | 106 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 3.5 | Einschub: Korrekturen zum Skalenverhalten | 113 |
| 3.6 | Numerik II: Der Limes $g \rightarrow \infty$ | 119 |
| 3.6.1 | Casimir-Amplitude | 122 |
| 3.6.2 | Die Skalenfunktionen $\Theta(x)$ und $\vartheta(x)$ | 125 |
| 3.7 | Einfluss von Magnetfeldern | 146 |
| 3.7.1 | Bulk-Felder | 154 |
| 3.7.2 | Oberflächenfelder | 157 |
| 3.8 | Ausblick: Erweiterungsmöglichkeiten | 173 |
| 3.8.1 | Erweiterung auf andere Dimensionen $2 < d < 4$ | 173 |
| 3.8.2 | Anwendung auf Lifschitz-Punkte | 176 |
| 3.8.3 | Systematische Entwicklung in $1/n$ | 178 |
| 4 | Zusammenfassung und Diskussion | 182 |
| A | Anhang | 186 |
| A.1 | Berechnung der Summen | 186 |
| A.2 | Skalenfunktionen für periodische und antiperiodische Randbedingungen . . | 191 |
| A.3 | Amplitude für ein einfaches Modellpotential | 194 |
| A.4 | Das Integral $I_D(r)$ | 197 |
| | Literaturverzeichnis | 200 |

1 Einführung und Grundlagen

Der niederländische Physiker H. B. G. Casimir sagte 1948 einen Effekt voraus, der besagt, dass Vakuumfluktuationen zu effektiven, langreichweitigen Kräften zwischen in dieses Vakuum eingebetteten, makroskopischen Körpern führen können [1]. Dieses Ergebnis wird nach seinem Entdecker als Casimir-Effekt bezeichnet und konnte erst 50 Jahre später mit zufriedenstellender Genauigkeit experimentell nachgewiesen werden [2–4]. Aufgrund des vollständig anderen Ursprungs unterscheiden sich diese Casimir-Kräfte fundamental von anderen in der Physik bekannten Kräften zwischen Körpern: Während Kräfte wie die Gravitation oder die elektromagnetische Wechselwirkung durch die physikalischen Eigenschaften der miteinander wechselwirkenden Körper hervorgerufen werden, haben Casimir-Kräfte ihren Ursprung in den Eigenschaften des die Körper umgebenden Mediums.

Der zugrunde liegende Mechanismus — langreichweitig korrelierte Fluktuationen eines auf einen begrenzten Raumbereich definierten Feldes — lässt sich sofort auf andere physikalische Systeme übertragen. Fisher und de Gennes erkannten diese Bedeutung 1978 und sagten in [5] ein Analogon zum Casimir-Effekt aus dem Bereich der kritischen Phänomene — den sogenannten thermodynamischen Casimir-Effekt — voraus. Dabei sind die in der Nähe des kritischen Punktes eines Phasenübergangs zweiter Ordnung auftretenden thermischen Fluktuationen ursächlich für Kräfte zwischen den sich im Medium befindenden, makroskopischen Körpern. Weitere Systeme aus dem Bereich der kondensierten Materie, in denen Casimir-artige Kräfte auftreten, sind zum Beispiel Systeme mit spontan gebrochener, kontinuierlicher Symmetrie mit den hier auftretenden Goldstone-Moden.

Haben die Fluktuationen verschwindende Anregungsenergien — man bezeichnet sie dann als masselos —, so ergeben sich langreichweitige Kräfte. Dies ist sowohl bei Goldstone-Moden, also in der Tieftemperaturphase bei Systemen mit einer kontinuierlichen $O(n)$ -Symmetrie, als auch bei thermischen Fluktuationen in der Umgebung eines kritischen Punktes aufgrund der Divergenz der Korrelationslänge der Fall. In dieser Arbeit steht der thermodynamische Casimir-Effekt im Vordergrund. Nach der theoretischen Vorhersage konnte dieser zuerst 1999 durch Messungen der Filmdicke von suprafluidem Helium-4-Filmen in der Nähe des Lambda-Übergangs im Experiment nachgewiesen werden [6]. Auch in Systemen mit anderen Geometrien und Medien konnte dieser Effekt inzwischen bestätigt werden. Das prominenteste Beispiel dafür sind Experimente in der Nähe

des kritischen Punktes von binären Flüssigkeitsgemischen. Dieser kritische Punkt der Entmischung befindet sich bei der kritischen Temperatur T_c und dem kritischen Mischungsverhältnis. Unterhalb von T_c tritt dann ein Entmischungsübergang auf.¹ Auch dies ist ein Phasenübergang zweiter Ordnung. In [7, 8] wurde in der Nähe eines solchen Phasenübergangs die Casimir-Kraft zwischen einzelner sich in einer Dispersion von einem 2,6-Lutidin-Wasser-Gemisch befindenden kolloiden Polystyrol-Kugeln und einer Siliziumdioxid-Oberfläche gemessen.²

Die einfachste Geometrie, in der der thermodynamische Casimir-Effekt auftritt, ist jedoch die auch von Casimir in seiner grundlegenden Arbeit betrachtete Filmgeometrie — also zwei sich im Abstand L voneinander befindende, planparallele, unendlich ausgedehnte Platten. Die freie Energie dieser Systeme enthält eine explizite L -Abhängigkeit, was eine zwischen den Platten wirkende Kraft, die Casimir-Kraft, zur Folge hat.

Trotz der formalen Analogie zwischen dem Casimir-Effekt in der Quantenelektrodynamik (QED) und der Thermodynamik gibt es wesentliche Unterschiede, die weitreichende Auswirkungen haben: Während es in der Quantenelektrodynamik meist genügt, effektive Gaußsche Theorien zu betrachten, müssen beim thermodynamischen Analogon wechselwirkende Theorien wie zum Beispiel ϕ^4 -Theorien oder Ising-Modelle betrachtet werden. Diese sind im Allgemeinen nicht exakt lösbar und bedürfen einer näherungsweise Behandlung. Dabei treten völlig neue Schwierigkeiten auf, die in den physikalischen Eigenschaften der durch diese wechselwirkenden Theorien beschriebenen Systeme ihren Ursprung haben.

Insbesondere die Beschreibung des in diesen Systemen vorkommenden dimensionellen *Crossovers* gestaltet sich als schwierig. Sein Auftreten jedoch ist einfach zu verstehen: Bei hohen Temperaturen sind die Spins nur innerhalb kurzer Abstände korreliert. Ein Maß für die Reichweite dieser Korrelationen ist die Korrelationslänge ξ , welche am kritischen Punkt divergiert. Solange ξ deutlich kleiner als die Filmdicke ist, verhält sich der Film wie ein d -dimensionales System, da die beiden Oberflächen nichts von der Existenz der jeweils anderen merken. Verringert man nun die Temperatur des Systems, so wächst ξ an und erreicht irgendwann die Größenordnung von L . Bei weiterer Abkühlung des Systems kann

¹Dabei handelt es sich dann um einen oberen kritischen Punkt der Entmischung. Es gibt auch Fälle, bei denen oberhalb von T_c der Entmischungsübergang auftritt. Dann spricht man von einem unteren kritischen Punkt.

²In dieser Arbeit werden Ergebnisse erzielt, welche sowohl für die Messungen am Helium als auch für binäre Flüssigkeitsgemische von Bedeutung sind. Ausgangsbasis für die Analysen sind Spin-Modelle, welche dieselben universellen Eigenschaften aufweisen und häufig auch zur Beschreibung von Magnetismus in Festkörpern verwendet werden. Daher wird hier an vielen Stellen die “magnetische Sprache“ verwendet. Insbesondere wird die geordnete Phase als ferromagnetisch und die ungeordnete als paramagnetisch bezeichnet. Symmetriebrechende Felder werden auch Magnetfelder genannt.

die Korrelationslänge nur noch in den Richtungen parallel zu den Oberflächen anwachsen. Das System ist dann effektiv $(d-1)$ -dimensional. Zudem kann es, abhängig von der Dimensionalität d des Films und der Anzahl n der Komponenten des Ordnungsparameters, in der Tieftemperaturphase zu einer spontanen Symmetriebrechung mit einer geordneten Phase kommen. Es gibt dann also einen Phasenübergang mit einem $(d-1)$ -dimensionalen kritischen Verhalten bei $T_{c,L} < T_{c,\infty}$, der kritischen Temperatur des Systems endlicher Dicke. Voraussetzung dafür ist, dass $d-1$ größer als die untere kritische Dimension des Systems ist.³ Zusätzlich zu dieser spontanen Symmetriebrechung kann die $O(n)$ -Symmetrie auch von außen, also durch die Anwesenheit von externen *Bulk*- oder Oberflächenfeldern, gebrochen werden.⁴ Auch dann hat der Ordnungsparameter ϕ einen endlichen Erwartungswert $\langle \phi(\mathbf{x}) \rangle \neq 0$. Diese Brechung der Symmetrie, sei sie spontan oder von außen in das System gebracht, führt dazu, dass bereits auf der Ebene der Landau-Theorie — also unter Vernachlässigung der thermischen Fluktuationen — Kräfte zwischen den Platten wirken. Diese genannten Eigenschaften der für den thermodynamischen Casimir-Effekt relevanten wechselwirkenden Systeme verkomplizieren die theoretische Beschreibung erheblich und machen die Analyse zu einem, im Vergleich zum Casimir-Effekt in der QED, ausgesprochen schwierigen Problem.

1992 haben Krech und Dietrich in einer ausführlichen Arbeit [12] die Ergebnisse von Symanzik [13] erweitert und den thermodynamischen Casimir-Effekt in $O(n)$ -symmetrischen, kontinuierlichen ϕ^4 -Theorien im Rahmen der ϵ -Entwicklung um die obere kritische Dimension $d = 4$ untersucht. Dabei wurden verschiedene Randbedingungen analysiert, welche nicht die Symmetrie brechen. Die Rechnungen blieben jedoch auf Temperaturen oberhalb der *Bulk*-kritischen Temperatur beschränkt, das heißt $T \geq T_{c,\infty}$. Grund für diese Einschränkung war, dass die ϵ -Entwicklung nicht dazu in der Lage ist, den bereits erwähnten dimensionellen *Crossover* zu beschreiben, da sich der Entwicklungsparameter hier von $\epsilon = 4 - d$ auf $\epsilon = 5 - d$ ändern müsste. Krech und Dietrich fanden, wie bereits von Fisher und de Gennes vorhergesagt, eine algebraisch $\approx (d-1)\Delta_C L^{-d}$ abfallende Casimir-Kraft am kritischen Punkt sowie exponentiell abfallende Kräfte abseits davon. Die sogenannte Casimir-Amplitude Δ_C ist dabei stark abhängig von den Randbedingungen und kann sogar ihr Vorzeichen ändern. Insbesondere ergaben sich aus den Zweischleifenrechnungen

³Für $O(n)$ -symmetrische Systeme mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen muss also $d > 3$ sein damit $T_{c,L} > 0$ gilt. Spezialfälle stellen das Ising-Modell und das XY-Modell dar. Im Ising-Fall ist aufgrund der diskreten Symmetrie auch im dreidimensionalen Film eine geordnete Tieftemperaturphase möglich. Im XY-Modell ist nur quasi-langreichweitige Ordnung möglich.

⁴In flüssigem Helium sind diese Felder nicht vorhanden. Asymptotisch auf langen Skalen herrschen hier bei $T \approx T_c$ Dirichlet-Randbedingungen auf den Oberflächen [9, 10]. Für binäre Flüssigkeitsgemische kommt ihnen jedoch eine wesentliche Bedeutung zu, da hier symmetriebrechende Oberflächenfelder generisch vorhanden sind [11].

attraktive Wechselwirkungen für gewöhnliche (o) und spezielle (sp) Randbedingungen auf beiden Rändern, während für gemischte Randbedingungen (o,sp) repulsive Kräfte folgen.⁵ Diese Ergebnisse sind im Einklang mit dem von Bachas für wechselwirkende Quantenfeldtheorien hergeleiteten Theorem über die Attraktivität von Casimir-Kräften [14]: Demnach muss die Wechselwirkung zwischen spiegelsymmetrisch angeordneten Objekten attraktiv sein, wenn auch die Randbedingungen mit dieser Symmetrie verträglich sind. Nur bei einer Brechung dieser Symmetrie sind repulsive Kräfte möglich. Der Fokus dieser Arbeit ist die Untersuchung des Einflusses von Randbedingungen auf den Casimir-Effekt.

In einer Arbeit von Schmidt und Diehl [15, 16] wurden die Rechnungen von Krech und Dietrich auf die für verschwindende symmetriebrechende Oberflächenfelder generischen Robin-Randbedingungen

$$\partial_n \phi - c_j \phi = 0, \quad \text{mit } j = 1, 2 \quad (1.1)$$

verallgemeinert. Diese nach dem französischen Mathematiker Gustave Robin benannten Randbedingungen interpolieren zwischen Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen mit den Werten $c_j = \infty$ beziehungsweise $c_j = 0$. Die Parameter c_j^{-1} entsprechen dabei bei linearer Extrapolation einer Eindringtiefe des Feldes in die Oberfläche. Durch die Wahl $c_j = c_{\text{sp}}$ lassen sich auch die speziellen Randbedingungen modellieren. Somit sollten, variiert man die Parameter in geeigneter Weise, Übergänge zwischen attraktivem und repulsivem Verhalten auftreten. Diese *Crossover* wurden in [15, 16] tatsächlich gefunden. Im Rahmen der ϵ -Entwicklung wurde hier die Casimir-Kraft in Zweischleifenordnung am *Bulk*-kritischen Punkt berechnet. Abhängig von der Wahl der Parameter c_1 und c_2 treten dann *Crossover* bei Variation der Filmdicke L auf. Es ist also möglich, dass für kleine L attraktive Kräfte und für große L repulsive Kräfte (und umgekehrt) wirken. Dieser Übergang wird mit einer Skalenfunktion $D(c_1 L^{\Phi/\nu}, c_2 L^{\Phi/\nu})$ beschrieben, durch welche die Casimir-Amplitude ersetzt werden muss. Damit gilt bei Gültigkeit von Robin-Randbedingungen auf den Oberflächen das einfache Potenzgesetz im Abfall der Casimir-Kraft auch am *Bulk*-kritischen Punkt im Allgemeinen nicht mehr. Vielmehr wird das Potenzgesetz durch ein komplizierteres Verhalten ersetzt. Eine Besonderheit tritt im Limes $c_1 = c_2 \rightarrow 0$ auf: Die Funktion D ist hier nichtanalytisch. Physikalisch sind solche Nichtanalytizitäten durch Infrarot(IR)-Divergenzen, also kritisches Verhalten, zu erklären. Der Film mit endlicher Dicke $L < \infty$ sollte jedoch bei $T_{c,\infty}$ kein kritisches Verhalten aufweisen, da der Phasenübergang des Films bei $T_{c,L} < T_{c,\infty}$ auftritt. Somit ist die bei $c_1 = c_2 = 0$ auftre-

⁵Genauer zu diesen Randbedingungen im Sinne der oberflächenkritischen Phänomene wird in Kapitel 1.4 erläutert.

tende Singularität unphysikalisch. Ihre Existenz kann folgendermaßen verstanden werden: Immer wenn in Landau-Theorie bei $T = T_{c,\infty}$ eine Nullmode im Spektrum auftritt, ergibt sich in Landau-Theorie fälschlicherweise $T_{c,L} = T_{c,\infty}$ und die konventionelle renormierungsgruppenverbesserte Störungstheorie bricht am *Bulk*-kritischen Punkt zusammen. Dies wurde bereits in [12, 17] für den Fall (sp, sp)- und periodischer Randbedingungen beobachtet. In einer Arbeit von Diehl, Grüneberg und Shpot [18] wurde gezeigt, wie dieses Problem behoben werden kann. Dazu wird der Beitrag der Nullmode abgespalten, um durch Aufsummation der übrigen Moden eine effektive Theorie für die Nullmode zu erhalten. Auf diese Weise erhält man einen endlichen Beitrag zur Masse und die unphysikalische IR-Divergenz verschwindet. Dieses Verfahren wurde in [19] verwendet, um die IR-Divergenzen aus den Ergebnissen von Krech und Dietrich zu entfernen und in [20], um die unphysikalische Nichtanalytizität in der Skalenfunktion D zu beheben.

Aufgrund der mit dem dimensionellen *Crossover* einhergehenden Probleme bleiben die bisher vorgestellten Methoden der ϵ -Entwicklung auf den Temperaturbereich $T \geq T_{c,\infty}$ beschränkt. Die interessanten Effekte treten beim thermodynamischen Casimir-Effekt jedoch häufig unterhalb dieses Bereichs auf. Insbesondere zeigen die Messungen an flüssigem Helium und die später dazu durchgeführten Monte-Carlo-Simulationen [21, 22], dass die Kraft hier ihr Extremum — ein Minimum — hat. Für das Verhalten der Casimir-Kraft in diesem Bereich gab es lange Zeit nur Rechnungen auf dem Niveau der Landau-Theorie, bei welcher die thermischen Fluktuationen vernachlässigt werden [23, 24]. Gleiches gilt für Systeme mit einer gebrochenen $O(n)$ -Symmetrie, also dreidimensionale Ising-Filme mit einer spontanen Symmetriebrechung oder mit Oberflächenmagnetfeldern [11, 25]. Eine Methode, welche nicht auf ein bestimmtes Temperaturintervall beschränkt ist, ist die Analyse von $O(n)$ -symmetrischen ϕ^4 -Theorien im Limes $n \rightarrow \infty$. In diesem Grenzwert ist die ϕ^4 -Theorie exakt handhabbar und liefert Ergebnisse für alle Temperaturen. Diese Methode wurde von Diehl *et al.* [26, 27] verwendet, um die Temperaturabhängigkeit der Casimir-Kraft in einem Film mit offenen Rändern numerisch exakt zu bestimmen. Die Ergebnisse stimmen qualitativ mit den experimentellen Ergebnissen für suprafluides Helium überein. Zuvor gab es in diesem Modell nur Untersuchungen mit periodischen Randbedingungen [28, 29], welche aufgrund der weiter vorhandenen Translationsinvarianz leichter zu handhaben sind, aber zu qualitativ anderen Ergebnissen führen.

Die in [26, 27] vorgenommene Analyse für $O(n)$ -symmetrische Theorien lässt sich sofort auf Systeme mit symmetriebrechenden Oberflächenfeldern erweitern. Dies wird in Kapitel 3.7 dieser Arbeit präsentiert. Der Einfluss von externen Feldern ist besonders für binäre Flüssigkeitsgemische von wesentlicher Bedeutung, da hier die Symmetrie $\phi \rightarrow -\phi$ bei der Anwesenheit von Oberflächen generisch gebrochen ist. Ein wesentliches Problem soll dabei

nicht verschwiegen werden: Diese Systeme befinden sich in der Ising-Universalitätsklasse und haben somit keine kontinuierliche Symmetrie. Damit treten bei binären Flüssigkeitsgemischen im Tieftemperaturbereich keine Goldstone-Moden auf und die Ergebnisse aus den Rechnungen im Limes $n \rightarrow \infty$ zeigen hier ein qualitativ anderes Verhalten. Für genügend hohe Temperaturen stimmen die hier erzielten Ergebnisse jedoch qualitativ mit den zuvor im Rahmen der Landau-Theorie erhaltenen überein.

Der Rest dieser Arbeit gliedert sich folgendermaßen: In den verbleibenden Kapiteln von Teil 1 werden zunächst die Grundlagen zum quantenelektrodynamischen und thermodynamischen Casimir-Effekt erläutert. Dabei wird insbesondere auf relevante Experimente und theoretische Arbeiten eingegangen. Anschließend wird das Konzept des *Finite-Size-Scaling* vorgestellt, eine kurze Einführung in oberflächenkritische Phänomene gegeben und das in dieser Arbeit untersuchte ϕ^4 -Modell in der Filmgeometrie eingeführt.

In Teil 2 wird dieses Modell mit Robin-Randbedingungen auf den Oberflächen am *Bulk*-kritischen Punkt im Rahmen der renormierungsgruppenverbesserten Störungstheorie in Zweischleifenordnung analysiert. Dazu werden eine Renormierungsgruppenanalyse, die störungstheoretische Behandlung, die Regularisierung sowie die Renormierung des Modells und die daraus erhaltenen Ergebnisse präsentiert.⁶ Anschließend wird die Umordnung der Störungstheorie zur Vermeidung der unphysikalischen IR-Divergenzen bei $c_1 = c_2 = 0$ vorgestellt und durchgeführt.

In Teil 3 wird der Limes $n \rightarrow \infty$ der $O(n)$ -symmetrischen ϕ^4 -Theorie untersucht. Dazu wird zunächst das kontinuierliche Modell betrachtet und ein System von selbstkonsistenten Gleichungen für die freie Energie dieses Modells hergeleitet. Anschließend wird eine zur numerischen Behandlung des Systems notwendige Diskretisierung eingeführt. Die hier erhaltenen Gleichungen werden zunächst am kritischen Punkt und anschließend für alle Temperaturen gelöst, um so die Temperaturabhängigkeit der Casimir-Kraft zu bestimmen. Zudem wird das Tieftemperaturverhalten dieser Kraft diskutiert. Schließlich werden die zur Berücksichtigung von symmetriebrechenden Feldern nötigen Modifikationen erläutert und die daraus folgenden Kräfte bei Anwesenheit von *Bulk*- und Oberflächenfeldern numerisch bestimmt. Verschiedene Erweiterungsmöglichkeiten werden in Kapitel 3.8 erläutert. Zuletzt geben vier Anhänge A.1–A.4 Details zu den Rechnungen und weitere Ergänzungen.

In der gesamten Arbeit soll die folgende, in der Beschreibung kritischer Phänomene übliche Notation verwendet werden (siehe zum Beispiel [30, Anhang]): Für die Eigenschaft

⁶Diese Rechnungen und Ergebnisse sind teilweise auch schon in [15] enthalten. Der Vollständigkeit halber sollen sie hier jedoch nochmal nachvollzogen werden.

asymptotisch proportional einer Funktion $f(x)$ werde

$$f(x) \underset{x \rightarrow 0^+}{\sim} x^\lambda \Leftrightarrow \lim_{x \rightarrow 0^+} \frac{\log |f(x)|}{\log x} = \lambda \quad (1.2)$$

geschrieben. Die Eigenschaft *asymptotisch gleich* zweier Funktionen $f(x)$ und $g(x)$ werde als

$$f(x) \underset{x \rightarrow 0^+}{\approx} g(x) \Leftrightarrow \lim_{x \rightarrow 0^+} \frac{f(x)}{g(x)} = 1 \quad (1.3)$$

und die Proportionalität als

$$f(x) \propto g(x) \Leftrightarrow \frac{f(x)}{g(x)} = 1 = \text{const.} \quad \forall x \quad (1.4)$$

geschrieben. Auf die Angabe des betrachteten Grenzfalles (also zum Beispiel $x \rightarrow 0^+$) wird an vielen Stellen verzichtet, wenn er sich aus dem Zusammenhang eindeutig ergibt. Ferner bezeichne das Symbol \simeq die Eigenschaft *ungefähr gleich*, also zum Beispiel $\sqrt{e + 2\pi} \simeq 3$.

1.1 Bereits veröffentlichte Teile dieser Arbeit

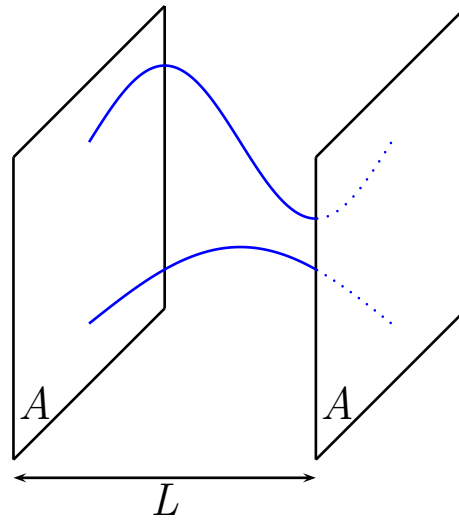
Viele Ergebnisse der vorliegenden Arbeit sind bereits publiziert [16, 20, 26, 27]. Weite Teile von Teil 2 sowie Anhang A.1 dieser Arbeit finden sich in [16, 20]. Die meisten Ergebnisse aus den Kapiteln 3.2 – 3.6.2 sowie Anhang A.4 sind in [26, 27] enthalten.

Die in den Kapiteln 3.7 – 3.8 sowie in den Anhängen A.2 – A.3 präsentierten Ergebnisse sind bislang unveröffentlicht.

1.2 Casimir-Effekt in der Quantenelektrodynamik

Befinden sich makroskopische, metallische Körper in einem Vakuum, so wirken zwischen ihnen Kräfte, die nicht klassisch erklärt werden können. Sie gehören zu den Beispielen, bei denen quantenmechanische Effekte makroskopisch messbare Auswirkungen haben. Diese Kräfte werden nach ihrem Entdecker, dem niederländischen Physiker H. B. G. Casimir, in der Literatur als Casimir-Kräfte bezeichnet. Casimir untersuchte im Jahr 1948 den Einfluss von Vakuumfluktuationen auf zwei in das Vakuum eingebettete, perfekt leitende und sich parallel im Abstand L voneinander befindende Metallplatten der Fläche A [1]. Dabei nahm er an, dass der Abstand L klein gegen die Kantenlänge der Platten sei. Mit Hilfe einer einfachen Rechnung zeigte Casimir, dass in dieser Konfiguration eine langreichweitige, attraktive Kraft zwischen den Platten wirkt, die mit der vierten Potenz des

Abbildung 1.1: Schematische Darstellung der ursprünglich von Casimir betrachteten Geometrie zweier paralleler Platten: Aufgrund der Randbedingungen auf den Oberflächen sind zwischen den Platten in der senkrechten Richtung nur diskrete Moden erlaubt. Die Moden in den parallelen Richtungen und alle sich außerhalb der Platten befindenden Moden bleiben kontinuierlich.



Plattenabstands L verschwindet.

Dieser Effekt kann durch aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelation auftretende Vakuumfluktuationen — also Schwankungen des elektromagnetischen Feldes — erklärt werden. Die beiden metallischen Platten erzwingen durch die angenommene perfekte Leitfähigkeit das Verschwinden der parallelen Komponente des elektrischen Feldes \mathbf{E} auf ihren Oberflächen. Genauso muss hier die Normalableitung der parallelen Komponente des magnetischen Feldes \mathbf{B} verschwinden. Somit erfüllt das \mathbf{E} -Feld Dirichlet-Randbedingungen und das \mathbf{B} -Feld Neumann-Randbedingungen auf den Oberflächen. Die Moden k_{\perp} senkrecht zu den Platten können damit nur diskrete Werte $k_{\perp} = j\pi/L$ mit $j \in \mathbb{N}$ annehmen, wobei die Nullmode $k_{\perp} = 0$ nur beim Magnetfeld erlaubt ist. Die Moden \mathbf{k}_{\parallel} parallel zu den Platten unterliegen keiner solchen Einschränkung und bleiben damit kontinuierlich $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_{1,\parallel}, k_{2,\parallel}) \in \mathbb{R}^2$.

Motiviert durch diese Überlegungen berechnete Casimir die Differenz der Nullpunktsenergien

$$\mathcal{E}(L) = \frac{1}{2} \sum_{\text{Moden}} \hbar c |\mathbf{k}| \quad (1.5)$$

der beiden Fälle $L = \sqrt{A}$ und $L \ll \sqrt{A}$. Er fand eine Abhängigkeit dieser Größe von dem Abstand L zwischen den Platten. Die Existenz dieser abstandsabhängigen Energie impliziert sofort, dass eine effektive Kraft zwischen den Platten wirken muss. Nach Casimirs Rechnung ist diese Kraft attraktiv und — normiert man sie auf die Plattenoberfläche A — gegeben durch

$$\frac{\mathcal{F}_C(L)}{A} = -\frac{\pi^2 \hbar c}{240 L^4}. \quad (1.6)$$

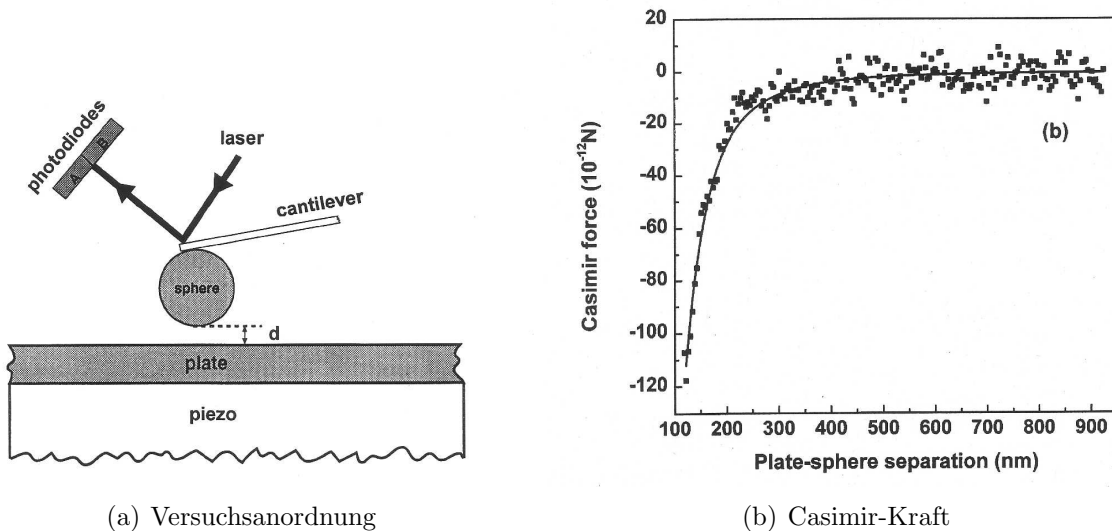


Abbildung 1.2: Experimentelle Realisierung des quantenelektrodynamischen Casimir-Effekts: Der von Mohideen und Roy [3] verwendete Versuchsaufbau ist in Abbildung (a) schematisch dargestellt. Abbildung (b) zeigt die damit gemessene Casimir-Kraft als Funktion des Abstands zwischen Ebene und Kugel. Die durchgezogene Linie entspricht der um Einflüsse der Oberflächenrauigkeit, endlicher Leitfähigkeit, Krümmung sowie Temperatur der Kugel korrigierten theoretischen Vorhersage. [Entnommen Referenz [3]]

Auch wenn Casimirs Rechnung zunächst auf die Plattengeometrie beschränkt ist, verallgemeinert sich dieser Effekt auf beliebige im Vakuum angeordnete makroskopische Körper, die das Spektrum der Vakuumfluktuationen beeinflussen. Diese Kräfte werden als (quantenelektrodynamische) Casimir-Kräfte bezeichnet. Eine äquivalente Formulierung für diese Kräfte erhält man auch durch Berücksichtigung der Retardierung von London-van der Waals-Kräften [31] zwischen fluktuierenden Dipolen in den Oberflächen [32]. Wirken diese Kräfte zwischen mikroskopischen Objekten, werden sie häufig als Casimir-Polder-Kräfte bezeichnet. Sind nur makroskopische Objekte involviert, so werden sie meist Casimir-Kräfte genannt.

Erste Versuche der experimentellen Überprüfung von Casimirs Vorhersage wurden bereits wenige Jahre später durchgeführt [33–36]. In diesen Experimenten ist es jedoch nicht gelungen, die zur Überprüfung von Gleichung (1.6) erforderliche Genauigkeit zu erreichen. Auch wenn die experimentellen Ergebnisse nicht im Widerspruch zu Casimirs Rechnung standen, so konnte insbesondere das Verschwinden der Casimir-Kraft mit L^{-4} nicht verifiziert werden. Dies gelang erst in den 1990er Jahren mit den von Lamoreaux durchgeführten Experimenten [2]. Dabei wurde, um die Schwierigkeiten beim parallelen Ausrichten der Platten zu umgehen, eine andere Geometrie untersucht. Wie auch schon zuvor in [34]

und [37] wurde hier statt der Zweiplattengeometrie eine beschichtete sphärische Linse vor einer Ebene betrachtet. Zur Auswertung wurden die experimentellen Ergebnisse mit einer Theorie, welche aufgrund der endlichen Krümmung der Linse modifiziert wurde, verglichen. Diese Modifikation geht auf Derjaguin zurück [38] und wird auch als *Proximity-Force-Approximation* bezeichnet. Zudem wurde der Einfluss von endlichen Temperaturen und Leitfähigkeiten berücksichtigt. Somit wurden Abweichungen von 5% zwischen Experiment und Theorie gefunden. Im Anschluss an diese Experimente wurden weitere, verfeinerte Versuche durchgeführt. Einen Überblick darüber geben zum Beispiel die Referenzen [39–41]. Exemplarisch sei das von Mohideen und Roy durchgeführte Experiment beschrieben [3]: Der hier verwendete Versuchsaufbau ist schematisch in Abbildung 1.2(a) dargestellt. Dabei wurde die Kraft zwischen einem Saphir-Blättchen und einer Polystyrol-Kugel mit einem Durchmesser von $196\mu\text{m}$ für Abstände zwischen 0.1 bis $0.9\mu\text{m}$ gemessen. Beide Körper wurden metallisch beschichtet. Mit einem piezoelektrischen Element konnte der Abstand zwischen Kugel und Blättchen eingestellt werden. Die Auslenkung der an dem Arm eines Rasterkraftmikroskopes befestigten Kugel konnte mit einem daran reflektierten und über ein Photodiodenarray detektierten Laserstrahl gemessen werden. Die auf die Kugel wirkende Kraft konnte dann anhand der Eigenschaften des Arms bestimmt werden. Abbildung 1.2(b) zeigt die erhaltenen Messergebnisse zusammen mit einer theoretischen Vorhersage, bei welcher — zusätzlich zu den in [2] berücksichtigten Korrekturen — die Oberflächenrauigkeit der Körper miteinbezogen wurde. Mohideen und Roy fanden so, abhängig von dem Abstand zwischen Kugel und Ebene, eine Abweichung zwischen Theorie und Experiment von nur 1–2%.

Von fundamentaler theoretischer und experimenteller Bedeutung ist die Frage nach dem Vorzeichen der Casimir-Kraft. Dies ist von großem Interesse, da attraktive Casimir-Kräfte dazu führen können, dass mikroelektromechanische Systeme (MEMS) aufgrund von Haftkräften zwischen den beweglichen Teilen versagen [42–46]. Somit ist das Interesse an Systemen, die repulsive Kräfte aufweisen, groß. In [47] wurde ein Beispiel für solche repulsiven Kräfte gefunden. Dabei wurde ein von Lifschitz vorgeschlagenes System untersucht, bei dem Kräfte zwischen dielektrischen Filmen unterschiedlicher Dielektrizitätskonstanten betrachtet werden und ebenfalls Casimir-Kräfte auftreten [48, 49]. In [47] wurden die verwendeten Materialien so gewählt, dass — wie von Lifschitz vorhergesagt — auch repulsive Kräfte auftreten können. Für weitere Experimente zu repulsiven Casimir-Kräften sei auf [50, Kapitel XIII] verwiesen. Auch die theoretische Beschreibung repulsiver Casimir-Kräfte hat große Fortschritte gemacht: Kenneth und Klich haben gezeigt, dass für spiegelsymmetrische Konfigurationen der Körper bei wechselwirkungsfreien Feldtheorien immer attraktive Kräfte wirken [51]. Bachas ist es gelungen, dieses Ausschlusskriterium

für repulsive Kräfte auf wechselwirkende Quantenfeldtheorien zu erweitern [14]. Voraussetzung dafür ist nur, dass die Theorie reflektionspositiv ist. Zudem ist es mit Hilfe der Streuphasenentwicklung mittlerweile möglich, Casimir-Kräfte von komplizierten Geometrien zu berechnen und somit für die Experimente relevante Korrekturen zur *Proximity-Force-Approximation* zu untersuchen (siehe zum Beispiel [52] und die dort angegebenen Referenzen). Weitere Felder von großem theoretischen Interesse, welche zur Zeit äußerst kontrovers diskutiert werden, sind die Einflüsse endlicher Temperaturen [39] und die Frage nach Nichtgleichgewichtseffekten wie zum Beispiel Reibungskräften zwischen den Oberflächen. Für weitere Informationen zu diesen und weiteren Themen sei auf die Bücher von Milton [53] und Mostepanenko und Trunov [54], die Übersichtsartikel von Milton [55], Bordag *et. al.* [56] sowie die Sammlungen von Referenzen [50, 57] verwiesen.

1.3 Casimir-Effekt in der Thermodynamik

Mit der grundlegenden Arbeit von Fisher und de Gennes begann 1978 ein neues Kapitel in der Geschichte des Casimir-Effekts [5]. Sie erkannten, dass aufgrund des zugrunde liegenden Mechanismus — ein Feld mit langreichweitig korrelierten Fluktuationen wird durch makroskopische Objekte in seiner räumlichen Ausdehnung beschränkt — analoge Kräfte auch in anderen Systemen auftreten müssten. In [5] wurde gleich das inzwischen prominenteste Beispiel dieser Casimir-artigen Kräfte postuliert: Es tritt in der statistischen Physik in der Umgebung des kritischen Punktes von Phasenübergängen zweiter Ordnung auf. Die Rolle der Vakuumfluktuationen des elektromagnetischen Feldes übernehmen hier die thermischen Fluktuationen des den Phasenübergang beschreibenden Ordnungsparameterfeldes. Wie auch die Fluktuationen des Vakuums sind diese am kritischen Punkt langreichweitig korreliert, da die Korrelationslänge ξ hier divergiert. Die Begrenzung des fluktuierenden Mediums durch Grenzflächen oder makroskopische Objekte führt aufgrund der Randbedingungen auf den Oberflächen wieder zu einer Modifikation des Spektrums der Fluktuationen. Ganz analog zum Casimir-Effekt in der Quantenelektrodynamik treten also am kritischen Punkt langreichweitige, durch kritische Fluktuationen hervorgerufene Kräfte auf. Abseits des kritischen Punktes sind die Fluktuationen nur bis zu der hier endlichen Korrelationslänge ξ korreliert. Damit sind die resultierenden Kräfte hier im Allgemeinen nicht langreichweitig. Sie fallen dann also nicht mit einem Potenzgesetz ab, sondern vielmehr exponentiell.

Dieser Effekt wird als thermodynamischer oder kritischer Casimir-Effekt bezeichnet.⁷ Wie

⁷Die Bezeichnung kritischer Casimir-Effekt wird manchmal verwendet, um eine Beschränkung auf den kritischen Punkt zu bezeichnen. Im Gegensatz dazu wird gelegentlich mit dem Adjektiv *thermodyna-*

auch beim quantenelektrodynamischen Casimir-Effekt ist die einfachste Systemform, in der der thermodynamische Casimir-Effekt auftritt, die Filmgeometrie. Sie hat sich zu dem am meisten behandelten Modell entwickelt, da sie sowohl experimentell als auch theoretisch zugänglich ist. Hier wird also ein kritisches Medium betrachtet, welches durch zwei ebene, parallele Begrenzungen \mathfrak{B}_j , $j = 1, 2$ auf eine Schicht der Dicke L beschränkt wird. Die freie Energie dieses Systems lässt sich dann in vier Anteile aufspalten [58]

$$f_L(T) := \lim_{A \rightarrow \infty} \frac{F_L(T)}{Ak_B T} = Lf_b(T) + f_{s,1}(T) + f_{s,2}(T) + f_{\text{res}}(L, T). \quad (1.7)$$

Dabei ist $f_b(T)$ die reduzierte freie Energie pro Volumen des *Bulk*-Systems, $f_{s,j}(T)$ die reduzierte Exzess-Freie-Energie der Oberfläche \mathfrak{B}_j und $f_{\text{res}}(L, T)$ der *Finite-Size*-Anteil der reduzierten freien Energie. Letztgenannter verschwindet im Limes $L \rightarrow \infty$. Er ist der einzige mit einer nicht-trivialen Abhängigkeit von der Filmdicke L und somit ursächlich für die Casimir-Kraft in diesem System. Die reduzierte Casimir-Kraft pro Fläche (Casimir-Druck) kann daraus oder aus der Exzess-Freien-Energie $f_{\text{ex}}(L, T) := f_L(T) - Lf_b(T)$ durch Ableiten nach L bestimmt werden:

$$\mathcal{F}_C(L, T) = -k_B T \frac{\partial f_{\text{res}}(L, T)}{\partial L} = -k_B T \frac{\partial f_{\text{ex}}(L, T)}{\partial L}. \quad (1.8)$$

Das Verhalten des *Finite-Size*-Anteils der freien Energie lässt sich in der Nähe des kritischen Punktes für große Längenskalen mit der Theorie des *Finite-Size-Scaling* beschreiben [58, 59]: Da in dem betrachteten System nur zwei relevante Längenskalen vorkommen — die Filmdicke L und die *Bulk*-Korrelationslänge ξ_∞ — kann das Skalenverhalten der thermodynamischen Größen durch das Verhältnis L/ξ_∞ beschrieben werden. Um zu gewährleisten, dass es wirklich nur zwei relevante Längenskalen im System gibt, muss dabei die womöglich vorhandene Gitterkonstante a klein gegen die Filmdicke und die Korrelationslänge sein. Der *Finite-Size*-Anteil der freien Energie hat dann die Skalenform

$$f_{\text{res}}(L, T) \approx L^{-(d-1)} \Theta(L/\xi_\infty) \quad (1.9)$$

mit der Skalenfunktion $\Theta(x)$. Durch Ableiten dieser Gleichung nach L erhält man die analoge Skalenform der reduzierten thermodynamischen Casimir-Kraft pro Fläche

$$\beta \mathcal{F}_C(L, T) \approx L^{-d} \vartheta(L/\xi_\infty) \quad (1.10)$$

misch betont, dass auch Temperaturen abseits von T_c betrachtet werden.

mit der Skalenfunktion $\vartheta(x)$. Die beiden Skalenfunktionen $\Theta(x)$ und $\vartheta(x)$ sind — bis auf die Festlegung der nicht-universellen Skala der Skalenvariablen x — universell. Dies bedeutet, dass sie nur von den groben Eigenschaften des Systems abhängen, nicht aber von den mikroskopischen Details. Grobe Eigenschaften bedeutet hier die Universalitätsklasse des *Bulk*-Systems, festgelegt für kurzreichweitig wechselwirkende, isotrope Systeme durch die Dimensionalität d und die Anzahl der Ordnungsparameterkomponenten n sowie die Universalitätsklasse der Oberflächen, beschrieben durch die Randbedingungen. Insbesondere Letztere haben einen großen Einfluss auf das Verhalten der Skalenfunktionen. Sie können sogar das Vorzeichen der Casimir-Kraft umkehren und somit zu repulsiven Kräften führen. Die Analyse dieser Auswirkungen ist ein wesentlicher Bestandteil dieser Arbeit.

Am *Bulk*-kritischen Punkt $T_{c,\infty}$ divergiert die Korrelationslänge ξ_∞ . Der Wert der Skalenfunktion Θ bei $T_{c,\infty}$ wird als Casimir-Amplitude

$$\Delta_C := \Theta(0) \tag{1.11}$$

bezeichnet.⁸ Daraus folgt unmittelbar, dass die Casimir-Kraft bei $T_{c,\infty}$ langreichweitig ist und mit dem Potenzgesetz

$$\beta\mathcal{F}_C(L, T) \approx (d-1)\Delta_C L^{-d} \tag{1.12}$$

abfällt. Abseits der *Bulk*-kritischen Temperatur ist die Korrelationslänge endlich. Die resultierenden Kräfte sind dann im Allgemeinen nicht mehr langreichweitig, sondern fallen exponentiell ab. Eine Ausnahme stellen Systeme mit kontinuierlichen Symmetrien dar. Die hier im Tieftemperaturlimit auftretenden Goldstone-Moden können auch unterhalb von $T_{c,\infty}$ zu langreichweitigen Kräften führen [61].

Die Vorhersage von Fisher und de Gennes beschränkte sich zunächst auf binäre Flüssigkeitsgemische. Die Vorhersage kann aber sofort auf andere Systeme mit Phasenübergängen zweiter Ordnung, also zum Beispiel n -Vektor-Magnete oder Helium in der Nähe des Lambda-Übergangs, übertragen werden. Für die experimentelle Nachweisbarkeit ist es dabei natürlich von Bedeutung, dass es sich um Phasenübergänge in Flüssigkeiten oder Gasen handelt, da die Kräfte durch Abstandsänderungen der Objekte nachgewiesen werden und dies in Kristallen nicht realisierbar ist.

Der erste experimentelle Nachweis des thermodynamischen Casimir-Effekts gelang Gar-

⁸Voraussetzung dafür ist natürlich die Existenz dieses Wertes. Dies muss jedoch nicht immer der Fall sein. Ein Beispiel hierfür ist das zweidimensionale Ising-Modell auf einem Rechteck mit offenen Rändern. Hier gilt $\lim_{x \rightarrow 0} \Theta(x) = \infty$ [60].

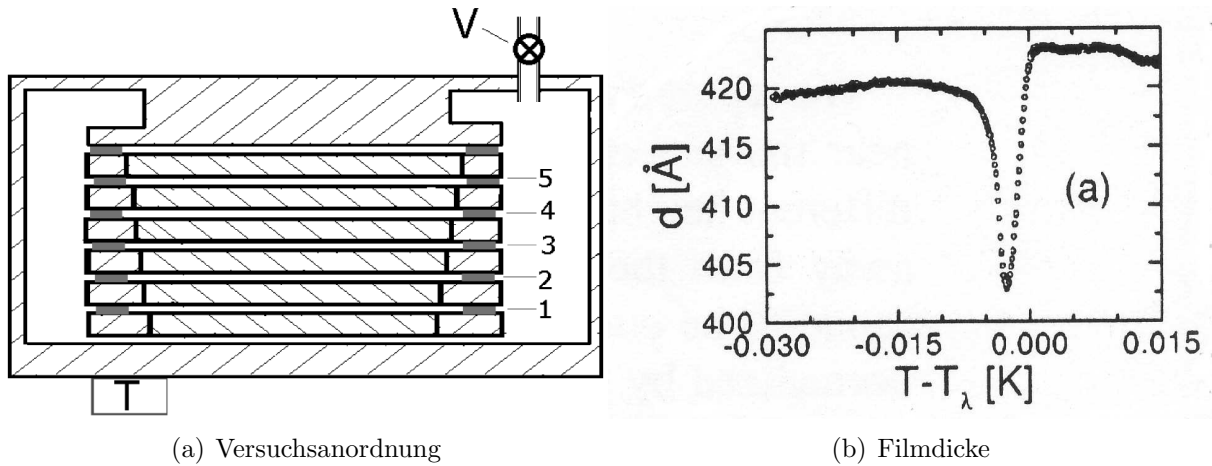


Abbildung 1.3: Das von Garcia und Chan durchgeführte Experiment zum thermodynamischen Casimir-Effekt in suprafluidem Helium: Der schematische Versuchsaufbau (a) und die Filmdicke in Abhängigkeit der Temperatur (b). [Entnommen Referenz [6]]

cia und Chan 1999 durch Messungen an flüssigem Helium in der Nähe des Übergangs zwischen suprafluider und normalfluider Phase [6]. Dieser Übergang tritt bei der sogenannten Lambda-Linie auf, einer Linie von Phasenübergängen zweiter Ordnung. Der Ordnungsparameter, die suprafluide Dichte, verschwindet dabei kontinuierlich bei T_λ . In den Experimenten wurde ausgenutzt, dass flüssiges Helium aufgrund der van der Waals-Wechselwirkung dazu neigt, metallische Oberflächen zu benetzen. Es bilden sich also dünne Filme auf den Oberflächen, deren Dicke sich an der Übergangstemperatur T_λ aufgrund der Casimir-Kraft verringern sollte. Dies wurde in den Experimenten tatsächlich bestätigt. Der dazu verwendete Versuchsaufbau ist in Abbildung 1.3(a) schematisch dargestellt: Über einem Heliumreservoir wurden in verschiedenen Höhen Kupferelektroden angebracht. Auf diesen bildeten sich dünne Filme von flüssigem Helium, deren Filmdicke d durch eine Analyse der Energiebilanz zwischen van der Waals-Wechselwirkung, Casimir-Wechselwirkung und potentieller Energie gewonnen werden kann. Es gilt [6, 9, 62]:

$$\frac{\gamma_0}{d^3} \left(1 + \frac{d}{d_{1/2}} \right)^{-1} + \frac{k_B T_\lambda V}{d^3} \vartheta(td^{1/\nu}) = mgh. \quad (1.13)$$

Aus dieser Gleichung kann nun ein Zusammenhang zwischen der Höhe h der Kupferplatte über dem Reservoir und der zugehörigen Filmdicke d gewonnen werden. Dabei gibt γ_0 die Stärke der van der Waals-Wechselwirkung an und der Parameter $d_{1/2}$ beschreibt für $d \gg d_{1/2}$ auftretende Retardierungseffekte. g ist die Erdbeschleunigung, V das spezifische

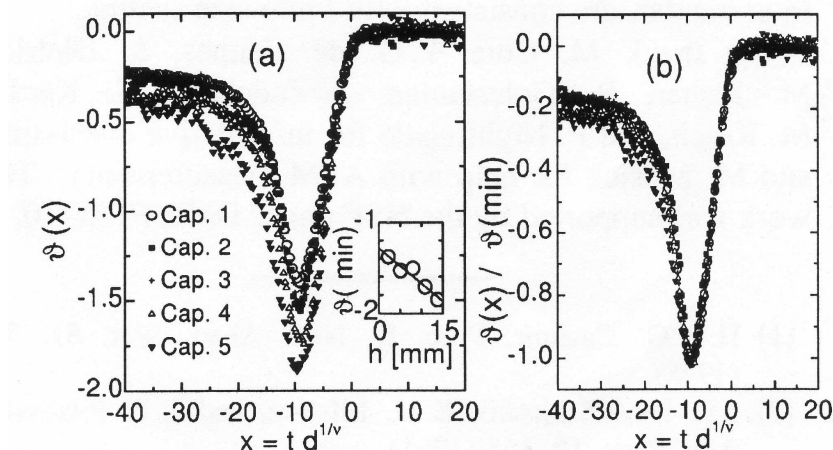


Abbildung 1.4: Die experimentellen Ergebnisse für die Skalenfunktion der Kraft: Durch eine Normierung auf das Minimum der Skalenfunktion (rechtes Bild) wird der unzureichende Datenkollaps (linkes Bild) verbessert. [Entnommen Referenz [6]]

Volumen und m die Atommasse von Helium. In der Skalenvariablen⁹ taucht die reduzierte Temperatur $t = (T - T_\lambda)/T_\lambda$ sowie der Exponent ν der Korrelationslänge auf. Garcia und Chan ist es gelungen, über eine Messung der Kapazitäten benachbarter Plattenpaare die verschiedenen Filmdicken zu bestimmen. Unter Abwesenheit der Casimir-Kraft $\propto \vartheta$ würde sich aus Gleichung (1.13) eine temperaturunabhängige Filmdicke — nur abhängig von der Höhe h — ergeben. Abweichungen davon werden vom Casimir-Effekt verursacht. Im Experiment wurden Filmdicken mit dem in Abbildung 1.3(b) gezeigten Verlauf in Abhängigkeit der Temperatur gefunden. Man erkennt deutlich das scharfe Minimum unterhalb von T_λ . Zudem sind die Werte von d für $T < T_\lambda$ kleiner als für $T > T_\lambda$. Das scharfe Minimum kann durch die langreichweitige, attraktive Casimir-Kraft am kritischen Punkt erklärt werden. Die Verringerung der Filmdicke für $T \ll T_\lambda$ hat ihre Ursache in den ebenfalls langreichweitige Kräfte erzeugenden Goldstone-Moden. Aus der Temperaturabhängigkeit der Filmdicken wurde dann die Skalenfunktion ϑ bestimmt. Im linken Teil von Abbildung 1.4 sind die Ergebnisse für die verschiedenen Filme in einem Skalenplot gegen die Skalenvariable $tL^{1/\nu}$ aufgetragen. Der noch nicht vollständige Datenkollaps der Kurven zu verschiedenem h wurde im rechten Teil von Abbildung 1.4 durch die Normierung der Kurven auf die Tiefe des Minimums verbessert. Inzwischen ist es in anderen Messungen gelungen, den Datenkollaps ohne Normierung zu erhalten [64]. Die Skalenfunk-

⁹Oberhalb der kritischen Temperatur ist diese Wahl der Skalenvariablen $x = tL^{1/\nu}$ äquivalent zu $L = d/\xi_\infty$, da sich aus dem Verhalten der Korrelationslänge $\xi_\infty(t) \sim |t|^{-\nu}$ der Zusammenhang $x \sim L^{1/\nu}$ ergibt. Unterhalb der kritischen Temperatur ist diese Äquivalenz für $O(n)$ -symmetrische Modelle mit $n \geq 2$ nicht gegeben (siehe zum Beispiel [63]).

tionen $\vartheta(x)$ und $\Theta(x)$ haben verschiedene charakteristische Eigenschaften, die theoretisch und experimentell von großem Interesse sind:

- (i) Die Kraft ist im gesamten Temperaturbereich attraktiv.
- (ii) Für große Temperaturen $x \gg 1$ verschwinden die Skalenfunktionen exponentiell.
- (iii) Die Skalenfunktionen haben einen relativ kleinen kritischen Wert bei $x = 0$.
- (iv) Unterhalb der kritischen Temperatur befindet sich ein stark ausgeprägtes, glattes Minimum.
- (v) Die Grenzwerte für tiefe Temperaturen sind endlich.

Eigenschaft (ii) wurde bereits in der Veröffentlichung von Fisher und de Gennes erkannt, und auch die Existenz eines endlichen Grenzwertes für $T \rightarrow 0$ (Eigenschaft (v)) ist aufgrund der hier auftretenden Goldstone-Moden lange bekannt. Die theoretische Beschreibung der übrigen Merkmale ist deutlich schwieriger: Eigenschaft (i) folgt aus dem von Bachas [14] formulierten Satz über die Attraktivität von Casimir-Kräften bei spiegelsymmetrischer Anordnung der Körper für reflektionspositive, wechselwirkende Theorien. Aus renormierungsgruppenverbesserten, störungstheoretischen Rechnungen in $\epsilon = 4 - d$ Dimensionen erhält man die Eigenschaften (i)–(iii) [12, 13, 17]. Der Bereich unterhalb der *Bulk*-kritischen Temperatur bleibt diesen Methoden jedoch verschlossen. Dieser Temperaturbereich wurde in [23, 24] im Rahmen der renormierungsgruppenverbesserten Landau-Theorie untersucht. Zwar konnte auf diese Weise das Minimum beschrieben werden, jedoch war das Minimum um einen Faktor von etwa fünf zu tief und nicht glatt, also nicht stetig differenzierbar.¹⁰ Des Weiteren konnte mit diesem Zugang das Tieftemperaturverhalten nach Eigenschaft (v) nicht korrekt beschrieben werden: Die hier gefundenen Skalenfunktionen verschwanden im Limes $x \rightarrow -\infty$, da die Ansätze nicht dazu in der Lage waren, die hier auftretenden Goldstone-Moden zu beschreiben. Dieser Grenzwert wurde von Li und Kardar in [66] bestimmt. Zudem wurden in [67] Abweichungen zwischen Experiment und Theorie durch das Auftreten von Oberflächenwellen erklärt.

Ein theoretischer Zugang, der alle Eigenschaften (i)–(iv) beschreiben kann, war lange Zeit unbekannt. In [21] und [22] ist es erstmals gelungen, mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen des zweidimensionalen XY-Modells mit offenen Randbedingungen, welches das gleiche asymptotische Verhalten aufweist, für alle Temperaturen quantitative korrekte

¹⁰Kurz vor Fertigstellung der vorliegenden Arbeit hat Dohm ein Näherungsverfahren zur Beschreibung des Minimums der Skalenfunktion vorgestellt [65]. Mit einem *Finite-Size*-Renormierungsgruppen-Ansatz wurde die Minima der Skalenfunktionen für $n = 1, 2, 3$ beschrieben. Diese Theorie ist jedoch nicht dazu in der Lage, den Tieftemperaturlimit korrekt zu beschreiben.

Skalenfunktionen zu ermitteln. Ein analytischer Ansatz fehlte aber weiterhin, bis in [26,27] das erste Mal exakte, qualitativ korrekte Ergebnisse für alle Temperaturbereiche aus einem Ansatz erhalten wurden. Hier wurde die Skalenfunktionen eines $O(n)$ -symmetrischen Modells im Limes $n \rightarrow \infty$ mit offenen Randbedingungen exakt berechnet. Die Ergebnisse haben alle genannten Eigenschaften (i)–(v). Insbesondere weisen die Skalenfunktionen, im Gegensatz zu den schon vorher bekannten Skalenfunktionen des *Large- n* -Modells mit periodischen Randbedingungen [28, 29], ein ausgeprägtes Minimum unterhalb der *Bulk*-kritischen Temperatur auf. Eine Theorie, die das Verhalten der Skalenfunktionen auch quantitativ beschreiben kann, bleibt aber weiterhin aus.

Der thermodynamische Casimir-Effekt ist mittlerweile auch in dem ursprünglich von Fisher und de Gennes betrachteten System von binären Flüssigkeitsgemischen experimentell nachgewiesen. Diese bestehen aus einem Gemisch zweier Flüssigkeiten (Spezies A und B) mit den Masseanteilen c_A und $c_B = 1 - c_A$. Für hohe Temperaturen sind die beiden Spezies homogen verteilt und perfekt gemischt.¹¹ Erhöht man die Temperatur, so entmischen die beiden Flüssigkeiten bei einer bestimmten Temperatur $T_1(c_A)$. Hier tritt im Allgemeinen ein Phasenübergang erster Ordnung auf, charakterisiert durch einen Sprung des Ordnungsparameters $c_A(\mathbf{r}) - c_A$, also der lokalen Abweichung der Konzentration der Spezies A von ihrem Mittelwert. Am Extremum (Maximum) der Kurve $T_1(c_A)$ tritt ein Phasenübergang zweiter Ordnung, also ein kritischer Punkt mit divergierender Korrelationslänge, auf. Dieser Punkt ist definiert durch das kritische Mischungsverhältnis $c_{A,c}$ und die kritische Temperatur T_c . Wird in ein solches Flüssigkeitsgemisch ein Körper gebracht, so wird sich eine Spezies bevorzugt an der Oberfläche dieses Objekts befinden und der Ordnungsparameter wird hier lokal vergrößert beziehungsweise verringert. Die Reichweite dieses Effekts wird auf großen Skalen durch die Korrelationslänge ξ beschrieben. Am kritischen Punkt, wo also die Korrelationslänge divergiert, können somit weit voneinander entfernte Objekte Einflüsse aufeinander haben, was zu langreichweitigen Casimir-Kräften führt.

Entmischungübergänge in binären Flüssigkeitsgemischen sind in derselben Universalitätsklasse wie das Ising-Modell. Die Präferenz der Oberflächen für eine der beiden Spezies führt zu Oberflächenmagnetfeldern in dem korrespondierenden Ising-Modell, also zu Randbedingungen, bei denen die Spins auf der Oberfläche auf die Werte $+1$ oder -1 gesetzt werden. Diese Randbedingungen werden als (+)- beziehungsweise (–)-Randbedingungen bezeichnet. Abweichungen der Differenz der chemischen Potentiale von dem kritischen Wert $\mu_A - \mu_B - (\mu_A - \mu_B)_c$ können durch symmetriebrechende *Bulk*-Felder

¹¹Die Beschreibung gilt für einen oberen kritischen Entmischungspunkt. Es gibt auch untere Entmischungspunkte, bei denen Hoch- und Tieftemperaturphase vertauscht sind.

beschrieben werden. Aufgrund dieses Zusammenhangs sind die Skalenfunktionen binärer Flüssigkeitsgemische identisch mit denen von Ising-Modellen. Sie wurden erstmals 2007 mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen in der Filmgeometrie mit $(+, +)$ - und $(+, -)$ -Randbedingungen bestimmt. Diese weisen qualitative Unterschiede zu den Skalenfunktionen von flüssigem Helium auf: Aufgrund der diskreten Symmetrie existieren hier keine Goldstone-Moden, was damit zum Verschwinden der Casimir-Kraft bei tiefen Temperaturen führt. Zudem führt die Existenz von externen Feldern zu einem nichtverschwindenden Ordnungsparameterprofil, auch in der Hochtemperaturphase. Dieses Profil liefert einen zusätzlichen Beitrag zur Größenabhängigkeit der freien Energie und somit auch zur Casimir-Kraft. Damit findet man bereits in Landau-Theorie — also unter Vernachlässigung der Fluktuationen — eine endliche Casimir-Kraft auch oberhalb der kritischen Temperatur. In höherer Ordnung der Störungstheorie setzt sich die Kraft dann aus einem Teil, welcher vom nichtfluktuierenden Hintergrund kommt, und einem fluktuationsinduzierten Teil zusammen.

Ein erster Versuch des Nachweises der Existenz von Casimir-Kräften in diesen binären Flüssigkeitsgemischen wurde 1999 unternommen [68]. Hier wurden eine Filmgeometrie mit $(+, -)$ -Randbedingungen untersucht und repulsive Kräfte gefunden. Diese Experimente wurden später von Fukuto *et al.* verbessert [69] und von Rafai *et al.* auf Systeme mit $(+, +)$ -Randbedingungen erweitert [70]. Im Einklang mit dem Theorem über das Vorzeichen der Casimir-Kraft von Bachas wurden in letzterem System attraktive Kräfte gefunden. Die bisher genannten Experimente beschränkten sich auf die Analyse von Filmgeometrien, was aufgrund der Vergleichbarkeit mit theoretischen Ergebnissen sinnvoll ist. Ein Durchbruch in der experimentellen Analyse von Casimir-Kräften ist jedoch für sphärische Teilchen gelungen. 2008 haben Hertlein *et al.* das erste Mal den thermodynamischen Casimir-Effekt direkt nachgewiesen [7, 8]. Ihnen ist es gelungen, die Brownsche Bewegung einer sich in einem kritischen 2,6-Lutidin-Wasser-Gemisch befindenden kolloidalen Polystyrolkugel vor einer Siliziumdioxid-Glaswand zeitaufgelöst zu messen. Dazu wurde mit einem Laser unter Totalreflektion auf die das Medium begrenzende Glasoberfläche gestrahlt. Dabei breitet sich in das Medium eine evaneszente Welle mit exponentiell abnehmender Intensität aus, welche am Teilchen gestreut wird. Das gestreute Licht wurde detektiert, um so über die gemessene Intensität auf die Intensität bei der Position des Teilchens und somit dessen Lage zu schließen. Eine Bewegung parallel zu der Wand wurde mit Hilfe einer optischen Pinzette verhindert. Aus dem Histogramm der Abstände des Teilchens vor der Wand wurde über den Boltzmann-Faktor das effektive Potential bestimmt. Dieses setzt sich aus verschiedenen Beiträgen zusammen: Zusätzlich zum Casimir-Effekt treten eine exponentiell abfallende elektrostatische Abstoßung zwischen Platte und Teil-

chen sowie ein linear anwachsender Anteil des Potentials, bestehend aus Gravitation, Auftrieb und Strahlungsdruck der optischen Pinzette, auf. Unter Berücksichtigung dieser Effekte konnte aus dem Potential auf die Kraft rückgeschlossen werden. Die so bestimmte Kraft wurde mit Ergebnissen aus Monte-Carlo-Simulationen von Filmgeometrien, welche aufgrund der abweichenden Geometrie mit der Derjaguin-Näherung modifiziert wurden, verglichen und dabei eine sehr gute Übereinstimmung gefunden.

Durch geeignete chemische Behandlung der Glasoberfläche und der Polystyrolkugeln konnte vorgegeben werden, welche der beiden Flüssigkeitsspezies sich bevorzugt an deren Oberfläche befindet, und konnten somit die Randbedingungen $(-, -)$, $(+, -)$ und $(+, +)$ realisiert werden. Die Experimente bleiben jedoch auf den Bereich unterhalb der kritischen Temperatur $T < T_c$ — also die gemischte (ungeordnete) Phase¹² — beschränkt. Trotz dieser Einschränkungen verspricht diese Methode, in Zukunft weitere wichtige Beiträge zum thermodynamischen Casimir-Effekt zu liefern (siehe zum Beispiel [71–73]).

Zusätzlich zu den bereits genannten Arbeiten gibt es eine ganze Reihe von theoretischen Untersuchungen — basierend auf verschiedensten Methoden — zum thermodynamischen Casimir-Effekt. Wesentliche Beiträge wurden mit der renormierungsgruppenverbesserten Störungstheorie [12, 13, 16–20, 62, 74] erzielt. Für Systeme mit externen Oberflächenfeldern wurde mit der Landau-Theorie der nicht von den Fluktuationen stammende Beitrag zur Casimir-Kraft berechnet [11, 25]. Zudem gibt es eine Reihe von Resultaten zu exakt lösbaren Modellen in zwei und drei Dimensionen [10, 28, 29, 75–82] sowie zahlreiche Monte-Carlo-Simulationen [21, 22, 82–90].

Einen Überblick über weitere theoretische und experimentelle Arbeiten geben die Bücher von Krech [10], Dantchev *et al.* [75] sowie die Übersichtsartikel von Krech [9], Balibar und Ishiguro [91] sowie Gambassi [92].

1.4 Oberflächenkritische Phänomene und Skalentheorie

Um die in dem vorherigen Kapitel beschriebenen Experimente und Effekte theoretisch zu beschreiben, sind geeignete Modelle erforderlich. Da es sich bei den meisten relevanten Größen um universelle Eigenschaften handelt, welche nicht von den mikroskopischen Details abhängen, sondern nur von den groben Eigenschaften des Systems, hat man bei der Wahl der das System beschreibenden Theorie eine gewisse Freiheit. Man muss also nur ein Modell aus derselben Universalitätsklasse verwenden und erhält daraus das gleiche

¹²Die Experimente wurden am unteren Entmischungsübergang der 2,6-Lutidin-Wasser-Mischung durchgeführt. Dieser befindet sich bei $T \simeq 307$ K und einem Massenanteil des 2,6-Lutidins von $c_{L,c} = 0.286$. Oberhalb dieser Temperatur entmischt das System, unterhalb sind die beiden Spezies gemischt.

kritische Verhalten.

Ein häufig bei der Beschreibung von kritischen Phänomenen im Bereich des Magnetismus verwendetes Modell ist das $O(n)$ -symmetrische Spinmodell auf einem einfach kubischen \mathbb{Z}^d -Gitter. Berücksichtigt man zusätzlich ein die $O(n)$ -Symmetrie brechendes Magnetfeld, so wird dieses System durch die Hamilton-Funktion

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} K_{i,j} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - \sum_i \mathbf{h}_i \cdot \mathbf{s}_j \quad (1.14)$$

beschrieben. Dabei bezeichnet $K_{i,j} = J_{i,j}/k_B T = K_{j,i}$ die reduzierte Kopplungskonstante und $\mathbf{h}_i = \mathbf{H}_i/k_B T$ das reduzierte Magnetfeld. Für die in dieser Arbeit betrachteten Systeme genügt es, nur Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn zu berücksichtigen. Die \mathbf{s}_i sind n -komponentige, klassische Spins mit $|\mathbf{s}_i| = 1$. Setzt man $n = 1$, erhält man das Ising-Modell. Für $n = 2$ ergibt sich das XY-Modell und für $n = 3$ das Heisenberg-Modell. Will man Systeme mit Oberflächen beschreiben, so ist es sinnvoll anzunehmen, dass auf der Oberfläche $\mathfrak{B} \equiv \partial\mathfrak{V}$ andere Kopplungen und Felder wirken als im Volumen. Aus Gleichung (1.14) wird dann

$$\mathcal{H}\{\mathbf{s}_i\} = -K \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ i \vee j \in \mathfrak{B}}} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - \mathbf{h}_b \cdot \sum_{i \in \mathfrak{V}} \mathbf{s}_i - K_1 \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ i \wedge j \in \mathfrak{B}}} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - \mathbf{h}_1 \cdot \sum_{i \in \mathfrak{B}} \mathbf{s}_i \quad (1.15)$$

mit den Oberflächengrößen K_1 und \mathbf{h}_1 sowie den *Bulk*-Größen K und \mathbf{h} . Mit $\langle i, j \rangle$ sei dabei die Summe über alle nächsten Nachbarn bezeichnet. Dieses Gittermodell hat sich für Systeme mit Oberflächen als sehr nützlich in der Beschreibung von kritischen Phänomenen in *Mean-Field*-Näherung erwiesen. So erhält man zum Beispiel in dieser Näherung bereits ein qualitativ korrektes Phasendiagramm des halbunendlichen, dreidimensionalen Ising-Modells (siehe zum Beispiel [93] und die dort angegebenen Referenzen). Dieses Phasendiagramm in *Mean-Field*-Näherung ist in Abbildung 1.5 dargestellt. Der Einfachheit halber werde angenommen, dass keine symmetriebrechenden Magnetfelder anwesend sind.¹³ Das Phasendiagramm teilt sich in drei Bereiche: In der Phase (SF/BF) sind sowohl das Volumen als auch die Oberfläche ferromagnetisch. Zudem gibt es eine Phase, bei welcher Volumen und Oberfläche paramagnetisch sind und eine, bei der die Oberfläche ferromagnetisch, das Volumen jedoch paramagnetisch ist. Diese Phasen werden durch Linien von Phasenübergängen zweiter Ordnung voneinander getrennt. Die

¹³Bei nichtverschwindenden Magnetfeldern tritt ein Reihe von weiteren Effekten auf, welche unter dem Schlagwort *Benetzungsübergänge* zusammengefasst werden. Das Phasendiagramm ist hier noch reichhaltiger. Man erhält es am einfachsten aus der Landau-Theorie, also durch Analyse der aus der bereits erwähnten Kontinuumstheorie folgenden klassischen Bewegungsgleichung (siehe zum Beispiel [93,94]).

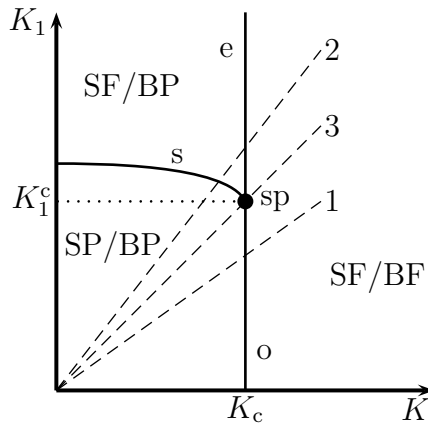


Abbildung 1.5: Phasendiagramm des halbunendlichen Ising-Modells: In der Hochtemperaturphase ist das gesamte System paramagnetisch (SP/BP), in der Tieftemperaturphase ferromagnetisch (SF/BF). Zudem tritt eine Phase auf, bei der die Oberfläche ferromagnetisch und das Volumen paramagnetisch ist (SF/BP). Die drei Phasen werden durch Linien von Phasenübergängen zweiter Ordnung (s, o und e) voneinander getrennt. Diese Linien treffen sich in einem multikritischen Punkt sp.

Linie o bezeichnet den gewöhnlichen Übergang, bei dem ein vollständig ungeordnetes in ein vollständig geordnetes System übergeht. Ist die Oberflächenkopplung stark genug, so ist jedoch auch der mit s bezeichnete Oberflächenübergang möglich. Bei diesem bleibt das Volumen paramagnetisch, während die Oberfläche ferromagnetisch wird. Zudem tritt bei der mit e gekennzeichneten Linie der außergewöhnliche Übergang auf. Hier wird bei bereits geordneter Oberfläche auch das Volumen ferromagnetisch. Die Linien der drei verschiedenen Phasenübergänge treffen sich in dem mit sp bezeichneten Punkt. Dies ist ein multikritischer Punkt, welcher dem speziellen Übergang bei kritischer Verstärkung der Oberflächenkopplung entspricht. Die drei strichliert eingezeichneten Linien beschreiben bei der Variation der Temperatur bei festem J_1/J durchlaufene Trajektorien. Für Systeme mit $J_1/J < K_1^c/K_c$ (Trajektorie 1) tritt nur der gewöhnliche Übergang auf. Ist $J_1/J = K_1^c/K_c$ (Trajektorie 3), so hat das System einen speziellen Übergang. Im Falle $J_1/J > K_1^c/K_c$ (Trajektorie 2) treten zwei Phasenübergänge bei verschiedenen kritischen Temperaturen auf. Kühlt man hier — von hohen Temperaturen kommend — das System langsam ab, so tritt zunächst der Oberflächenübergang auf. Bei weiterer Verringerung der Temperatur beobachtet man den außergewöhnlichen Übergang. Bei $K = K_c$ treten daher, abhängig von K_1 , drei verschiedene Typen von Phasenübergängen auf. Damit gibt es für jede *Bulk*-Universalitätsklasse drei Oberflächenuniversalitätsklassen. Dieses Phasendiagramm ist qualitativ korrekt, solange die Dimension des Systems groß genug ist, dass sich die $(d - 1)$ -dimensionale Oberfläche spontan ordnen kann. Für das Ising-Modell muss also $d > 2$ sein, für Systeme mit $n > 1$ muss $d > 3$ gelten.

Um über die *Mean-Field*-Näherung hinauszugehen, ist das Gittermodell nur bedingt geeignet. Hierfür nutzt man vielmehr ein Kontinuumsmodell, welches in derselben Universalitätsklasse ist und somit dieselben kritischen Eigenschaften hat. Diese Strategie wird auch

in dieser Arbeit verfolgt. In den Teilen 2 und 3 dieser Arbeit wird das Ginzburg-Landau-Wilson-Funktional (ϕ^4 -Theorie) genutzt, um den thermodynamischen Casimir-Effekt zu untersuchen. Ein solches Kontinuumsmodell lässt sich aus Gleichung (1.15) durch ein *Coarse-Graining*-Verfahren herleiten. Die Motivation dafür kann einfach verstanden werden: In der Umgebung eines kritischen Punktes wird das Verhalten durch langreichweitige Fluktuationen des Ordnungsparameters dominiert, was sich in der Divergenz der Korrelationslänge am kritischen Punkt zeigt. Freiheitsgrade auf kurzen Skalen wie der Gitterkonstanten a sind hier irrelevant. Das in diesem Kontinuumsmodell auftauchende, reelle, n -komponentige Ordnungsparameterfeld ϕ beschreibt das System dann auf Längenskalen, die groß gegen a sind, und sollte daher das gleiche kritische Verhalten wie das ursprüngliche Gittermodell aufweisen. Für das halbunendliche Ising-Modell kann dieses *Coarse-Graining* explizit durchgeführt werden [93, 95]. Das System aus Gleichung (1.15) wird dann durch ein Energiefunktional $\mathcal{H}[\phi]$ — das sogenannte Ginzburg-Landau-Wilson-Funktional — beschrieben. In diesem Funktional treten bei Abwesenheit von Magnetfeldern aus Symmetriegründen nur gerade Potenzen von ϕ und $\nabla\phi$ auf. Mit Hilfe einer Dimensionsanalyse kann zusätzlich die Existenz viele dieser Terme ausgeschlossen werden: Skaliert man das Feld und alle Kopplungskonstanten so, dass der Vorfaktor des $(\nabla\phi)^2$ -Terms dimensionslos ist, so sind im Sinne der Renormierungsgruppe alle Beiträge der Form $\int dV \partial^r \phi^s g_{r,s}^{(b)}$ und $\int dS \partial^r \phi^s g_{r,s}^{(s)}$ irrelevant, für die die naive Dimension der Kopplungskonstanten $g_{r,s}^{(b)}$ und $g_{r,s}^{(s)}$ kleiner als Null ist. Auf diese Weise erhält man den *Hamiltonian* einer ϕ^4 -Theorie, bei dem zusätzliche Oberflächenterme auftreten. Die genaue Form ist in Abschnitt 2.1 angegeben. Statt der Kopplungen J und J_1 und der Temperatur T treten hier phänomenologische Parameter $\hat{\tau}$, \hat{u} und \hat{c} auf, wobei die Ringe andeuten, dass es sich dabei um unrenormierte Größen handelt, welche von den im folgenden Kapitel eingeführten renormierten Größen τ , u und c unterschieden werden müssen. Auf den Zusammenhang zwischen diesen Größen und die Notwendigkeit der Unterscheidung der unrenormierten und renormierten Größen wird in Teil 2 dieser Arbeit eingegangen. \hat{u} ist eine Kopplungskonstante, der Parameter $\hat{\tau}$ ist linear in der Abweichung von der Landauschen kritischen Temperatur und \hat{c} hängt mit dem Verhältnis zwischen Oberflächenkopplung J_1 und *Bulk*-Kopplung J des Gittermodells zusammen. Für das Ising-Modell lautet dieser Zusammenhang [95]:

$$\hat{c} a = 1 - 2(d - 1) \left(\frac{J_1}{J} - 1 \right). \quad (1.16)$$

Somit gibt $-\hat{c}$ die Verstärkung der Oberflächenkopplung im Vergleich zum Volumen an. Gleichzeitig spielt \hat{c} in Landau-Theorie die Rolle einer Randbedingung: Das Ordnungsparameterfeld ϕ muss an der Oberfläche verschwinden.

parameterfeld ϕ erfüllt auf den Oberflächen in dieser Näherung Robin-Randbedingungen

$$\partial_n \phi = \mathring{c} \phi. \quad (1.17)$$

\mathring{c}^{-1} ist somit eine linear extrapolierte Eindringtiefe.

Auch aus dieser Kontinuumstheorie lässt sich das Phasendiagramm des halbunendlichen n -Vektor-Modells bestimmen. Statt von K und K_1 wird dieses nun von τ und c aufgespannt. Der spezielle Punkt liegt jetzt bei $c = c_{\text{sp}}$, wobei in Landau-Theorie $c_{\text{sp}} = 0$ gilt. Für $c > c_{\text{sp}}$ ergibt sich der gewöhnliche Übergang und für $c < c_{\text{sp}}$ der außergewöhnliche. Die in Teil 2 der Arbeit durchgeführten Rechnungen beschäftigen sich mit dem Verhalten der Casimir-Kraft beim gewöhnlichen und speziellen Übergang, also auf der Linie mit $c \geq c_{\text{sp}}$. Der außergewöhnliche Übergang kann mit den dort verwendeten Methoden nicht behandelt werden, da hier bereits eine spontane Symmetriebrechung auftritt. Gleiches gilt für den Oberflächenübergang.

Einen Überblick über weitere Details zu oberflächenkritischen Phänomenen liefert zum Beispiel [93, 96, 97].

Zur Beschreibung des thermodynamischen Casimir-Effekts ist die freie Energie des kritischen Systems von fundamentaler Bedeutung. Mit Hilfe der phänomenologischen Skalentheorie und des *Finite-Size-Scaling* lassen sich einige wichtige Aussagen zum Verhalten der freien Energie machen. Darauf soll im Folgenden eingegangen werden.

Nach der phänomenologischen Skalentheorie für *Bulk*-Systeme ist der singuläre Anteil der freien Energie eine verallgemeinert homogene Funktion der relevanten Felder τ und h_b [98]. Damit gilt für die reduzierte freie Energie pro Volumen

$$f_b^{\text{sing}}(\tau, h_b) \approx |\tau|^{2-\alpha} f_{b,\pm}(h_b |\tau|^{-\Delta}), \quad (1.18)$$

wobei (+) für $\tau > 0$ und das (−) für $\tau < 0$ stehen. Zudem ist Δ der *Bulk-Gap*-Exponent und α der Exponent, welcher die Divergenz der spezifischen Wärme am kritischen Punkt beschreibt. Aus dieser Annahme folgen die bekannten Skalenrelationen zwischen den kritischen Exponenten durch Ableiten.

Wie ändert sich nun diese Skalenform bei Systemen mit Oberflächen? Um dies zu beschreiben, ist es sinnvoll, die Exzess-Freie-Energie des halbunendlichen Modells zu betrachten. Diese ist definiert als die gesamte freie Energie des Halbraums minus dem *Bulk*-Anteil. Bei dem gewöhnlichen und außergewöhnlichen Übergang genügt es, ein weiteres Skalenfeld zu berücksichtigen. Da c in diesen Fällen irrelevant ist, gilt für die auf die Fläche normierte

Exzess-Freie-Energie des Halbraums

$$f_s^{\text{sing}}(\tau, h_b, h_1) \approx |\tau|^{2-\alpha_s} f_{s,\pm} (h_b |\tau|^{-\Delta}, h_1 |\tau|^{-\Delta_1}). \quad (1.19)$$

Die Funktionen $f_{s,\pm}$ und die Oberflächenexponenten $\alpha_s = \alpha + \nu$ und Δ_1 sind hier von der Art des Übergangs — also gewöhnlich oder außergewöhnlich — abhängig. Im Falle des speziellen Übergangs wird auch das Feld c relevant. Es beschreibt den *Crossover* von dem repulsiven Fixpunkt $c = c_{\text{sp}}$ zu den attraktiven Fixpunkten $c = \pm\infty$. Man erhält

$$f_{s,\text{sp}}^{\text{sing}}(\tau, h_b, c, h_1) \approx |\tau|^{2-\alpha_s} f_{s,\pm}^{\text{sp}} \left(h_b |\tau|^{-\Delta}, c |\tau|^{-\Phi}, h_1 |\tau|^{-\Delta_1^{\text{sp}}} \right) \quad (1.20)$$

mit dem Oberflächen-*Crossover*-Exponenten Φ . Aus diesen Gleichungen lässt sich wieder eine Reihe von Skalenrelationen zwischen den Oberflächenexponenten herleiten [93].

Um das kritische Verhalten von endlichen Systemen zu beschreiben, ist die Aufteilung der freien Energie des endlichen Systems in *Bulk*-, Oberflächen-, Kanten-, Ecken- und Krümmungsanteile nicht ausreichend. Es muss ein zusätzlicher Beitrag eingeführt werden, der berücksichtigt, dass das System endlich ist. Dieser wird daher als *Finite-Size*-Anteil f_{res} der freien Energie bezeichnet. In der Filmgeometrie ergibt sich für die reduzierte freie Energie pro Fläche die Aufspaltung:

$$\begin{aligned} f_L^{\text{sing}}(\tau, h_b, c_1, c_2, h_1, h_2) \\ = L f_b^{\text{sing}}(\tau, h_b) + f_s^{\text{sing}}(c_1, h_1) + f_s^{\text{sing}}(c_2, h_2) + f_{\text{res}}^{\text{sing}}(L, \tau, h_b, c_1, c_2, h_1, h_2). \end{aligned} \quad (1.21)$$

Mit der Theorie des *Finite-Size-Scaling* [59] kann man Aussagen über den für diese Arbeit bedeutenden *Finite-Size*-Anteil machen (siehe zum Beispiel [10] und die dort angegebenen Referenzen). So wie *Bulk*- und Oberflächenanteile lässt sich auch $f_{\text{res}}^{\text{sing}}$ in einer Skalenform schreiben. Dazu bemerkt man zunächst, dass durch die Skalenfelder Längenskalen generiert werden. Im Falle des speziellen Übergangs hat man sechs relevante Skalenfelder τ , h_b , c_1 , c_2 , h_1 und h_2 . Mit ihnen sind die Längenskalen

$$\xi_\tau \sim |\tau|^{-\nu}, \xi_{h_b} \sim |h_b|^{-\nu/\Delta}, \xi_{c_i} \sim |c_i|^{-\nu/\Phi}, \xi_{h_i} \sim |h_i|^{-\nu/\Delta_1^{\text{sp}}}, \quad i = 1, 2 \quad (1.22)$$

verknüpft. Die Filmdicke L bildet eine weitere Längenskala. $f_{\text{res}}^{\text{sing}}$ hat die Dimension $[\text{Länge}]^{-(d-1)}$. Zieht man einen Faktor $L^{-(d-1)}$ heraus, so ist der Rest dimensionslos und damit auch nur eine Funktion der dimensionslosen Argumente L/ξ_φ , $\varphi = \tau, h_b, c_1, c_2, h_1, h_2$. Somit ergibt sich für kurzreichweitige Wechselwirkungen folgende *Finite-Size*-Skalenform

für den *Finite-Size*-Anteil der freien Energie:

$$\begin{aligned}
 & f_{\text{res}}^{\text{sing}}(L, \tau, h_{\text{b}}, c_1, c_2, h_1, h_2) \\
 & \approx L^{-(d-1)} f_{\text{res}, \pm} \left(|\tau| L^{1/\nu}, h_{\text{b}} L^{\Delta/\nu}, c_1 L^{\Phi/\nu}, c_2 L^{\Phi/\nu}, h_1 L^{\Delta_1^{\text{sp}}/\nu}, h_2 L^{\Delta_1^{\text{sp}}/\nu} \right). \quad (1.23)
 \end{aligned}$$

In Abschnitt 2.2.2 wird diese Skalenform aus einer Renormierungsgruppenanalyse hergeleitet.

2 Thermodynamischer Casimir-Effekt mit Robin-Randbedingungen

Ziel dieses Teils der Arbeit ist die Analyse des Einflusses des in Kapitel 1.4 diskutierten oberflächenkritischen Verhaltens auf die Casimir-Kraft. Langreichweitige Casimir-Kräfte treten immer dann auf, wenn die Korrelationslänge des Systems divergiert. In Kapitel 1.4 wurde gezeigt, dass im halbumendlichen Ising-Modell bei der kritischen Volumenkopplung K_c drei verschiedene Phasenübergänge auftreten: Abhängig von der Oberflächenkopplung K_1 tritt der gewöhnliche, der außergewöhnliche oder der spezielle Phasenübergang auf. Dieses Verhalten überträgt sich auf die für den Casimir-Effekt interessante Filmgeometrie mit endlicher Filmdicke L . Lässt man auf den beiden Oberflächen verschiedene Kopplungen K_1 und K_2 zu, so ergeben sich auf der kritischen Fläche $K = K_c$ neun verschiedene Übergänge im Phasendiagramm des Films, von denen aus Symmetriegründen jedoch nur sechs unabhängig voneinander sind. Wie bereits in Kapitel 1.4 erwähnt, soll diese Analyse nicht anhand der diskreten Gitterhamiltonfunktion, sondern eines daraus durch *Coarse-Graining* gewonnenen kontinuierlichen Hamilton-Funktional $\mathcal{H}[\phi]$ durchgeführt werden. Das untersuchte Modell wird in Kapitel 2.1 vorgestellt. Es ist die übliche Erweiterung der gewöhnlichen feldtheoretischen, $O(n)$ -symmetrischen ϕ^4 -Theorie auf Systeme mit Oberflächen in der $\mathbb{R}^{d-1} \times [0, L]$ -Filmgeometrie. Zur Berechnung der Casimir-Kraft wird die freie Energie dieses Systems im Rahmen der renormierungsgruppenverbesserten Störungstheorie in Zweischleifennäherung berechnet. Diese Rechnungen stellen eine direkte Erweiterung von bereits zahlreich zu diesem Thema vorhandenen feldtheoretischen Arbeiten dar. Startpunkt für diese Arbeiten war die Veröffentlichung von Symanzik im Jahr 1981 [13]. Hier wurde der Wert der Casimir-Kraft am *Bulk*-kritischen Punkt $T_{c,\infty}$ für einen einkomponentigen Ordnungsparameter mit Dirichlet-Randbedingungen auf beiden Oberflächen berechnet. Diese Randbedingungen entsprechen der Oberflächenuniversalitätsklasse *gewöhnlich* und werden daher mit (o,o) bezeichnet. Krech und Dietrich erweiterten diese Arbeit 10 Jahre später auf $O(n)$ -symmetrische ϕ^4 -Modelle und Temperaturen oberhalb von $T_{c,\infty}$ [12, 17]. Zudem betrachteten sie — zusätzlich zu Dirichlet-Randbedingungen — die Randbedingungen (sp,sp), (sp,o), periodisch und antiperiodisch. Sie berechneten im Rahmen der ϵ -Entwicklung den *Finite-Size*-Anteil der freien Energie in $d = 4 - \epsilon$ Dimen-

sionen bis zur ersten Ordnung in ϵ . Für die Beschränkung auf den Temperaturbereich gab es verschiedene Gründe: Zum einen ist bekannt, dass die ϵ -Entwicklung den dimensionellen *Crossover* von d -dimensionalem Verhalten für hohe Temperaturen zu $(d - 1)$ -dimensionalem kritischem Verhalten für tiefe Temperaturen bei der kritischen Temperatur $T_{c,L}$ des Films nicht beschreiben kann (siehe zum Beispiel [18]). Zum anderen tritt bei tiefen Temperaturen — vorausgesetzt die Dimensionalität des Systems ist hoch genug — eine spontane Symmetriebrechung der $O(n)$ -Symmetrie auf, was dazu führt, dass bereits in Landau-Theorie Beiträge zur Casimir-Kraft auftreten. Hier müssten also Fluktuationen des Ordnungsparameterfeldes auf einem nichtfluktuierenden Hintergrundterm betrachtet werden, was die durchgeführten Rechnungen extrem verkomplizieren würde. Letzteres ist auch der Grund für die Beschränkung auf die gewöhnliche und spezielle Oberflächenuniversalitätsklasse, da beim außergewöhnlichen Oberflächenübergang die Symmetrie auch spontan gebrochen ist.

Krech und Dietrich beschränkten sich auf die Untersuchung der Fixpunkte¹ $c_j = \infty$ und $c_j = c_{\text{sp}}$ und fanden repulsive Kräfte für gemischte (o,sp) und attraktive Kräfte für symmetrische ((o,o) beziehungsweise (sp,sp)) Randbedingungen. In einer Arbeit von Schmidt und Diehl wurde mit denselben Methoden der *Crossover*-Bereich $c_{\text{sp}} \leq c \leq \infty$ am *Bulk*-kritischen Punkt untersucht [16]. Dabei wurden — wie erwartet — *Crossover* zwischen attraktivem und repulsivem Verhalten gefunden. Diese Rechnungen und Ergebnisse werden in diesem Teil der Arbeit nachvollzogen.

Die in [16] gefundenen Resultate weisen auf fundamentale Schwierigkeiten im Fall $c_1 = c_2 = c_{\text{sp}}$ hin. Wie in einer Arbeit von Diehl, Grüneberg und Shpot gezeigt, hat die Skalenfunktion der Casimir-Kraft nur dann eine ϵ -Entwicklung mit ganzzahligen Potenzen von ϵ , wenn im Spektrum des Laplace-Operators keine Nullmode auftritt [18]. Rechnet man jedoch in dimensioneller Regularisierung, so gilt $c_{\text{sp}} = 0$ und der spezielle Oberflächenübergang tritt bei Neumann-Randbedingungen auf. Im Falle von speziellen Randbedingungen auf beiden Oberflächen existiert somit — wie auch bei periodischen Randbedingungen — eine Nullmode im Spektrum. Nach [18] treten dann in der ϵ -Entwicklung auch halbzahlige Potenzen $\epsilon^{k/2}$ mit $k \geq 3$ sowie Potenzen von $\log \epsilon$ auf. Schon zuvor wurde von Krech und Dietrich darauf hingewiesen, dass die in [12] berechneten Skalenfunktionen für die untersuchten Randbedingungen mit einer Nullmode nicht die erforderlichen Analytizitätseigenschaften in der Temperatur haben: Die freie Energie des Systems in Filmgeometrie muss bei $T_{c,\infty}$ analytisch sein, da die wahre kritische Temperatur des endlichen ($L < \infty$) Systems bei $T_{c,L} < T_{c,\infty}$ liegt. Zieht man zur Berechnung des *Finite-Size*-Anteils *Bulk*- und

¹Fixpunkt ist hier im Sinne der Renormierungsgruppe zu verstehen. Im Abschnitt 2.2.2 wird auf die Renormierungsgruppenanalyse des Modells eingegangen.

Oberflächenanteile ab, so darf dieser nur die von den Abzügen kommenden Nichtanalyticitäten aufweisen. Im Falle von periodischen und Neumann-Neumann-Randbedingungen ist dies aber nicht der Fall. In den Arbeiten [18, 19] wurde eine Methode zur Auflösung dieser Widersprüche zunächst für den *Bulk*-kritischen Punkt und später für das Temperaturintervall $T \geq T_{c,\infty}$ vorgeschlagen: Der Einfluss der Nullmode führt dazu, dass die gewöhnliche Schleifenentwicklung bei $T_{c,\infty}$ nicht wohldefiniert ist. Dies wird in Dreischleifenordnung evident, da hier eine unphysikalische IR-Divergenz auftritt. Dieser Zusammenbruch kann jedoch vermieden werden, wenn die Nullmode von den übrigen Moden abgespalten wird und durch Aufsummation aller endlichen Moden eine effektive Theorie für die Nullmode konstruiert wird. Auf diese Weise erhält man die nicht-ganzzahligen Potenzen von ϵ in der Entwicklung.²

Diese Umordnung der Störungstheorie ist in den Rechnungen von [16] jedoch noch nicht enthalten. Somit sind die dort erzielten Ergebnisse nicht in der Lage, den im Limes $c_1 = c_2 \rightarrow 0$ auftretenden $\epsilon^{3/2}$ -Term zu reproduzieren. Zudem weisen diese Ergebnisse unphysikalische IR-Divergenzen auf: Entwickelt man die Casimir-Kraft für kleine c_j , so findet man logarithmische Terme. Dieses Verhalten wird durch das Auftreten der Nullmode im Grenzwert $c_1 = c_2 \rightarrow 0$ verursacht und kann durch die in [18, 19] vorgeschlagene Umordnung der Störungstheorie verhindert werden. Diese Prozedur wurde in einer Arbeit von Diehl und Schmidt [20] durchgeführt. Hier wurde eine effektive Theorie für die niedrigste Mode im Spektrum konstruiert, indem alle höheren Moden aufsummiert wurden. Auf diese Weise kann auch der $\epsilon^{3/2}$ -Term im Fall von Neumann-Neumann-Randbedingungen reproduziert und analytische Ergebnisse für kleine c_j erhalten werden. Auch diese Rechnungen und Resultate werden in diesem Teil der Arbeit vorgestellt.

2.1 Das Modell

In diesem Teil der Arbeit soll das kontinuierliche $O(n)$ -symmetrische ϕ^4 -Modell mit verschwindenden Magnetfeldern in der Filmgeometrie untersucht werden. Der Ordnungsparameter $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) = (\phi_1(\mathbf{x}), \phi_2(\mathbf{x}), \dots, \phi_n(\mathbf{x}))$ bestehe dabei aus n reellwertigen Komponenten mit $\phi_\alpha(\mathbf{x}) \in (-\infty, \infty)$.

Zunächst sei das System als in alle Richtungen endlich angenommen. Das Feld $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})$ sei

²In [99] wurden diese Potenzen auch schon für dreidimensionale Quantenmodelle gefunden. Die klassische ϕ^4 -Theorie in der $\mathbb{R}^{d-1} \times [0, L]$ -Filmgeometrie ist äquivalent zu einem $(d-1)$ -dimensionalen Quantenmodell mit der inversen Temperatur $\beta = L$. Somit bricht die Störungstheorie des Quantenmodells in $d=3$ zusammen.

also auf dem Quader

$$\mathfrak{V} = \{\mathbf{x} = (\mathbf{y}, z) \in \mathbb{R}^d : \mathbf{y} \in [-L_{\parallel}/2, L_{\parallel}/2]^{d-1} \wedge z \in [0, L]\} \quad (2.1)$$

definiert. Zudem sei angenommen, dass $\phi(\mathbf{x})$ in den \mathbf{y} -Richtungen periodische und in der verbleibenden z -Richtung Robin-Randbedingungen mit dem Koeffizienten \mathring{c}_1 auf \mathfrak{B}_1 und \mathring{c}_2 auf \mathfrak{B}_2 erfüllt. \mathfrak{B}_j sind dabei die senkrecht zur z -Richtung orientierten Oberflächen des Quaders

$$\mathfrak{B}_j = \{(\mathbf{y}, z) \in \mathbb{R}^d : \mathbf{y} \in [-L_{\parallel}/2, L_{\parallel}/2]^{d-1} \wedge z = z_j\}, \quad j = 1, 2 \quad (2.2)$$

mit $z_1 = 0$ und $z_2 = L$. Die gewünschte Filmgeometrie wird später aus dieser Geometrie gewonnen, indem der thermodynamische Limes, also der Grenzwert $L_{\parallel} \rightarrow \infty$ bei konstantem L , vollzogen wird.

Das ϕ^4 -Modell wird durch eine Lagrangedichte \mathcal{L} beschrieben, welche sich aus einem *Bulk*-Anteil \mathcal{L}_b und einem Oberflächenanteil \mathcal{L}_s zusammensetzt, das heißt

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}) = \mathcal{L}_b(\mathbf{x}) + \mathcal{L}_s(\mathbf{y}). \quad (2.3)$$

Aus dieser Lagrangedichte wird das Hamilton-Funktional durch Integration über das Volumen \mathfrak{V} beziehungsweise dessen Begrenzung $\mathfrak{B} = \mathfrak{B}_1 \cup \mathfrak{B}_2$ gewonnen:

$$\mathcal{H}[\phi] = \int_{\mathfrak{V}} d^d x \mathcal{L}_b(\mathbf{x}) + \int_{\mathfrak{B}} d^{d-1} y \mathcal{L}_s(\mathbf{y}). \quad (2.4a)$$

Der *Bulk*-Term der Lagrangedichte lautet³

$$\mathcal{L}_b(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} [\nabla \phi(\mathbf{x})]^2 + \frac{\mathring{\tau}}{2} \phi^2(\mathbf{x}) + \frac{\mathring{u}}{4!} |\phi(\mathbf{x})|^4 \quad (2.4b)$$

und der Oberflächenterm

$$\mathcal{L}_s(\mathbf{y}) = \frac{\mathring{c}_1}{2} \phi^2(\mathbf{y}, 0) + \frac{\mathring{c}_2}{2} \phi^2(\mathbf{y}, L). \quad (2.4c)$$

Der *Hamiltonian* lässt sich explizit in zwei Teile

$$\mathcal{H}[\phi] = \mathcal{H}_0[\phi] + \mathcal{H}_{\text{int}}[\phi] \quad (2.5a)$$

³Im Folgenden soll die Notation $[\nabla \phi(\mathbf{x})]^2 \equiv \sum_{\alpha=1}^n [\nabla \phi_{\alpha}(\mathbf{x})]^2$ verwendet werden.

mit dem freien Anteil

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0[\phi] &= \\ &= \int_{\mathfrak{X}} d^d x \left\{ \frac{1}{2} [\nabla \phi(\mathbf{x})]^2 + \frac{\hat{\tau}}{2} \phi^2(\mathbf{x}) \right\} + \int_{\mathfrak{Y}} d^{d-1} y \left[\frac{\hat{c}_1}{2} \phi^2(\mathbf{y}, 0) + \frac{\hat{c}_2}{2} \phi^2(\mathbf{y}, L) \right] \end{aligned} \quad (2.5b)$$

und dem Wechselwirkungsanteil

$$\mathcal{H}_{\text{int}}[\phi] = \int_{\mathfrak{X}} d^d x \frac{\hat{u}}{4!} |\phi(\mathbf{x})|^4 \quad (2.5c)$$

aufspalten. Die Motivation für diese Aufspaltung ist die folgende: Der freie Anteil \mathcal{H}_0 enthält nur quadratische Terme in ϕ_α . Damit entspricht er einer Gaußschen Theorie und kann exakt behandelt werden. Die zugehörigen thermodynamischen Größen wie zum Beispiel die freie Energie können analytisch in geschlossener Form berechnet werden. Im Gegensatz dazu ist der Wechselwirkungsanteil \mathcal{H}_{int} nicht exakt handhabbar. Bei der Analyse dieses Terms muss auf Näherungsverfahren zurückgegriffen werden. Der Vorfaktor \hat{u} ist also ein Maß für die Stärke der Störung des Systems. Er ist, ebenso wie die Variablen $\hat{\tau}$ und \hat{c}_j , ein phänomenologischer Parameter. $\hat{\tau}$ ist ein Maß für die Abweichung von der Landauschen kritischen Temperatur des Systems. Die Oberflächenkopplungen \hat{c}_j geben an, wie stark die Kopplungen innerhalb der Oberfläche im zugrunde liegenden Gittermodell gegenüber den *Bulk*-Kopplungen abgeschwächt sind. Der Zusammenhang zu den in der Gitterhamiltonfunktion (1.15) auftauchenden Kopplungen J und J_1 ist in Gleichung (1.16) angegeben.

Die Ringe über diesen phänomenologischen Parametern deuten dabei an, dass es sich hierbei um unrenormierte Größen handelt. Da die hier eingeführte Kontinuumstheorie eine Beschreibung von kondensierter Materie mit der Gitterkonstante a darstellt, muss es einen *Cutoff* $\Lambda \propto 1/a$ geben, bei welchem die Impulse abgeschnitten werden. Impulse mit größerem Betrag sind nicht erlaubt und es ergeben sich nur unter dieser Beschränkung physikalisch sinnvolle, endliche Größen. Es hat sich jedoch als sinnvoll herausgestellt, diesen *Cutoff* gegen unendlich gehen zu lassen. Dazu müssen aber die nackten Parameter $\hat{\tau}$, \hat{u} und \hat{c}_j passend reparametrisiert werden. Die bei dem Limes $\Lambda \rightarrow \infty$ entstehenden Divergenzen können dann in den unrenormierten Parametern absorbiert werden. Man erhält auf diese Weise eine renormierte Theorie mit wohldefinierten physikalischen Eigenschaften.

Aufgrund der Translationsinvarianz des Systems in \mathbf{y} -Richtung ist es sinnvoll, zur Behandlung des Problems in den Impulsraum zu transformieren. Diese Transformation wird im Folgenden nicht nur in den parallelen Richtungen, sondern auch in der senkrechten z -Richtung vollzogen. Der Grund dafür ist, dass der Casimir-Effekt eng mit dem diskre-

ten Impuls-Spektrum in dieser Richtung verknüpft ist und sich die Rechnungen auf diese Art vereinfachen. Es sei jedoch darauf hingewiesen, dass es auch möglich ist, auf diesen Schritt zu verzichten und in der (\mathbf{p}, z) -Darstellung zu rechnen [13].

Zunächst soll jedoch der Zusammenhang zwischen den in Gleichung (2.4c) eingeführten Oberflächentermen und den Randbedingungen erläutert werden. Dazu wird der Gradiententerm des *Hamiltonians* mit Hilfe einer d -dimensionalen partiellen Integration und dem Gaußschen Satz umgeformt. Es ergibt sich

$$\int_{\mathfrak{V}} d^d x (\nabla \phi_\alpha)^2 = - \int_{\mathfrak{V}} d^d x \phi_\alpha \nabla^2 \phi_\alpha - \int_{\mathfrak{B}} d^{d-1} y \phi_\alpha \partial_n \phi_\alpha, \quad (2.6)$$

wobei die Orientierungen der Normalenvektoren \mathbf{n} so gewählt wurden, dass sie in das Volumen gerichtet sind. Setzt man diesen Ausdruck in den freien Anteil des *Hamiltonians* (2.5b) ein, so erkennt man, dass die Oberflächenterme sich genau dann wegheben, wenn das Feld ϕ Robin-Randbedingungen

$$\partial_n \phi_\alpha = \mathring{c}_j \phi_\alpha \quad (2.7)$$

erfüllt. Der ungestörte *Hamiltonian* lautet dann

$$\mathcal{H}_0[\phi] = \int_{\mathfrak{V}} d^d x \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \phi_\alpha(\mathbf{x}) (-\nabla^2 + \mathring{\tau}) \phi_\alpha(\mathbf{x}). \quad (2.8)$$

Die Randbedingungen (2.7) sind nun in dem Ordnungsparameterfeld ϕ impliziert. Dies bedeutet, dass bei der Berechnung der Zustandssumme nicht über alle Ordnungsparameterkonfigurationen integriert wird, sondern nur über solche, die den Randbedingungen (2.7) genügen.⁴

Wie bereits angedeutet, soll das Hamilton-Funktional (2.5) nun in den Impulsraum transformiert werden. Dazu ist ein vollständiges Orthonormalsystem erforderlich. Sinnvollerweise wählt man dafür das Eigensystem des Integralkerns des ungestörten *Hamiltonians* (2.8). Es muss also das Eigenwertproblem

$$-\nabla^2 f_{\mathbf{p},m}(\mathbf{y}, z) = \kappa_{\mathbf{p},m}^2 f_{\mathbf{p},m}(\mathbf{y}, z) \quad (2.9)$$

gelöst werden. Die Randbedingungen des Feldes $\phi(\mathbf{y}, z)$ übertragen sich direkt auf die Eigenfunktionen $f_{\mathbf{p},m}(\mathbf{y}, z)$. Gleichung (2.9) wird mit einem Produktansatz $f_{\mathbf{p},m}(\mathbf{y}, z) =$

⁴Geht man über die Landau-Theorie hinaus, so fluktuieren die Randbedingungen. Sie gelten dann nur noch im Operatorsinne, das heißt innerhalb von Erwartungswerten. Siehe dazu zum Beispiel [15, Kapitel 2.4] oder [93].

$f_{\mathbf{p}}(\mathbf{y})v_m(z/L|\mathring{c}_1L, \mathring{c}_2L)/\sqrt{L}$ gelöst. Die Eigenfunktionen der von \mathbf{y} abhängigen Gleichung sind ebene Wellen. Zusammen mit den geforderten periodischen Randbedingungen in diesen Richtungen ergibt sich

$$f_{\mathbf{p}}(\mathbf{y}) = A^{-1/2}e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}} \quad \text{mit} \quad p_i = \frac{2\pi j_i}{L_{\parallel}}, \quad j_i \in \mathbb{Z}, \quad i = 1, \dots, d-1 \quad (2.10)$$

sowie der Fläche $A = L_{\parallel}^{d-1}$.

Die Struktur des z -abhängigen Anteils $\langle z|m \rangle \equiv v_m(z/L|\mathring{c}_1L, \mathring{c}_2L)/\sqrt{L}$ der Lösung von Gleichung (2.9) ergibt sich aus Dimensionsgründen. Die Funktionen v_m können als phasenverschobene Kosinus dargestellt werden. Dabei ist es sinnvoll, die dimensionslosen Variablen

$$\zeta = z/L, \quad \kappa_m = k_mL \quad \text{und} \quad \mathcal{C}_j = \mathring{c}_jL, \quad j = 1, 2 \quad (2.11)$$

zu definieren. Die Parameter im Ansatz

$$v_m(\zeta|\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2) = \sqrt{\lambda_m} \cos(\kappa_m\zeta - \vartheta_m) \quad (2.12)$$

müssen so bestimmt werden, dass die Eigenfunktionen normiert sind und Robin-Randbedingungen bei $\zeta = 0$ und $\zeta = 1$ erfüllen, also

$$v'_m(0|\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2) = \mathcal{C}_1 v_m(0|\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2) \quad (2.13a)$$

und

$$v'_m(1|\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2) = -\mathcal{C}_2 v_m(1|\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2). \quad (2.13b)$$

Aus der Randbedingung bei $\zeta = 0$ ergibt sich

$$\tan \vartheta_m = \frac{\mathcal{C}_1}{\kappa_m} = \frac{\mathring{c}_1}{k_m}. \quad (2.14)$$

Die Phasenverschiebung ϑ_m kann immer so gewählt werden, dass $0 \leq \vartheta_m \leq \pi/2$ gilt. Damit ergibt sich

$$\sin \vartheta_m = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\kappa_m}{\mathcal{C}_1}\right)^2}} \quad \text{und} \quad \cos \vartheta_m = \frac{\kappa_m}{\mathcal{C}_1} \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\kappa_m}{\mathcal{C}_1}\right)^2}}. \quad (2.15)$$

Die Forderung der Gültigkeit der zweiten Randbedingung erlaubt nur diskrete Werte der

Wellenzahl κ_m . Sie müssen positive Nullstellen der transzendenten Gleichung

$$R_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa_m) \stackrel{!}{=} 0 \quad (2.16)$$

mit

$$R_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa) = (\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2)\kappa \cos \kappa + (\mathcal{C}_1\mathcal{C}_2 - \kappa^2) \sin \kappa \quad (2.17)$$

sein. Die Normierungskonstante kann dann durch Integration gewonnen werden. Man erhält

$$\lambda_m = 2 \left(1 + \frac{\mathcal{C}_1}{\mathcal{C}_1^2 + \kappa_m^2} + \frac{\mathcal{C}_2}{\mathcal{C}_2^2 + \kappa_m^2} \right)^{-1}. \quad (2.18)$$

Für die Eigenwerte $\kappa_{\mathbf{p}, m}^2$ der Gleichung (2.9) gilt dann

$$\kappa_{\mathbf{p}, m}^2 = \mathbf{p}^2 + k_m^2. \quad (2.19)$$

Das z -abhängige Eigenwertproblem ist ein reguläres Sturm-Liouville-Problem. Die Eigenschaften der Lösung eines solchen Problems sind wohlbekannt (siehe zum Beispiel [100], [101, Kapitel IX], [102, Kapitel IV.3] und [103, Kapitel 8 und 9]). Es gilt daher:

- (i) Die Eigenwerte κ_m^2 sind reell, abzählbar und nicht entartet. Sie haben nur bei unendlich einen Häufungspunkt.
- (ii) Sie lassen sich ordnen, sodass $\kappa_m^2 < \kappa_{m'}^2$ für $m < m'$. Zudem gibt es einen kleinsten Eigenwert κ_1 , aber keinen größten, das heißt $\lim_{m \rightarrow \infty} \kappa_m^2 = \infty$.
- (iii) Die Eigenfunktionen v_m zu zwei verschiedenen Eigenwerten $\kappa_m^2 \neq \kappa_{m'}^2$ sind zueinander orthogonal.
- (iv) Die normierten Eigenfunktionen v_m bilden ein vollständiges Orthonormalsystem und somit eine Basis im Hilbert-Raum $L_2(0, 1)$.
- (v) Die Eigenwerte κ_m^2 sind für $\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2 > 0$ positiv. Dies folgt aus Satz 7 der Referenz [102, Seite 430]. Danach folgt aus der Eigenschaft $v(dv/d\zeta)|_0^1 < 0$, dass der kleinste Eigenwert κ_1^2 und somit alle Eigenwerte κ_m^2 größer als Null sind. Die Gültigkeit dieser Eigenschaft ergibt sich direkt durch Einsetzen der Robin-Randbedingungen aus Gleichung (2.13a). Es gilt nämlich $v(dv/d\zeta)|_0^1 = -\mathcal{C}_1 v^2|_{\zeta=0} - \mathcal{C}_2 v_m^2|_{\zeta=1} < 0$.

Die Eigenschaften (i)-(v) können explizit anhand der Lösungen des Eigenwertproblems nachgewiesen werden. So kann zum Beispiel der Nachweis, dass die Eigenwerte nicht entartet sind, dadurch erbracht werden, dass die Eigenschaft $R'_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa_m) \neq 0$ gezeigt wird.

In der Tat ergibt sich unter Ausnutzung der Gleichungen (2.15) und deren Analoga für die zweite Oberfläche die Beziehung

$$R'_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa_m) = (-1)^m \frac{\kappa_m^4 + \kappa_m^2 (\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2 + \mathcal{C}_1^2 + \mathcal{C}_2^2) + \mathcal{C}_1 \mathcal{C}_2 (\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2 + \mathcal{C}_1 \mathcal{C}_2)}{\sqrt{(\kappa_m^2 + \mathcal{C}_1^2)(\kappa_m^2 + \mathcal{C}_2^2)}} \neq 0. \quad (2.20)$$

Die Vollständigkeit kann durch Berechnung der Summe

$$\sum_{m=1}^{\infty} \langle z|m \rangle \langle m|z' \rangle = \delta(z - z') \quad (2.21)$$

gezeigt werden [15, Anhang A.2]. Die Orthogonalität zeigt man direkt durch Integration der Eigenfunktionen.

Die Bestimmungsgleichung für die Eigenwerte κ_m^2 kann nur für die Spezialfälle $(\mathring{c}_1, \mathring{c}_2) = (0, 0), (\infty, \infty), (0, \infty)$ und $(\infty, 0)$ analytisch gelöst werden. Es ergeben sich die bekannten Fälle Neumann-Neumann (N,N), Dirichlet-Dirichlet (D,D), Neumann-Dirichlet (N,D) und Dirichlet-Neumann (D,N). Die Eigensysteme stimmen hier mit den aus der Literatur bekannten [12, Anhang A] überein. Einen Sonderfall stellt der Fall (N,N) (also $\mathring{c}_1 = \mathring{c}_2 = 0$) dar. Obwohl in einigen der obigen Formeln angenommen wurde, dass beide Oberflächenkopplungen positiv sind, behalten die Ergebnisse ihre Gültigkeit, solange nur ein $\mathring{c}_j = 0$ ist. In dem Spezialfall, bei dem beide Kopplungen verschwinden, gelten die Ergebnisse nur noch für $m > 1$. Hier können die \mathring{c}_j einfach auf Null gesetzt werden. Der Fall $m = 1$ ist im Limes $\mathring{c}_1 = \mathring{c}_2 \rightarrow 0$ besonders, da hier $\kappa_1 \rightarrow 0$ gilt.⁵ Offensichtlich ergibt sich hier die korrekte Eigenfunktion $v_1(\zeta|0, 0) = 1$ unabhängig von der Reihenfolge der Limiten $\mathring{c}_1 \rightarrow 0, \mathring{c}_2 \rightarrow 0$. Zudem ist es möglich, zu untersuchen, wie die Eigenwerte $\kappa_m^2(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2)$ gegen ihren Grenzwert $\kappa_m^2(0, 0) = \pi^2(m - 1)^2$ streben. Eine Entwicklung für kleine \mathcal{C}_j ergibt

$$\kappa_1^2(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2) = (\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2) - \frac{1}{3} (\mathcal{C}_1^2 - \mathcal{C}_1 \mathcal{C}_2 + \mathcal{C}_2^2) + O(\mathcal{C}_j^3) \quad (2.22a)$$

$$\kappa_m^2(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2) = \pi^2(m - 1)^2 + 2(\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2) - \frac{(\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2)^2}{\pi^2(m - 1)^2} + O(\mathcal{C}_j^3), \quad m > 1. \quad (2.22b)$$

Der kleinste Eigenwert im Spektrum der zweiten Ableitung mit Robin-Randbedingungen unterscheidet sich also fundamental von der höheren Eigenwerten, da hier die nullte Ordnung der Entwicklung für kleine \mathcal{C}_j verschwindet. Diese Eigenschaft wird bei der Um-

⁵Nach Gleichung (2.16) ist der Eigenwert $\kappa_1^2 = 0$ dreifach entartet. Dies ist jedoch nur ein Artefakt der Herleitung dieser Gleichung, da hier durch Null geteilt wurde. Daher war auch die Annahme, dass $\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2 > 0$ gilt, vonnöten.

ordnung der Störungstheorie noch eine wesentliche Rolle spielen, da gerade der kleinste Eigenwert die Quelle der Nichtanalytizitäten im Limes $\dot{c}_1 = \dot{c}_2 \rightarrow 0$ ist.

Nach diesem Exkurs über das Eigenwertproblem (2.9) und der Berechnung der Eigenfunktionen und Eigenwerte wartet jetzt die eigentliche Aufgabe. Der *Hamiltonian* (2.5) soll in den Impulsraum transformiert werden. Dazu definiert man die Fourier-Transformierte des Ordnungsparameterfeldes

$$\tilde{\phi}_{\alpha, \mathbf{p}, m} = \int_{\mathfrak{R}^d} d^d x \phi_{\alpha}(\mathbf{x}) e^{-i \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \langle z | m \rangle. \quad (2.23)$$

Für die Rücktransformation wird die Vollständigkeit

$$\frac{1}{A} \sum_{\mathbf{p}, m} e^{i \mathbf{p} \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{y}')} \langle z | m \rangle \langle m | z' \rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (2.24)$$

und die Orthogonalität

$$\frac{1}{A} \int_{\mathfrak{R}^d} d^d x e^{i \mathbf{x} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{p}')} \langle z | m \rangle \langle m' | z \rangle = \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \delta_{m, m'} \quad (2.25)$$

benötigt. Damit gilt:

$$\phi_{\alpha}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{A}} \sum_{\mathbf{p}, m} \tilde{\phi}_{\alpha, \mathbf{p}, m} e^{i \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \langle z | m \rangle. \quad (2.26)$$

Mit diesem Rüstzeug kann nun die Impulsdarstellung des *Hamiltonians* angegeben werden. Für den freien Anteil ergibt sich

$$\mathcal{H}_0[\tilde{\phi}] = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\mathbf{p}, m} (\mathbf{p}^2 + k_m^2 + \dot{\tau}) \tilde{\phi}_{\alpha, \mathbf{p}, m} \tilde{\phi}_{\alpha, -\mathbf{p}, m}. \quad (2.27)$$

Der Wechselwirkungsanteil wird zu

$$\mathcal{H}_{\text{int}}[\tilde{\phi}] = \frac{\dot{u}}{4!} \frac{1}{AL} \sum_{\substack{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \\ \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4}} \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_3, m_4}} \sum_{\substack{\alpha_1, \alpha_2 \\ \alpha_3, \alpha_4}} S_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4} \Delta_{m_1, m_2, m_3, m_4} \delta_{\sum_i \mathbf{p}_i, 0} \prod_i \tilde{\phi}_{\alpha_i, \mathbf{p}_i, m_i}. \quad (2.28)$$

Der vollkommen symmetrische Tensor vierter Stufe

$$S_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4} = \frac{1}{3} (\delta_{\alpha_1, \alpha_2} \delta_{\alpha_3, \alpha_4} + \delta_{\alpha_1, \alpha_3} \delta_{\alpha_2, \alpha_4} + \delta_{\alpha_1, \alpha_4} \delta_{\alpha_2, \alpha_3}) \quad (2.29)$$

garantiert dabei die Erhaltung der $O(n)$ -Symmetrie und der Tensor

$$\Delta_{m_1, m_2, m_3, m_4} = \int_0^1 d\zeta \prod_{i=1}^4 v_{m_i}(\zeta | \mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2) \quad (2.30)$$

definiert den Beitrag der Eigenfunktionen $\langle z|m \rangle$ zu den Vertices.

Ausgehend von diesen Darstellungen der *Hamiltonians*, kann nun die Schleifenentwicklung der freien Energie und der Zweipunktkorrelationsfunktion hergeleitet werden. Dabei soll ein besonderes Augenmerk auf den Limes $\mathcal{C}_1 = \mathcal{C}_2 \rightarrow 0$ gelegt werden, da hier, bedingt durch das Auftreten einer Nullmode im Spektrum, mit neuen Schwierigkeiten umzugehen ist.

2.2 Schleifenentwicklung der freien Energie

Ausgangspunkt für die Berechnung der freien Energie des im letzten Abschnitt vorgestellten Systems ist die Zustandssumme

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[\phi] e^{-\mathcal{H}[\phi]}. \quad (2.31)$$

Diese ist definiert als Integration des Boltzmann-Faktors über alle mögliche Realisierungen des Ordnungsparameterfeldes ϕ , welche den Randbedingungen genügen. Dies sei durch die Schreibweise $\mathcal{D}[\phi]$ für das Funktionalintegral angedeutet. Der für gewöhnlich im Exponenten auftretende Faktor $\beta = 1/k_B T$ sei hier bereits in die phänomenologischen Parameter des *Hamiltonians* miteinbezogen.

Aus dieser Zustandssumme kann die freie Energie durch Logarithmieren gewonnen werden. Es gilt

$$F_L = -k_B T \log \mathcal{Z}. \quad (2.32)$$

Zusammen mit der Definition der Zustandssumme lässt sich dies in zwei Beiträge aufspalten

$$\begin{aligned} \frac{F_L}{Ak_B T} &= f(L, \hat{\tau}, \hat{u}, \hat{c}_1, \hat{c}_2) \\ &= -\log \text{Sp}_\phi (e^{-\mathcal{H}_0[\phi]}) - \log \langle e^{-\mathcal{H}_{\text{int}}[\phi]} \rangle_0, \end{aligned} \quad (2.33)$$

wobei $\langle \dots \rangle_0$ den Erwartungswert bezüglich der freien Theorie \mathcal{H}_0 bezeichnet.

Im Folgenden soll die Schleifenentwicklung

$$f(L, \overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{u}, \overset{\circ}{c}_1, \overset{\circ}{c}_2) = \sum_{l=0}^{\infty} f^{[l]}(L, \overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{u}, \overset{\circ}{c}_1, \overset{\circ}{c}_2) \quad (2.34)$$

dieser reduzierten freien Energiedichte bis zur Zweischleifenordnung hergeleitet werden. Der Nullschleifenterm $f^{[0]}$ verschwindet in der ungeordneten Phase. Der erste Teil von Gleichung (2.33) liefert den Einschleifenterm $f^{[1]}$. Er entspricht dem Beitrag des ungestörten Systems und ist damit unabhängig von $\overset{\circ}{u}$. Der zweite Teil von Gleichung (2.33) liefert Beiträge zu den höheren Schleifentermen $f^{[l]}$, $l > 1$ und beschreibt die durch den Wechselwirkungsterm auftretenden Korrekturen zum freien Anteil. Der freie Beitrag soll zuerst berechnet werden. Die Berechnung der Spur zerfällt in Gauß-Integrale und kann somit analytisch geschlossen durchgeführt werden. Das Funktionalintegral über ϕ geht beim Übergang in den Impulsraum in gewöhnliche Integrale über die Fourier-Koeffizienten $\tilde{\phi}_{\alpha, \mathbf{p}, m}$ über. Dabei muss jedoch berücksichtigt werden, dass aufgrund der Tatsache, dass die Felder ϕ_α reell sind, die Entwicklungskoeffizienten $\phi_{\alpha, \mathbf{p}, m}$ voneinander abhängen. Es gilt nämlich:

$$\tilde{\phi}_{\alpha, \mathbf{p}, m} = \tilde{\phi}_{\alpha, -\mathbf{p}, m}^* \quad (2.35)$$

Um eine Doppelzählung zu vermeiden, gilt also:

$$\int \mathcal{D}[\phi] \longrightarrow \prod_{\alpha, m} \prod_{\substack{p_1, p_2, \dots, p_{d-1} \\ p_d > 0}} \int_{-\infty}^{\infty} d(\text{Re } \tilde{\phi}_{\alpha, \mathbf{p}, m}) d(\text{Im } \tilde{\phi}_{\alpha, \mathbf{p}, m}). \quad (2.36)$$

Die Beschränkung des betrachteten Bereichs im \mathbf{p} -Raum sei mit dem Symbol $\prod'_{\mathbf{p}}$ angedeutet. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} \text{Sp}_\phi (e^{-\mathcal{H}_0[\phi]}) &= \\ &= \prod_{\alpha, m} \prod'_{\mathbf{p}} \int_{-\infty}^{\infty} d(\text{Re } \tilde{\phi}_{\alpha, \mathbf{p}, m}) d(\text{Im } \tilde{\phi}_{\alpha, \mathbf{p}, m}) e^{-(\mathbf{p}^2 + k_m^2 + \overset{\circ}{\tau}) [(\text{Re } \tilde{\phi}_{\alpha, \mathbf{p}, m})^2 + (\text{Im } \tilde{\phi}_{\alpha, \mathbf{p}, m})^2]} \\ &= \prod_{\alpha, m} \prod'_{\mathbf{p}} \frac{2\pi}{\mathbf{p}^2 + k_m^2 + \overset{\circ}{\tau}} \\ &= \prod_m \prod_{\mathbf{p}} \left(\frac{2\pi}{\mathbf{p}^2 + k_m^2 + \overset{\circ}{\tau}} \right)^{n/2}, \end{aligned} \quad (2.37)$$

womit der Gaußsche Anteil der freien Energie berechnet ist:

$$\log \text{Sp}_\phi (e^{-\mathcal{H}_0[\phi]}) = -\frac{n}{2} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{m=1}^{\infty} \log \left(\frac{\mathbf{p}^2 + k_m^2 + \dot{\tau}}{2\pi} \right). \quad (2.38)$$

Zur Berechnung des Wechselwirkungsbeitrags in Gleichung (2.33) wird zunächst die Exponentialfunktion entwickelt:

$$\begin{aligned} \langle e^{-\mathcal{H}_{\text{int}}[\phi]} \rangle_0 &= 1 - \frac{\dot{u}}{4!} \frac{1}{AL} \sum_{\substack{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \\ \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4}} \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_3, m_4}} \sum_{\substack{\alpha_1, \alpha_2 \\ \alpha_3, \alpha_4}} S_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4} \Delta_{m_1, m_2, m_3, m_4} \\ &\quad \times \delta_{\sum_i \mathbf{p}_i, 0} \left\langle \prod_i \tilde{\phi}_{\alpha_i, \mathbf{p}_i, m_i} \right\rangle_0 + O(\dot{u}^2). \end{aligned} \quad (2.39)$$

Die hier auftretende Vierpunktfunktion kann nach dem Wickschen Theorem in Zweipunktfunktionen zerlegt werden. Es treten dabei die drei Kontraktionen $\overbrace{\phi_\alpha \phi_\beta \phi_\gamma \phi_\delta}^{\text{---}}$, $\overbrace{\phi_\alpha \phi_\beta \phi_\gamma \phi_\delta}^{\text{---}}$ und $\overbrace{\phi_\alpha \phi_\beta \phi_\gamma \phi_\delta}^{\text{---}}$ auf, welche alle den gleichen Beitrag liefern. Mit dem Zusammenhang zwischen der Zweipunktfunktion und dem freien Propagator $G_{\alpha_1, \alpha_2; m_1, m_2}^{(0)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$

$$\left\langle \tilde{\phi}_{\alpha_1, \mathbf{p}_1, m_1} \tilde{\phi}_{\alpha_2, \mathbf{p}_2, m_2} \right\rangle_0 = G_{\alpha_1, \alpha_2; m_1, m_2}^{(0)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \quad (2.40)$$

$$= \frac{\delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, 0}}{\mathbf{p}_1^2 + k_{m_1}^2 + \dot{\tau}} \delta_{m_1, m_2} \delta_{\alpha_1, \alpha_2} \quad (2.41)$$

ergibt sich durch Entwicklung des Logarithmus bis zur ersten Ordnung in \dot{u}

$$\begin{aligned} \log \langle e^{-\mathcal{H}_{\text{int}}[\phi]} \rangle_0 &= \\ &= -\frac{\dot{u}}{4!} \frac{n(n+2)}{AL} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \sum_{m_1, m_2} \Delta_{m_1, m_1, m_2, m_2} \frac{1}{\mathbf{p}_1^2 + k_{m_1}^2 + \dot{\tau}} \frac{1}{\mathbf{p}_2^2 + k_{m_2}^2 + \dot{\tau}} + O(\dot{u}^2), \end{aligned} \quad (2.42)$$

wobei zusätzlich die Beziehung

$$\sum_{\alpha_1, \alpha_2=1}^n S_{\alpha_1, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_2} = \frac{n(n+2)}{3} \quad (2.43)$$

ausgenutzt wurde. An dieser Stelle kann der thermodynamische Limes $L_{\parallel} \rightarrow \infty$ vollzogen und somit die gewünschte Filmgeometrie erhalten werden. Aus den Summen über die

Impulse werden dann gemäß

$$\sum_{\mathbf{p}} \longrightarrow \frac{1}{A} \int \frac{d^{d-1}p}{(2\pi)^{d-1}} \equiv \frac{1}{A} \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \quad (2.44)$$

Integrale. In der ungeordneten Phase ist diese Entwicklung in der Kopplungskonstanten identisch mit der Schleifenentwicklung. Es ergibt sich dann für die freie Energie des Films pro Fläche bis zur Zweischleifenordnung

$$-f(L, \hat{\tau}, \hat{u}, \hat{c}_1, \hat{c}_2) = \bigcirc + \bigcirc \bullet \bigcirc + O(3 \text{ Schleifen}) \quad (2.45)$$

mit dem freien Beitrag

$$\bigcirc = -\frac{n}{2} \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \sum_{m=1}^{\infty} \log \left(\frac{\mathbf{p}^2 + k_m^2 + \hat{\tau}}{2\pi} \right) \quad (2.46)$$

und der ersten durch die Wechselwirkung hervorgerufenen Korrektur

$$\begin{aligned} & \bigcirc \bullet \bigcirc \\ &= -\frac{\hat{u}}{4!} \frac{n(n+2)}{L} \int_{\mathbf{p}_1}^{(d-1)} \int_{\mathbf{p}_2}^{(d-1)} \sum_{m_1, m_2} \Delta_{m_1, m_1, m_2, m_2} \frac{1}{\mathbf{p}_1^2 + k_{m_1}^2 + \hat{\tau}} \frac{1}{\mathbf{p}_2^2 + k_{m_2}^2 + \hat{\tau}}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Für die Berechnung dieses Diagramms werden die Koeffizienten $\Delta_{m_1, m_1, m_2, m_2}$ benötigt. Sie können direkt aus der Definition (2.30) berechnet werden. Mit den Eigenfunktionen (2.12) erhält man sie durch Berechnung des Integrals. Ersetzt man alle im Ergebnis auftretenden trigonometrischen Funktionen mit Hilfe der Randbedingungen in der Form (2.15) und deren Analoga für die zweite Oberfläche, so lässt sich das Ergebnis nach längerer, aber elementarer Umformung schreiben als:

$$\begin{aligned} & \Delta_{m_1, m_1, m_2, m_2}(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2) \\ &= \frac{1}{8} \sum_{\sigma, \rho=0}^2 \frac{\lambda_{m_1} \kappa_{m_1}^{2\sigma}}{(\mathcal{C}_1^2 + \kappa_{m_1}^2) (\mathcal{C}_2^2 + \kappa_{m_1}^2)} \frac{\lambda_{m_2} \kappa_{m_2}^{2\rho}}{(\mathcal{C}_1^2 + \kappa_{m_2}^2) (\mathcal{C}_2^2 + \kappa_{m_2}^2)} P_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(\sigma, \rho)} \\ & \quad + \frac{1}{4} \delta_{m_1, m_2} \lambda_{m_2}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Dabei wurden die Koeffizienten

$$P_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(0,0)} = 2\mathcal{C}_1^3 \mathcal{C}_2^3 (\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2 + \mathcal{C}_1 \mathcal{C}_2) \quad (2.49a)$$

$$P_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(1,1)} = 2 (\mathcal{C}_1^3 + \mathcal{C}_2^3 + 2\mathcal{C}_1^2 \mathcal{C}_2 + 2\mathcal{C}_2^2 \mathcal{C}_1 + (\mathcal{C}_1^2 + \mathcal{C}_2^2)^2) \quad (2.49b)$$

$$P_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(2,2)} = 2 \quad (2.49c)$$

$$P_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(1,0)} = 2\mathcal{C}_1 \mathcal{C}_2 (\mathcal{C}_1^2 + \mathcal{C}_2^2) (\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2 + \mathcal{C}_1 \mathcal{C}_2) \quad (2.49d)$$

$$P_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(2,1)} = 2(\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2 + \mathcal{C}_1^2 + \mathcal{C}_2^2) \quad (2.49e)$$

$$P_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(2,0)} = 2\mathcal{C}_1 \mathcal{C}_2 (\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2 + \mathcal{C}_1 \mathcal{C}_2) \quad (2.49f)$$

$$P_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(\sigma, \rho)} = P_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(\rho, \sigma)} \quad (2.49g)$$

definiert. Damit hat man alle erforderlichen Gleichungen, um die freie Energie des Films mit Robin-Randbedingungen in Zweischleifennäherung, also in erster Ordnung in \mathring{u} , zu berechnen. Dies soll nun mit Hilfe der in Anhang A.1 hergeleiteten Summationsformel für Summen der Form

$$\sum_{m=1}^{\infty} f(\kappa_m) (\kappa_m^2 + b^2)^a \quad (2.50)$$

geschehen. Dabei wird in allen Rechnungen, statt einen *Cutoff* in den Impulsintegralen einzuführen, die Methode der dimensionellen Regularisierung verwendet, um die ultraviolett(UV)-divergenten Impulsintegrale und Summen über das Spektrum zu regularisieren. Die UV-Divergenzen treten dann als Polterme in $\epsilon = 4 - d$ auf. Im Verlauf der Rechnungen treten dabei immer wieder Integrale der Form

$$\int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \frac{1}{(\mathbf{p}^2 + b)^a} \quad (2.51)$$

auf. Diese Integrale können in hypersphärischen Koordinaten berechnet werden. Ausintegration der Winkel liefert

$$\int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \frac{1}{(\mathbf{p}^2 + b)^a} = K_{d-1} \int_0^{\infty} dp \frac{p^{d-2}}{(\mathbf{p}^2 + b)^a} \quad (2.52)$$

mit

$$K_D = \int_{\mathbf{p}}^{(D)} \delta(|\mathbf{p}| - 1) = \frac{2}{(4\pi)^{D/2} \Gamma(\frac{D}{2})}. \quad (2.53)$$

Das verbleibende Integral über den Betrag des Impulses kann mit Hilfe des Residuensatzes in der komplexen Ebene berechnet werden [104, Kapitel 4.5]. Es gilt

$$\int_0^\infty dx x^{\mu-1} f(x) = \pi \csc(\pi\mu) \sum_i \text{Res} [(-z)^{\mu-1} f(z)]_{z=z_i}, \quad (2.54)$$

wobei die Summe über alle Pole der Funktion f geht.

Zunächst soll der Einschleifenterm (2.46) am kritischen Punkt berechnet werden. Durch Ableiten nach der Temperatur $\hat{\tau}$ lässt sich das Impulsintegral auf die Form (2.52) bringen und mit Gleichung (2.54) in dimensioneller Regularisierung berechnen. Bei der anschließenden Integration nach $\hat{\tau}$ muss die Integrationskonstante passend gewählt werden. Dies geschieht so, dass sich im Limes $\hat{c}_1 = \hat{c}_2 \rightarrow \infty$ die bekannten Ergebnisse für Dirichlet-Randbedingungen ergeben. Erst danach wird $\hat{\tau} = 0$ gesetzt. Damit erhält man für den Einschleifenterm

$$f^{[1]}(L, \hat{\tau} = 0, \hat{c}_1, \hat{c}_2) = -nL^{-(d-1)} \frac{A_{d-1}}{d-1} \sum_{m=1}^{\infty} \kappa_m^{d-1} \quad (2.55)$$

mit dem Faktor

$$A_D = -\frac{1}{(4\pi)^{D/2}} \Gamma\left(1 - \frac{D}{2}\right). \quad (2.56)$$

Hier kann die in Anhang A.1 hergeleitete Summationsformel (A.18)

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^{\infty} \kappa_m^{d-1} &= \frac{1}{2 \sin\left(\frac{d\pi}{2}\right)} (\mathcal{C}_1^{d-1} + \mathcal{C}_2^{d-1}) \\ &\quad - \frac{d-1}{\pi} \cos\left(\frac{d\pi}{2}\right) \int_0^\infty dt t^{d-2} \log \left[1 - \frac{t - \mathcal{C}_1}{t + \mathcal{C}_1} \frac{t - \mathcal{C}_2}{t + \mathcal{C}_2} e^{-2t} \right] \end{aligned} \quad (2.57)$$

angewendet werden. Der erste Summand auf der rechten Seite liefert Oberflächenbeiträge zur freien Energie und wird daher subtrahiert. Für den *Finite-Size*-Anteil der freien Energie in Einschleifenordnung ergibt sich damit

$$\begin{aligned} f_{\text{res}}^{[1]}(L, \hat{\tau} = 0, \hat{c}_1, \hat{c}_2) \\ = \frac{n}{2} L^{-(d-1)} K_{d-1} \int_0^\infty dt t^{d-2} \log \left[1 - \frac{t - \mathcal{C}_1}{t + \mathcal{C}_1} \frac{t - \mathcal{C}_2}{t + \mathcal{C}_2} e^{-2t} \right]. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Gleichzeitig lässt sich der Einschleifenterm der Entwicklung der Exzess-Freien-Energie des halbumendlichen Modells mit der Oberflächenkopplung \mathring{c} ablesen. Für diesen gilt

$$f_s^{[1]}(\mathring{\tau} = 0, \mathring{c}) = -\frac{n}{2 \sin\left(\frac{d\pi}{2}\right)} \frac{A_{d-1}}{d-1} \mathring{c}^{d-1}. \quad (2.59)$$

Das Ergebnis (2.58) wurde schon in [105] mit Hilfe von Funktionalintegralen hergeleitet. Bereits zuvor wurde in [106] sein Analogon in der Quantenfeldtheorie mit der Zetafunktionsregularisierung abgeleitet.

Die Berechnung des Zweischleifenters der freien Energie des Films ist etwas aufwendiger. Berechnung der Impuls-Integrale liefert

$$f^{[2]}(L, \mathring{\tau} = 0, \mathring{u}, \mathring{c}_1, \mathring{c}_2) = L^{-(d-1)} L^\epsilon n(n+2) \frac{\mathring{u}}{4!} A_{d-1}^2 \sum_{m_1, m_2=1}^{\infty} \Delta_{m_1, m_1, m_2, m_2} \kappa_{m_1}^{d-3} \kappa_{m_2}^{d-3}. \quad (2.60)$$

Mit der Definition der Vertexbeiträge $\Delta_{m_1, m_1, m_2, m_2}(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2)$ aus Gleichung (2.48) ergibt sich mit Hilfe der Summationsformeln (A.22) und (A.23) für die Doppelsumme der Ausdruck

$$\begin{aligned} & \sum_{m_1, m_2=1}^{\infty} \Delta_{m_1, m_1, m_2, m_2} \kappa_{m_1}^{d-3} \kappa_{m_2}^{d-3} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \rho=0}^2 P_{L\mathring{c}_1, L\mathring{c}_2}^{(\sigma, \rho)} \left[X_{L\mathring{c}_1, L\mathring{c}_2}^{(d, \sigma)} + Y_{L\mathring{c}_1, L\mathring{c}_2}^{(d, \sigma)} \right] \left[X_{L\mathring{c}_1, L\mathring{c}_2}^{(d, \rho)} + Y_{L\mathring{c}_1, L\mathring{c}_2}^{(d, \rho)} \right] + \frac{1}{2} Z_{L\mathring{c}_1, L\mathring{c}_2}^{(d)}. \end{aligned} \quad (2.61)$$

Dabei wurden die Funktionen

$$X_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(d, \sigma)} = \frac{1}{2} \operatorname{csc} \left(\frac{d+2\sigma}{2} \pi \right) \frac{\mathcal{C}_1^{2\sigma+d-4} - \mathcal{C}_2^{2\sigma+d-4}}{\mathcal{C}_1^2 - \mathcal{C}_2^2}, \quad (2.62)$$

$$Y_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(d, \sigma)} = -\frac{2}{\pi} \cos \left(\frac{d\pi}{2} \right) \int_0^\infty dt \frac{(-1)^\sigma t^{2\sigma+d-3}}{(t+\mathcal{C}_1)^2 (t+\mathcal{C}_2)^2 e^{2t} - (t^2 - \mathcal{C}_1^2)(t^2 - \mathcal{C}_2^2)} \quad (2.63)$$

und

$$Z_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(d)} = \frac{2}{\pi} \sin(d\pi) \int_0^\infty dt t^{2d-6} \left[\frac{t+\mathcal{C}_1}{t-\mathcal{C}_1} \frac{t+\mathcal{C}_2}{t-\mathcal{C}_2} e^{2t} - 1 \right]^{-1} \quad (2.64)$$

definiert.

Auch in dem Zweischleifendiagramm sind noch *Bulk*- und Oberflächenterme enthalten.

Sie können anhand ihrer L -Abhängigkeit identifiziert werden und lauten:

$$\begin{aligned}
 & f_s^{[2]}(\dot{\tau} = 0, \dot{u}, \dot{c}_1, \dot{c}_2) + f_b^{[2]}(\dot{\tau} = 0, \dot{u}) \\
 &= L^{-(d-1)} L^\epsilon \frac{n(n+2)}{2} \frac{\dot{u}}{4!} A_{d-1}^2 \sum_{\sigma, \rho=0}^2 P_{L\dot{c}_1, L\dot{c}_2}^{(\sigma, \rho)} X_{L\dot{c}_1, L\dot{c}_2}^{(d, \sigma)} X_{L\dot{c}_1, L\dot{c}_2}^{(d, \rho)} \\
 &= \sum_{j=1}^2 \frac{n(n+2)}{2} \frac{\dot{u}}{4!} \frac{A_{d-1}^2 \dot{c}_j^{2d-5}}{\cos(d\pi) - 1} \\
 &= f_s^{[2]}(\dot{\tau} = 0, \dot{u}, \dot{c}_1) + f_s^{[2]}(\dot{\tau} = 0, \dot{u}, \dot{c}_2). \tag{2.65}
 \end{aligned}$$

Der *Bulk*-Anteil der freien Energie verschwindet also am kritischen Punkt in der Zweischleifennäherung

$$f_b(\dot{\tau} = 0, \dot{u}) = f_b^{[1]}(\dot{\tau} = 0) + f_b^{[2]}(\dot{\tau} = 0, \dot{u}) + O(\dot{u}^2) = O(\dot{u}^2), \tag{2.66}$$

was eine Folge der dimensionellen Regularisierung ist. Für die Exzess-Freie-Energie des halbumendlichen Systems mit der Oberflächenkopplung \dot{c} ergibt sich damit in Zweischleifennäherung

$$\begin{aligned}
 & f_s(\dot{\tau} = 0, \dot{u}, \dot{c}) = f_s^{[1]}(\dot{\tau} = 0, \dot{c}) + f_s^{[2]}(\dot{\tau} = 0, \dot{u}, \dot{c}) + O(\dot{u}^2) \\
 &= -\frac{n\pi K_{d-1}}{2(d-1)\sin(d\pi)} \dot{c}^{d-1} + \frac{n(n+2)}{2} \frac{\dot{u}}{4!} \frac{A_{d-1}^2 \dot{c}^{2d-5}}{\cos(d\pi) - 1} + O(\dot{u}^2). \tag{2.67}
 \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis erhält man auch, wenn man die freie Energie direkt mit dem freien Propagator des halbumendlichen Modells berechnet. Dies wurde in [15, Anhang 4] durchgeführt. Die verbleibenden Terme in Gleichung (2.60) liefern damit Beiträge zum *Finite-Size*-Anteil der freien Energie. Sie können zusammengefasst werden als

$$\begin{aligned}
 & f_{\text{res}}^{[2]}(L, \dot{\tau} = 0, \dot{u}, \dot{c}_1, \dot{c}_2) = L^{-(d-1)} L^\epsilon n \frac{n+2}{2} \frac{\dot{u}}{4!} A_{d-1}^2 \\
 & \times \left\{ \sum_{\sigma, \rho=0}^2 P_{L\dot{c}_1, L\dot{c}_2}^{(\sigma, \rho)} \left[2X_{L\dot{c}_1, L\dot{c}_2}^{(d, \sigma)} Y_{L\dot{c}_1, L\dot{c}_2}^{(d, \rho)} + Y_{L\dot{c}_1, L\dot{c}_2}^{(d, \sigma)} Y_{L\dot{c}_1, L\dot{c}_2}^{(d, \rho)} \right] + Z_{L\dot{c}_1, L\dot{c}_2}^{(d)} \right\}. \tag{2.68}
 \end{aligned}$$

Die Funktionen $X_{L\dot{c}_1, L\dot{c}_2}^{(d,1)}$ und $X_{L\dot{c}_1, L\dot{c}_2}^{(d,2)}$ weisen bei $d = 4$ einfache Pole auf. Dadurch verursacht hat auch der *Finite-Size*-Anteil der freien Energie in Zweischleifennäherung einen

einfachen Pol in $\epsilon = 4 - d$ bei $\epsilon = 0$. Er divergiert wie

$$\begin{aligned} f_{\text{res}}^{[2]}(L, \dot{\tau} = 0, \dot{u}, \dot{c}_1, \dot{c}_2) \\ = L^{-(d-1)} \frac{n(n+2)\dot{u}L^\epsilon N_d}{12\pi\epsilon} L(\dot{c}_1 + \dot{c}_2) \left(\dot{c}_1 \dot{c}_2 L^2 Y_{L\dot{c}_1, L\dot{c}_2}^{(4,1)} + Y_{L\dot{c}_1, L\dot{c}_2}^{(4,2)} \right) + O(\epsilon^0), \end{aligned} \quad (2.69)$$

wobei der Faktor

$$N_d = \frac{2\Gamma\left(3 - \frac{d}{2}\right)}{(d-2)(4\pi)^{d/2}} \quad (2.70)$$

definiert wurde. Ebenso enthält die Exzess-Freie-Energie des halbunendlichen Modells ähnliche Polterme in vier Dimensionen.

Im nächsten Kapitel wird erläutert, wie dieses Modell renormiert werden kann, dass heißt, wie — durch geeignete Reskalierungen der nackten Parameter \dot{u} , \dot{c}_1 und \dot{c}_2 — die Divergenzen in vier Dimensionen absorbiert werden können.

2.2.1 Renormierung des Modells

Die im letzten Abschnitt hergeleiteten Ausdrücke für die Zweischleifenordnung der freien Energie enthielten noch UV-Divergenzen, welche als einfache Pole in $\epsilon = 4 - d$ bei $\epsilon = 0$ offenbar wurden. In diesem Abschnitt soll auf die bereits erwähnte Renormierung des Modells eingegangen werden, bei der diese Pole entfernt werden. Dazu sollen jedoch nur die wesentlichen Überlegungen und Schritte erwähnt werden. In der Literatur gibt es zahlreiche ausführliche Darstellungen dieser Prozedur. Als Beispiele seien die Lehrbücher [107–109] für *Bulk*-Systeme sowie der Übersichtsartikel [93] für Systeme mit Oberflächen genannt.

Korrelationsfunktionen

Zunächst soll die Renormierung der Korrelationsfunktionen erläutert werden. Sie können aus ihrem erzeugenden Funktional

$$\mathcal{G}[\mathbf{J}, \mathbf{J}^{(1)}, \mathbf{J}^{(2)}] = \mathcal{N} \int \mathcal{D}[\phi] e^{\mathcal{A}[\phi, \mathbf{J}, \mathbf{J}^{(1)}, \mathbf{J}^{(2)}]} \quad (2.71)$$

berechnet werden. Dabei wurde die Wirkung

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[\phi, \mathbf{J}, \mathbf{J}^{(1)}, \mathbf{J}^{(2)}] = & -\mathcal{H}[\phi] + \int_{\mathfrak{B}} d^d x \mathbf{J}(\mathbf{x}) \cdot \phi(\mathbf{x}) \\ & + \int_{\mathfrak{B}_1} d^{d-1} y \mathbf{J}^{(1)}(\mathbf{y}) \cdot \phi(\mathbf{y}, 0) + \int_{\mathfrak{B}_2} d^{d-1} y \mathbf{J}^{(2)}(\mathbf{y}) \cdot \phi(\mathbf{y}, L) \end{aligned} \quad (2.72)$$

definiert. Die Normierungskonstante \mathcal{N} muss dabei so gewählt werden, dass $\mathcal{G}[\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}] = 1$ gilt. Die (N, M, M') -Korrelationsfunktion, bei der N Punkte innerhalb des Volumens \mathfrak{B} , M Punkte auf der ersten Oberfläche \mathfrak{B}_1 und M' auf der zweiten Oberfläche \mathfrak{B}_2 liegen, kann dann durch Berechnung der Funktionalableitungen nach den externen Feldern \mathbf{J} , $\mathbf{J}^{(1)}$ und $\mathbf{J}^{(2)}$ bestimmt werden:

$$G^{(N, M, M')}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_M; \mathbf{y}'_1, \dots, \mathbf{y}'_{M'}) = \left\langle \prod_{j=1}^N \phi_{\alpha_j}(\mathbf{x}_j) \prod_{l=1}^M \phi_{\beta_l}(\mathbf{y}_l, 0) \prod_{l'=1}^{M'} \phi_{\beta'_{l'}}(\mathbf{y}'_{l'}, L) \right\rangle \quad (2.73)$$

$$= \prod_{j=1}^N \frac{\delta}{\delta J_{\alpha_j}(\mathbf{x}_j)} \prod_{l=1}^M \frac{\delta}{\delta J_{\beta_l}^{(1)}(\mathbf{y}_l, 0)} \prod_{l'=1}^{M'} \frac{\delta}{\delta J_{\beta'_{l'}}^{(1)}(\mathbf{y}'_{l'}, L)} \mathcal{G}[\mathbf{J}, \mathbf{J}^{(1)}, \mathbf{J}^{(2)}] \Big|_{\mathbf{J}=\mathbf{J}^{(1)}=\mathbf{J}^{(2)}=\mathbf{0}}. \quad (2.74)$$

Analog dazu lassen sich die zugehörigen Kumulanten aus der Kumulantenerzeugenden

$$\mathcal{G}_{\text{cum}}[\mathbf{J}, \mathbf{J}^{(1)}, \mathbf{J}^{(2)}] = \log \mathcal{G}[\mathbf{J}, \mathbf{J}^{(1)}, \mathbf{J}^{(2)}] \quad (2.75)$$

berechnen:

$$G_{\text{cum}}^{(N, M, M')}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_M; \mathbf{y}'_1, \dots, \mathbf{y}'_{M'}) = \prod_{j=1}^N \frac{\delta}{\delta J_{\alpha_j}(\mathbf{x}_j)} \prod_{l=1}^M \frac{\delta}{\delta J_{\beta_l}^{(1)}(\mathbf{y}_l, 0)} \prod_{l'=1}^{M'} \frac{\delta}{\delta J_{\beta'_{l'}}^{(1)}(\mathbf{y}'_{l'}, L)} \mathcal{G}_{\text{cum}}[\mathbf{J}, \mathbf{J}^{(1)}, \mathbf{J}^{(2)}] \Big|_{\mathbf{J}=\mathbf{J}^{(1)}=\mathbf{J}^{(2)}=\mathbf{0}}. \quad (2.76)$$

Für diese Kumulanten und die Vertexfunktionen kann — analog zu der Herleitung der Schleifenentwicklung der freien Energie aus Abschnitt 2.2 — eine störungstheoretische Entwicklung in Feynman-Diagrammen bestimmt werden. Die Kumulanten sind eine Untermenge der Feynman-Graphen der Korrelationsfunktionen und bestehen nur aus zusammenhängenden Diagrammen. Die Vertexfunktionen sind die Menge der Ein-Teilchen-irreduziblen Graphen und können durch eine Legendre-Transformation der Kumulantenerzeugenden erhalten werden.

In diesen Entwicklungen sind — analog zur freien Energie — UV-Divergenzen enthalten. Bei der Berechnung muss also wieder ein Regularisierungsverfahren verwendet werden. Im Fall der kondensierten Materie bietet sich die *Cutoff*-Regularisierung an, da hier ein solcher *Cutoff* in natürlicher Weise auftritt. Erst nach anschließender Renormierung des Modells kann dieser *Cutoff* wieder entfernt werden. Dabei werden die UV-Divergenzen systematisch in den phänomenologischen Parametern des Systems absorbiert und man erhält renormierte Feynman-Diagramme, welche trotz der Entfernung der Regularisie-

rung (also zum Beispiel dem Limes $\Lambda \rightarrow \infty$) wohldefiniert bleiben.

Häufig ist es jedoch sinnvoller, dimensionelle Regularisierung zu verwenden, bei der die betreffenden Integrale in einem Dimensionsbereich berechnet werden, in dem sie konvergieren, und das Ergebnis dann auf die gewünschte Dimension analytisch fortgesetzt wird. Diese Regularisierung wurde auch angewandt, um die im vorherigen Abschnitt hergeleiteten Ausdrücke für die freie Energie zu erhalten. Dabei treten die UV-Divergenzen als Polterme in der Dimension d auf. Die Renormierungsfunktionen werden nach dem Schema der minimalen Subtraktion der Pole in ϵ bestimmt. Trotz der Beschränkung des Systems in einer Raumrichtung auf das endliche Intervall $[0, L]$ wird in dieser Arbeit im Impulsraum gerechnet. Während die Moden im *Bulk*-System in allen Richtungen dicht und kontinuierlich sind, gilt dies hier nur für die Moden in den parallelen Richtungen. Die Moden senkrecht zu den Oberflächen sind diskret. In dieser Darstellung kann auf den Umgang mit Distributionen, welcher bei Rechnungen im gemischten Impuls- und Ortsraum (\mathbf{p}, z) unvermeidbar ist, verzichtet werden.

Die translationsinvariante ϕ^4 -Theorie ist in vier Dimensionen renormierbar [108], das heißt, alle UV-Divergenzen können durch Reparametrisierung endlich vieler Parameter des Modells absorbiert werden⁶. Dazu werden sogenannte Z -Faktoren eingeführt, welche selber für $\Lambda \rightarrow \infty$ beziehungsweise $\epsilon \rightarrow 0$ divergieren. Mit diesen Renormierungsfunktionen werden der Ordnungsparameter, die Temperatur sowie die Kopplungskonstante reparametrisiert⁷

$$\phi = Z_\phi^{1/2} \phi^{\text{ren}} \quad (2.77\text{a})$$

$$\overset{\circ}{\tau} - \overset{\circ}{\tau}_{c,\infty} \equiv \delta \overset{\circ}{\tau} = \mu^2 Z_\tau \tau \quad (2.77\text{b})$$

$$\overset{\circ}{u} N_d = \mu^{4-d} Z_u u, \quad (2.77\text{c})$$

wobei μ eine beliebige Impulsskala darstellt und so in die Reparametrisierungen eingeht, dass sowohl Z -Faktoren als auch renormierte Größen dimensionslos sind. Der Faktor N_d wurde bereits in Gleichung (2.70) definiert und hat die Entwicklung für kleine ϵ

$$N_d = \frac{1}{16\pi} \left[1 + \frac{1 - \gamma_E + \log(4\pi)}{2} \epsilon + O(\epsilon^2) \right] \quad (2.78)$$

⁶Es gibt bestimmte Größen, bei denen diese multiplikative Renormierung nicht ausreichend ist. Dazu gehört zum Beispiel die freie Energie. Deren Renormierung wird in Abschnitt 2.2.1 besprochen.

⁷In der renormierten Kopplungskonstanten u wird — wie auch in [19] und [20] — eine Konstante N_d absorbiert. Diese Wahl hat den Vorteil, dass die Z -Faktoren, wenn sie mit der Methode der minimalen Subtraktion von Poltermen in ϵ bestimmt werden, bis zur zweiten Ordnung in u mit den Zweischleifenergebnissen aus [93, 110–113] und den von Krech und Dietrich [12, 17] verwendeten übereinstimmen. In der Literatur werden teilweise davon abweichende Konstanten absorbiert, was zu anderen Z -Faktoren führen kann. Siehe zum Beispiel [114] und die dort angegebenen Referenzen.

mit der Euler-Mascheroni-Konstanten γ_E .⁸ Die Verschiebung der kritischen Temperatur wird durch $\overset{\circ}{\tau}_{c,\infty}$ beschrieben. Sie divergiert bei Benutzung der *Cutoff*-Regularisierung wie $\overset{\circ}{\tau}_{c,\infty} \sim \Lambda^2$. Bei Verwendung der dimensionellen Regularisierung gilt jedoch in Störungstheorie, also in Verbindung mit der ϵ -Entwicklung

$$\overset{\circ}{\tau}_{c,\infty} = 0. \quad (2.79)$$

Sonst gilt $\overset{\circ}{\tau}_{c,\infty} = \dot{u}^{2/\epsilon} f(\epsilon)$, mit der meromorphen Funktion f .

Die Renormierungsfunktionen sind Potenzreihen in u und Laurent-Reihen in ϵ

$$Z_\varphi = 1 + \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=1}^l z_m(n) \frac{u^l}{\epsilon^m}, \quad \varphi = \phi, \tau, u. \quad (2.80)$$

Einsetzen der Reparametrisierungen in die unrenormierte Wirkung liefert die renormierte Wirkung

$$\mathcal{A}_b^{\text{ren}}[\phi^{\text{ren}}] = \mathcal{A}_b([\phi^{\text{ren}}, \mathbf{J}], \mu^2 \tau, \mu^{4-d} N_d^{-1} u) - \mathcal{H}_b^{\text{CT}}[\phi^{\text{ren}}] \quad (2.81)$$

mit den sogenannten *Counter*-Termen

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_b^{\text{CT}}[\phi^{\text{ren}}] = \int_{\mathfrak{X}} d^d x \left\{ \frac{1}{2} (Z_\phi - 1) \sum_{\alpha=1}^n (\nabla \phi_\alpha^{\text{ren}})^2 \right. \\ \left. + \frac{1}{2} [(Z_\phi Z_\tau - 1) \mu^2 \tau + Z_\phi \overset{\circ}{\tau}_{c,\infty}] (\phi^{\text{ren}})^2 + \mu^{4-d} N_d^{-1} \frac{u}{4!} (Z_u Z_\phi^2 - 1) [(\phi^{\text{ren}})^2]^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.82)$$

Nutzt man zur Berechnung der Kumulanten beziehungsweise Vertexfunktionen diese renormierte Wirkung, so werden alle UV-Divergenzen absorbiert und die entsprechenden renormierten Größen

$$G_{b,\text{cum,ren}}^{(N)}(\tau, u, \mu) = Z_\phi^{-N/2} G_b^{(N)}(\overset{\circ}{\tau}, \dot{u}) \quad (2.83)$$

sowie

$$\Gamma_{b,\text{ren}}^{(N)}(\tau, u, \mu) = Z_\phi^{N/2} \Gamma_b^{(N)}(\overset{\circ}{\tau}, \dot{u}) \quad (2.84)$$

⁸ $\gamma_E := \lim_{n \rightarrow \infty} (\sum_{k=1}^n \frac{1}{k} - \log n) = 0.5772156649 \dots$, siehe zum Beispiel Kapitel 1.5 in [115].

sind endlich. Zur konkreten Berechnung wird noch die explizite Form der Z -Faktoren benötigt. Bis zur ersten Ordnung in u lautet die Entwicklung [108]

$$Z_\phi = 1 - \frac{n+2}{36\epsilon} u^2 + O(u^3) \quad (2.85a)$$

$$Z_\tau = 1 + \frac{n+2}{3\epsilon} u + \frac{n+2}{9} \left[-\frac{5}{4\epsilon} + \frac{n+5}{\epsilon^2} \right] u^2 + O(u^3) \quad (2.85b)$$

$$Z_u = 1 + \frac{n+8}{3\epsilon} u + \left[-\frac{3n+14}{6\epsilon} + \frac{(n+8)^2}{9\epsilon^2} \right] u^2 + O(u^3). \quad (2.85c)$$

Für Systeme mit Oberflächen genügen die Reparametrisierungen (2.77) nicht, um alle UV-Divergenzen zu absorbieren. Vielmehr sind die beiden zusätzlichen Reparametrisierungen

$$\dot{c}_j - \dot{c}_{\text{sp}} = \mu Z_c c_j, \quad j = 1, 2 \quad (2.86a)$$

$$\phi|_{\mathfrak{B}_j} = (Z_\phi Z_1)^{1/2} \phi_{\mathfrak{B}_j}^{\text{ren}}, \quad j = 1, 2 \quad (2.86b)$$

vonnöten. Durch diese werden analog zum *Bulk*-Fall Oberflächen-*Counter*-Terme generiert. Der Oberflächenanteil der renormierten Wirkung lautet dann

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_s^{\text{ren}} &= \sum_{j=1}^2 \int_{\mathfrak{B}_j} d^{d-1}y \left[Z_1^{-1/2} \mathbf{J}^{(j)} \cdot \phi_{\mathfrak{B}_j}^{\text{ren}} - \frac{1}{2} (\mu Z_c c_j + \dot{c}_{\text{sp}}) Z_\phi \left(\phi_{\mathfrak{B}_j}^{\text{ren}} \right)^2 \right] \\ &= \sum_{j=1}^2 \left\{ \mathcal{A}_s \left(\left[\phi_{\mathfrak{B}_j}^{\text{ren}}, \mathbf{J}^{(1)}, \mathbf{J}^{(2)} \right], \mu c_1, \mu c_2 \right) + \mathcal{A}_s^{\text{CT}} \right\}. \end{aligned} \quad (2.87)$$

Die explizite Form von $\mathcal{A}_s^{\text{CT}}$ kann aus Gleichung (2.87) abgelesen werden. Zusammen mit den *Bulk*-Reparametrisierungen erhält man damit UV-endliche Kumulanten

$$\begin{aligned} G_{\text{cum,ren}}^{(N,M,M')}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_M; \mathbf{y}'_1, \dots, \mathbf{y}'_{M'}; L, \tau, u, c_1, c_2, \mu) \\ = Z_\phi^{-N/2} (Z_\phi Z_1)^{-(M+M')/2} G_{\text{cum}}^{(N,M,M')}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{y}'_{M'}; L, \dot{\tau}, \dot{u}, \dot{c}_1, \dot{c}_2). \end{aligned} \quad (2.88)$$

Die zusätzlichen Z -Faktoren lauten bis zur ersten Ordnung in u [93, 110–112]

$$Z_1 = 1 + \frac{n+2}{3\epsilon} u + \frac{n+2}{3} \left[-\frac{1}{\epsilon} + \frac{n+5}{3\epsilon^2} \right] u^2 + O(u^3) \quad (2.89a)$$

$$Z_c = 1 + \frac{n+2}{3\epsilon} u + \frac{n+2}{9} \left[\frac{1-4\pi^2}{4\epsilon} + \frac{n+5}{\epsilon^2} \right] u^2 + O(u^3). \quad (2.89b)$$

Geht man von der vollständigen renormierten Wirkung aus — diese enthält *Bulk*- und Oberflächenanteile —, so erhält man UV-endliche Kumulanten und Vertexfunktionen.

Die freie Energie

Wie bereits angedeutet, muss der *Bulk*- und Oberflächenanteil der freien Energie additiv renormiert werden, da die im letzten Abschnitt vorgestellte multiplikative Renormierung nicht genügt, um alle UV-Divergenzen zu beseitigen. Für den *Finite-Size*-Anteil gilt dies jedoch nicht.⁹ Für die additive Renormierung werden zusätzliche *Counter*-Terme zum *Hamiltonian* addiert [19], wobei es möglich ist, sie unabhängig von der Filmdicke L zu wählen, also

$$\mathcal{A}_{\text{add}} = \int_{\mathfrak{B}} d^d x C_{\mathfrak{B}}(\overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{u}) + \sum_{j=1}^2 \int_{\mathfrak{B}_j} d^{d-1} r C_{\mathfrak{B}}(\overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{u}, \overset{\circ}{c}_j). \quad (2.90)$$

Dabei ist $C_{\mathfrak{B}}(\overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{u})$ ein Polynom erster Ordnung in $\overset{\circ}{\tau}$ und $C_{\mathfrak{B}}(\overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{u}, \overset{\circ}{c}_j)$ ein Polynom erster Ordnung in $\overset{\circ}{\tau}$ und dritter Ordnung in $\overset{\circ}{c}_j$. Die Koeffizienten sind Potenzreihen in $\overset{\circ}{u}$ und unabhängig vom Ort \mathbf{x} . Sie können aus folgenden Überlegungen bestimmt werden: Der oberflächliche Divergenzgrad der *Bulk*-Anteils der freien Energie ist vier. Daher muss die Taylor-Entwicklung bis zur zweiten Ordnung in $\overset{\circ}{\tau}$ subtrahiert werden, um einen Ausdruck ohne UV-Divergenzen zu erhalten. Die dimensionslose, renormierte freie Energiedichte des *Bulk*-Systems lässt sich damit definieren als

$$\mu^{-d} f_{\text{b,ren}}(\tau, u) = f_{\text{b}}(\overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{u}) - \sum_{l=0}^2 \frac{1}{l!} \frac{\partial^l f_{\text{b}}}{\partial \overset{\circ}{\tau}^l} \Big|_{\text{NP}} (\overset{\circ}{\tau} - \overset{\circ}{\tau}_{\text{NP}})^l, \quad (2.91)$$

wobei als Normierungspunkt NP

$$\overset{\circ}{\tau}_{\text{NP}} \equiv \overset{\circ}{\tau}|_{\tau=1} = \overset{\circ}{\tau}_{\text{c},\infty} + \mu^2 Z_{\tau} \quad (2.92)$$

gewählt wurde.

Analog kann mit dem Oberflächenanteil der freien Energie verfahren werden. Der oberflächliche Divergenzgrad ist hier drei, womit die Subtraktionen

$$\mu^{-(d-1)} f_{\text{s,ren}}(\tau, u, c) = f_{\text{s}}(\overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{u}, \overset{\circ}{c}) - \sum_{\substack{l,k=0 \\ 0 \leq 2l+k \leq 3}}^2 \frac{1}{l!k!} \frac{\partial^{l+k} f_{\text{s}}}{\partial \overset{\circ}{\tau}^l \partial \overset{\circ}{c}^k} \Big|_{\text{NP}} (\overset{\circ}{\tau} - \overset{\circ}{\tau}_{\text{NP}})^l (\overset{\circ}{c} - \overset{\circ}{c}_{\text{NP}})^k \quad (2.93)$$

⁹Dies wird in Teil 3 dieser Arbeit benötigt werden, da es dabei im Gegensatz zu den Rechnungen aus diesem Teil nicht gelungen ist, den Oberflächenanteil von der Exzess-Freien-Energie abzuspalten, und somit prinzipiell noch Divergenzen vorkommen können.

genügen, um die UV-Divergenzen zu beseitigen und die dimensionslose, renormierte Exzess-Freie-Energie des halbumendlichen Modells zu definieren. Als Normierungspunkt wurde zusätzlich zu (2.92)

$$\dot{c}_{\text{NP}} \equiv \dot{c}|_{c=1} = \dot{c}_{\text{sp}} + \mu Z_c \quad (2.94)$$

gewählt. Aufgrund ihrer Konstruktion sind die Normierungsbedingungen

$$\left. \frac{\partial^l f_{\text{b,ren}}}{\partial \tau^l} \right|_{\text{NP}} \equiv \frac{\partial^l f_{\text{b,ren}}}{\partial \tau^l}(1, u) = 0, \quad 0 \leq l \leq 2 \quad (2.95a)$$

$$\left. \frac{\partial^{l+k} f_{\text{s,ren}}}{\partial \tau^l \partial c^k} \right|_{\text{NP}} \equiv \frac{\partial^{l+k} f_{\text{s,ren}}}{\partial \tau^l \partial c^k}(1, u, 1) = 0, \quad 0 \leq 2l + k \leq 3 \quad (2.95b)$$

erfüllt. Damit können die in $C_{\mathfrak{B}}(\hat{\tau}, \hat{u})$ und $C_{\mathfrak{B}}(\hat{\tau}, \hat{u}, \hat{c}_j)$ definierten Entwicklungskoeffizienten bestimmt werden.

2.2.2 Renormierungsgruppenanalyse

In diesem Abschnitt der Arbeit soll die Skalenform (1.23) des *Finite-Size*-Anteils der freien Energie durch Lösen der Renormierungsgruppengleichung hergeleitet werden. Im Hinblick auf den Teil 3 dieser Arbeit soll die Analyse bereits auf externe *Bulk*- und Oberflächenfelder h_{b} , h_1 und h_2 erweitert werden. Dazu werden die dimensionslosen renormierten Felder

$$h_{\text{b}}^{\text{ren}} = \mu^{-(d+2)/2} Z_{\phi}^{1/2} h_{\text{b}} \quad (2.96a)$$

$$h_j^{\text{ren}} = \mu^{-d/2} (Z_{\phi} Z_1)^{1/2} h_j, \quad j = 1, 2 \quad (2.96b)$$

eingeführt [93]. Der ebenfalls dimensionslose, multiplikativ renormierte *Finite-Size*-Anteil der freien Energie ist nun auch von diesen Feldern abhängig und lautet

$$f_{\text{res,ren}}(\mu L, \tau, u, h_{\text{b}}^{\text{ren}}, c_1, c_2, h_1^{\text{ren}}, h_2^{\text{ren}}) = \mu^{-(d-1)} f_{\text{res}}(L, \hat{\tau}, \hat{u}, h_{\text{b}}, \hat{c}_1, \hat{c}_2, h_1, h_2). \quad (2.97)$$

Durch Ableiten der Gleichung (2.97) bei konstanten nackten Parametern $\hat{\tau}$, \hat{u} , \hat{c}_1 und \hat{c}_2 sowie den nicht renormierten Feldern h_{b} und h_j nach der Impulsskala μ erhält man die Renormierungsgruppengleichung dieser Größe.¹⁰ Diese Ableitung sei mit dem Operator

$$\mathcal{D}_{\mu} = \mu \partial_{\mu}|_0 = \mu \partial_{\mu} + \beta_{\tau} \partial_{\tau} + \beta_u \partial_u + \beta_{\phi} \partial_{h_{\text{b}}^{\text{ren}}} + \sum_{j=1}^2 \left(\beta_{c_j} \partial_{c_j} + \beta_1 \partial_{h_j^{\text{ren}}} \right) \quad (2.98)$$

¹⁰Für die hier benutzten Konventionen und Notationen siehe [93].

bezeichnet. Damit ergibt sich

$$[\mathcal{D}_\mu + (d-1)] f_{\text{res,ren}}(\mu L, \tau, u, h_b^{\text{ren}}, c_1, c_2, h_1^{\text{ren}}, h_2^{\text{ren}}) = 0, \quad (2.99)$$

wobei die Funktionen

$$\beta_\tau(u, \tau) = \mu \partial_\mu|_0 \tau = -[2 + \eta_\tau(u)]\tau \quad (2.100a)$$

$$\beta_u(u) = \mu \partial_\mu|_0 u \quad (2.100b)$$

$$\beta_\phi(u, h_b^{\text{ren}}) = \mu \partial_\mu|_0 h_b^{\text{ren}} = - \left[3 - \frac{\epsilon + \eta_\phi(u)}{2} \right] h_b^{\text{ren}} \quad (2.100c)$$

$$\beta_c(u, c_j) = \mu \partial_\mu|_0 c_j = -[1 + \eta_c(u)]c_j \quad (2.100d)$$

$$\beta_1(u, h_j^{\text{ren}}) = \mu \partial_\mu|_0 h_j^{\text{ren}} = - \left[2 - \frac{\epsilon + \eta_\phi(u) + \eta_1(u)}{2} \right] h_j^{\text{ren}} \quad (2.100e)$$

mit den Exponenten- beziehungsweise Wilson-Funktionen

$$\eta_\varphi(u) = \mu \partial_\mu|_0 \log Z_\varphi = \beta_u(u) \partial_u \log Z_\varphi, \quad \varphi = \tau, \phi, c, 1 \quad (2.101)$$

definiert wurden. Einsetzen der Z -Faktoren aus Gleichungen (2.85) und (2.89) liefert explizit die Ausdrücke

$$\beta_u(u) = -\epsilon u + \frac{n+8}{3}u^2 - \frac{3n+14}{3}u^3 + O(u^4) \quad (2.102a)$$

$$\eta_\tau(u) = -\frac{n+2}{3}u + 5\frac{n+2}{18}u^2 + O(u^3) \quad (2.102b)$$

$$\eta_\phi(u) = \frac{n+2}{18}u^2 + O(u^3) \quad (2.102c)$$

$$\eta_c(u) = -\frac{n+2}{3}u + \frac{n+2}{18}(4\pi^2 - 1)u^2 + O(u^3) \quad (2.102d)$$

$$\eta_1(u) = -\frac{n+2}{3}u + 2\frac{n+2}{3}u^2 + O(u^3). \quad (2.102e)$$

Gleichung (2.99) soll nun mit Hilfe der Methode der Charakteristiken gelöst werden, um Informationen über das asymptotische kritische Verhalten des Systems zu erhalten. Dazu wird die Impulsskala mit einem Faktor ℓ reskaliert — $\mu \rightarrow \bar{\mu}(\ell) = \mu\ell$ — und werden die renormierten Parameter durch fließende Parameter $\bar{u}(\ell)$, $\bar{\tau}(\ell)$ und $\bar{c}_j(\ell)$ ersetzt. Aus den

Gleichungen (2.100) wird dann

$$\ell \frac{d}{d\ell} \bar{u}(\ell) = \beta_u [\bar{u}(\ell)] \quad \bar{u}(\ell = 1) = u \quad (2.103a)$$

$$\ell \frac{d}{d\ell} \bar{\tau}(\ell) = - \{2 + \eta_\tau [\bar{u}(\ell)]\} \bar{\tau}(\ell) \quad \bar{\tau}(\ell = 1) = \tau \quad (2.103b)$$

$$\ell \frac{d}{d\ell} \bar{h}_b(\ell) = -\frac{1}{2} \{d + 2 - \eta_\phi [\bar{u}(\ell)]\} \bar{h}_b(\ell) \quad \bar{h}_b(\ell = 1) = h_b^{\text{ren}} \quad (2.103c)$$

$$\ell \frac{d}{d\ell} \bar{c}_j(\ell) = - \{1 + \eta_c [\bar{u}(\ell)]\} \bar{c}_j(\ell) \quad \bar{c}_j(\ell = 1) = c_j \quad (2.103d)$$

$$\ell \frac{d}{d\ell} \bar{h}_j(\ell) = -\frac{1}{2} \{d - \eta_\phi [\bar{u}(\ell)] - \eta_1 [\bar{u}(\ell)]\} \bar{h}_j(\ell) \quad \bar{h}_j(\ell = 1) = h_j^{\text{ren}}, \quad (2.103e)$$

was ein System gewöhnlicher linearer Differentialgleichungen erster Ordnung bildet. Dies soll nun im für kritische Phänomene interessanten Infrarot-Limes $\ell \rightarrow 0$ untersucht werden. Die Beta-Funktion β_u hat für $d < 4$ einen nicht-trivialen Fixpunkt bei der Nullstelle

$$u^* = \frac{3}{n+8} \epsilon + 9 \frac{3n+14}{(n+8)^3} \epsilon^2 + O(\epsilon^3). \quad (2.104)$$

Wenn $\ell \rightarrow 0$ geht, dann geht $\bar{u}(\ell)$ gegen u^* , was u^* also zu einem IR-stabilen Fixpunkt macht. Der Gaußsche Fixpunkt $u_G^* = 0$ ist dann IR-instabil und UV-stabil. Entwickelt man die Beta-Funktion bis zur ersten Ordnung um die nicht-triviale Nullstelle u^*

$$\begin{aligned} \beta_u(u) &= \omega_u (u - u^*) + O[(u - u^*)^2], \quad \text{mit} \quad \omega_u := \beta'_u(u^*) \\ &= \epsilon - 3 \frac{3n-14}{(n+8)^2} \epsilon^2 + O(\epsilon^3), \end{aligned} \quad (2.105)$$

so lässt sich die Differentialgleichung (2.103a) lösen. Dies ergibt

$$\bar{u}(\ell) = u^* + (u - u^*) \ell^{\omega_u} + O[(u - u^*)^2]. \quad (2.106)$$

Der Exponent ω_u wird als Wegner-Exponent bezeichnet. Ebenso können die übrigen charakteristischen Gleichungen in (2.103) gelöst werden. Mit der Definition der Exponenten

$$\nu := \frac{1}{2 + \eta_\tau(u^*)} \quad (2.107a)$$

$$\eta := \eta_\phi(u^*) \quad (2.107b)$$

$$\Phi := \nu [1 + \eta_c(u^*)] \quad (2.107c)$$

$$\eta_{\parallel}^{\text{SP}} := \eta + \eta_1(u^*) \quad (2.107d)$$

lassen sich die Ergebnisse schreiben als:

$$\bar{\tau}(\ell) = \ell^{-1/\nu} \exp \left[- \int_u^{\bar{u}} du' \frac{2 + \eta_\tau(u') - 1/\nu}{\beta_u(u')} \right] \tau \equiv \ell^{-1/\nu} E_\tau(\bar{u}, u) \tau \quad (2.108a)$$

$$\bar{h}_b(\ell) = \ell^{-\Delta/\nu} \exp \left\{ - \int_u^{\bar{u}} du' \frac{[d + 2 - \eta_\phi(u')]/2 - \Delta/\nu}{\beta_u(u')} \right\} h_b \equiv \ell^{-\Delta/\nu} E_{h_b}(\bar{u}, u) h_b^{\text{ren}} \quad (2.108b)$$

$$\bar{c}_j(\ell) = \ell^{-\Phi/\nu} \exp \left[- \int_u^{\bar{u}} du' \frac{1 + \eta_c(u') - \Phi/\nu}{\beta_u(u')} \right] c_j \equiv \ell^{-\Phi/\nu} E_c(\bar{u}, u) c_j, \quad j = 1, 2 \quad (2.108c)$$

$$\begin{aligned} \bar{h}_j(\ell) &= \ell^{-\Delta_1^{\text{sp}}/\nu} \exp \left\{ - \int_u^{\bar{u}} du' \frac{[d - \eta_\phi(u') - \eta_1(u')]/2 - \Delta_1^{\text{sp}}/\nu}{\beta_u(u')} \right\} h_j^{\text{ren}} \\ &\equiv \ell^{-\Delta_1^{\text{sp}}/\nu} E_{h_1}(\bar{u}, u) h_j^{\text{ren}}, \quad j = 1, 2. \end{aligned} \quad (2.108d)$$

Dabei ist ν der kritische Exponent, welcher die Divergenz der Korrelationslänge am kritischen Punkt beschreibt und Φ der Oberflächen-*Crossover*-Exponent. Zudem ist Δ der *Gap*-Exponent, der mit η gemäß $\Delta = \nu(d + 2 - \eta)/2$ zusammenhängt. Δ_1^{sp} ist das Oberflächenanalogon zu Δ und kann aus ν und $\eta_{\parallel}^{\text{sp}}$ nach $\Delta_1^{\text{sp}} = \nu(d - \eta_{\parallel}^{\text{sp}})/2$ bestimmt werden. Für $\ell \rightarrow 0$ kann also in den Gleichungen (2.108) \bar{u} durch u ersetzt und so die Fixpunkte im $(\tau, u, h_b^{\text{ren}}, c_1, c_2, h_1^{\text{ren}}, h_2^{\text{ren}})$ -Raum identifiziert werden. Sie liegen bei den neun Wertepaaren mit $u = u^*, \tau = h_b^{\text{ren}} = h_1^{\text{ren}} = h_2^{\text{ren}} = 0$ und (c_1^*, c_2^*) mit

$$c_j^* = \begin{cases} c_{\text{ord}}^* &= \infty \\ c_{\text{sp}}^* &= 0 \\ c_{\text{ex}}^* &= -\infty \end{cases} . \quad (2.109)$$

Diese Fixpunkte korrespondieren zu dem gewöhnlichen, dem speziellen und dem außergewöhnlichen Übergang des halbumendlichen Modells. Für c_{ord}^* und c_{ex}^* ist c eine irrelevante Variable, da diese Fixpunkte attraktiv sind und alle Punkte auf der positiven c -Achse nach c_{ord}^* beziehungsweise alle auf der negativen Achse nach c_{ex}^* fließen. Anders ist dies beim repulsiven Fixpunkt c_{sp}^* , wo kleine Abweichungen von dem Fixpunkt zu einem Fluss weg von diesem führen und c somit eine relevante Größe ist.

Aus den vorausgehenden Überlegungen folgt, dass $f_{\text{res,ren}}(\bar{\mu}L, \bar{\tau}, \bar{u}, \bar{h}_b, \bar{c}_1, \bar{c}_2, \bar{h}_1, \bar{h}_2)$ die gewöhnliche lineare Differentialgleichung erster Ordnung

$$\left[\ell \frac{d}{d\ell} + (d - 1) \right] f_{\text{res,ren}}(\bar{\mu}L, \bar{\tau}, \bar{u}, \bar{h}_b, \bar{c}_1, \bar{c}_2, \bar{h}_1, \bar{h}_2) = 0 \quad (2.110)$$

erfüllt. Diese kann nun direkt gelöst werden. Aus der speziellen Wahl $\ell = 1/(\mu L)$, der *Bulk*-Korrelationslänge $\xi_\infty = \xi_0^+ \tau^{-\nu}$ sowie der Definition der Skalenvariablen

$$\mathbf{L} = E_\tau(u^*, u)^\nu \mu \xi_0^+ \frac{L}{\xi_\infty} = \tilde{E}_\tau(u^*, u) \frac{L}{\xi_\infty} \quad (2.111a)$$

$$h_b = E_{h_b}(u^*, u) h_b^{\text{ren}} (\mu L)^{\Delta/\nu} \quad (2.111b)$$

$$c_j = E_c(u^*, u) c_j (\mu L)^{\Phi/\nu}, \quad j = 1, 2 \quad (2.111c)$$

$$h_j = E_{h_1}(u^*, u) h_j^{\text{ren}} (\mu L)^{\Delta_1^{\text{sp}}/\nu}, \quad j = 1, 2 \quad (2.111d)$$

ergibt sich das asymptotische Verhalten für $L \rightarrow \infty$

$$f_{\text{res,ren}}(\mu L, \tau, u, h_b^{\text{ren}}, c_1, c_2, h_1^{\text{ren}}, h_2^{\text{ren}}) \underset{L \rightarrow \infty}{\approx} n(\mu L)^{-(d-1)} \Theta(\mathbf{L}, h_b, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, h_1, h_2) \quad (2.112)$$

mit¹¹

$$\Theta(\mathbf{L}, h_b, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, h_1, h_2) = \frac{1}{n} f_{\text{res,ren}}(1, \tau, u^*, h_b^{\text{ren}}, c_1, c_2, h_1^{\text{ren}}, h_2^{\text{ren}}). \quad (2.113)$$

Die Skalenfunktion Θ ist universell, da sie nicht vom Startwert $\bar{u}(1) = u$, sondern nur von der *Bulk*- und Oberflächenuniversalitätsklasse und den groben Eigenschaften der Wechselwirkung abhängig ist. Alle Nicht-Universalitäten stecken in den metrischen Faktoren \tilde{E}_τ , E_{h_b} , E_c und E_{h_1} . Für diese gilt zudem am Fixpunkt $E_\tau(u^*, u^*) = E_{h_b}(u^*, u^*) = E_c(u^*, u^*) = E_{h_1}(u^*, u^*) = 1$.

Für die konkreten Rechnungen werden noch die expliziten Ausdrücke für die kritischen Exponenten benötigt. Aus (2.107) erhält man

$$\nu = \frac{1}{2} + \frac{n+2}{n+8} \frac{\epsilon}{4} + O(\epsilon^2) \quad (2.114a)$$

$$\eta = O(\epsilon^2) \quad (2.114b)$$

$$\Phi = \frac{1}{2} - \frac{n+2}{n+8} \frac{\epsilon}{4} + O(\epsilon^2) \quad (2.114c)$$

$$\eta_{\parallel}^{\text{sp}} = -\frac{n+2}{n+8} \epsilon + O(\epsilon^2). \quad (2.114d)$$

Ziel dieses Teils der Arbeit ist die Bestimmung der ϵ -Entwicklung der Skalenfunktion $D(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) \equiv \Theta(0, 0, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, 0, 0)$ ohne symmetriebrechende Magnetfelder am kritischen Punkt. Dazu wurden in Abschnitt 2.2 zunächst die Ein- und Zweischleifenterme der freien Energie in dimensioneller Regularisierung berechnet. Zur Renormierung des Modells

¹¹Der triviale Faktor n der Ordnungsparameter-Dimensionalität wurde hier aus der Skalenfunktion herangezogen. Diese Definition der Skalenfunktion weicht von der in [12, 17] und in Teil 1 dieser Arbeit verwendeten ab, wo die Skalenfunktionen den Faktor n enthalten.

müssen dann die unrenormierten Parameter gemäß (2.77) und (2.86) reparametrisiert werden. Auf diese Weise erhält man eine renormierte Theorie, welche dann in ϵ entwickelt werden kann. Am Fixpunkt u^* kann das Ergebnis aufgrund der Eigenschaft des metrischen Faktors $E_c(u^*, u^*) = 1$ auf die Skalenvariablen c_1 und c_2 umgeschrieben werden. Die in den Ausdrücken vorkommenden Terme $\propto \log(\mu L)$ lassen sich zu den Skalenvariablen aufexponentieren. Dies soll im folgenden Abschnitt geschehen.

Aufgrund der verschiedenen Quellen von ϵ -Abhängigkeiten in Gleichung (2.113) (Fixpunktwert u^* , die kritischen Exponenten, die renormierten Größen τ , c_1 und c_2 sowie die renormierten Magnetfelder) muss erläutert werden, wie die ϵ -Entwicklung der Skalenfunktion Θ definiert ist. Die ϵ -Entwicklung wird gemäß

$$\begin{aligned} D(c_1, c_2) &= \frac{1}{n} f_{\text{res,ren}}(1, 0, 0, 0, c_1, c_2, 0, 0) \\ &\quad + \frac{1}{n} u^* \left. \frac{\partial f_{\text{res,ren}}}{\partial u} \right|_{u^*} (1, 0, u, 0, c_1, c_2, 0, 0) + O(u^{*2}) \\ &= D_0(c_1, c_2) + \epsilon D_1(c_1, c_2) + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (2.115)$$

berechnet. Voraussetzung dafür ist natürlich die Existenz der Werte bei $u^* = 0$.

Aus dem Zusammenhang zwischen dem *Finite-Size-Anteil* der freien Energie und der Casimir-Kraft \mathcal{F}_C ,

$$\beta \mathcal{F}_C = -\frac{\partial f_{\text{res}}}{\partial L} \quad (2.116)$$

folgt sofort, dass die Kraft am kritischen Punkt sich wie

$$\beta \mathcal{F}_C \underset{L \rightarrow \infty}{\approx} n L^{-d} \mathcal{D}(c_1, c_2) \quad (2.117)$$

verhält. Den Zusammenhang zwischen den Skalenfunktionen $\mathcal{D}(c_1, c_2)$ und $D(c_1, c_2)$ erhält man durch Ableiten. Es ergibt sich

$$\mathcal{D}(c_1, c_2) = \left[d - 1 + \frac{\Phi}{\nu} \left(c_1 \frac{\partial}{\partial c_1} + c_2 \frac{\partial}{\partial c_2} \right) \right] D(c_1, c_2). \quad (2.118)$$

2.3 Renormierter Finite-Size-Anteil der freien Energie und Skalenfunktionen

Die im Kapitel 2.2.1 erläuterte Vorgehensweise soll nun dazu verwendet werden, den in Abschnitt 2.2 hergeleiteten Ausdruck für die freie Energie des Films mit Robin-Randbedingungen am kritischen Punkt zunächst zu renormieren — das heißt, die Pole in ϵ

zu beseitigen — und anschließend auf die Skalenform (2.112) zu bringen. Im Rest dieses Teils der Arbeit wird der Einfachheit halber die Abhängigkeit der freien Energien von den Magnetfeldern unterdrückt. Es sei also $f_{\text{res,ren}}(\mu L, \tau, u, c_1, c_2) \equiv f_{\text{res,ren}}(\mu L, \tau, u, h_{\text{b}}^{\text{ren}} = 0, c_1, c_2, h_1^{\text{ren}} = 0, h_1^{\text{ren}} = 0)$. Zur Renormierung des *Finite-Size*-Anteils der freien Energie werden die unrenormierten Größen in den Ein- und Zweischleifentermen (2.58) und (2.68) gemäß Gleichungen (2.77) und (2.86) reparametrisiert. Man überzeugt sich leicht davon, dass sich die in Gleichung (2.68) vorhandenen einfachen Pole in ϵ gegen die durch die Reparametrisierung verursachten Pole im Einschleifenterm wegheben. Damit ist der *Finite-Size*-Anteil der freien Energie UV-endlich. Bis zur ersten Ordnung in der renormierten Kopplungskonstanten u ergibt sich aus den Ein- und Zweischleifentermen der Ausdruck

$$\begin{aligned} \frac{f_{\text{res,ren}}(\mu L, 0, u, c_1, c_2)}{n(\mu L)^{-(d-1)}} &= D_0(c_1\mu L, c_2\mu L) + \epsilon \left[\left(1 - \frac{\gamma_{\text{E}} - \log \pi}{2} \right) D_0(c_1\mu L, c_2\mu L) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dt h_{c_1\mu L, c_2\mu L}(t) t^2 \log t \right] \\ &\quad + u \left\{ \frac{n+2}{3} \sum_{j=1}^2 \left[-\frac{1}{2} + \log(2c_j) \right] c_j \partial_{c_j} D_0(c_1\mu L, c_2\mu L) \right. \\ &\quad \left. + \frac{n+2}{12\pi^2} \sum_{\sigma, \rho=0}^2 P_{c_1\mu L, c_2\mu L}^{(\sigma, \rho)} J_{c_1\mu L, c_2\mu L}^{(\sigma)} J_{c_1\mu L, c_2\mu L}^{(\rho)} \right\} + O(u^2), \quad (2.119) \end{aligned}$$

wobei bereits Terme der Ordnung $O(\epsilon u)$ vernachlässigt wurden, da diese am Fixpunkt $u^* \sim \epsilon$ Terme quadratisch in ϵ liefern würden. Dabei wurden die Funktionen

$$D_0(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2) \equiv \frac{1}{n} f_{\text{res}}^{[1]}(1, 0, \mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2) \Big|_{d=4} = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dt t^2 h_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(t), \quad (2.120)$$

$$h_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(t) = \log \left[1 - \frac{t - \mathcal{C}_1}{t + \mathcal{C}_1} \frac{t - \mathcal{C}_2}{t + \mathcal{C}_2} e^{-2t} \right] \quad (2.121)$$

und

$$J_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(\sigma)} \equiv -\frac{\pi}{2} Y_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(4, \sigma)} = \int_0^\infty dt \frac{(-1)^\sigma t^{1+2\sigma}}{(t + \mathcal{C}_1)^2 (t + \mathcal{C}_2)^2 e^{2t} - (t^2 - \mathcal{C}_1^2) (t^2 - \mathcal{C}_2^2)} \quad (2.122)$$

definiert.

Gleichung (2.119) hat noch nicht die im vorangegangenen Abschnitt vorhergesagte Skalenform (2.112). Insbesondere treten hier noch Terme der Form $\propto \log(\mu L)$ auf. Diese haben ihren Ursprung darin, dass der Polterm der Zweischleifenordnung zusammen mit dem Faktor L^ϵ und dem μ^ϵ aus der Reparametrisierung der Kopplungskonstanten die

Entwicklung

$$\frac{\dot{u}}{\epsilon} L^\epsilon = \frac{16\pi^2 u}{\epsilon} + 8\pi^2 u [2 \log(\mu L) + \gamma - 1 - \log(4\pi)] + O(\epsilon) \quad (2.123)$$

hat. Am Fixpunkt $u = u^* = \frac{3}{n+8}\epsilon + O(\epsilon^2)$ ergibt sich aus Gleichung (2.111c) wegen $E_c(u^*, u^*) = 1$ in erster Ordnung in ϵ der Zusammenhang

$$c_j = c_j \mu L - c_j \mu L \frac{n+2}{n+8} \log(\mu L) \epsilon + O(\epsilon^2), \quad (2.124)$$

was nach $c_j \mu L$ umgestellt werden kann. Setzt man den Ausdruck

$$c_j \mu L = c_j + c_j \frac{n+2}{n+8} \log(\mu L) \epsilon + O(\epsilon^2) \quad (2.125)$$

in Gleichung (2.119) für den renormierten *Finite-Size*-Anteil der freien Energie ein, so fallen die Terme $\propto \log(\mu L)$ weg und man erhält ein Ergebnis, welches im Einklang mit der von der Renormierungsgruppe vorhergesagten Skalenform ist. Es lautet

$$D(c_1, c_2) = D_0(c_1, c_2) + \epsilon D_1(c_1, c_2) + O(\epsilon^2) \quad (2.126)$$

mit

$$D_1(c_1, c_2) = \left(1 - \frac{\gamma_E - \log \pi}{2} \right) D_0(c_1, c_2) - \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dt h_{c_1, c_2}(t) t^2 \log t \\ + \frac{n+2}{n+8} \left\{ \sum_{j=1}^2 \left[-\frac{1}{2} + \log(2c_j) \right] c_j \partial_{c_j} D_0(c_1, c_2) + \frac{1}{4\pi^2} \sum_{\sigma, \rho=0}^2 P_{c_1, c_2}^{(\sigma, \rho)} J_{c_1, c_2}^{(\sigma)} J_{c_1, c_2}^{(\rho)} \right\}. \quad (2.127)$$

Die in [12, 17] betrachteten Spezialfälle erhält man daraus direkt durch Berechnung der entsprechenden Grenzwerte: Vertauscht man Integration und Grenzwertbildung, so lassen sich die in (2.126) auftretenden Integrale analytisch berechnen und man erhält

$$\Delta^{(o,o)}/n = \lim_{c \rightarrow \infty} D(c, c) = a_0 + a_1(n)\epsilon + O(\epsilon^2), \quad (2.128)$$

$$\Delta^{(o,sp)}/n = \Delta^{(sp,o)}/n = \lim_{c \rightarrow \infty} D(0, c) \\ = -\frac{7}{8}a_0 + \left[\frac{\pi^2}{1024} \left(\frac{n+2}{n+8} - \frac{4 \log 2}{45} \right) - \frac{7a_1(n)}{8} \right] \epsilon + O(\epsilon^2) \quad (2.129)$$

mit den Koeffizienten

$$a_0 = -\frac{\pi^2}{1440} \quad (2.130)$$

und

$$a_1(n) = \frac{\pi^2}{2880} \left[1 - \gamma_E - \log(4\pi) + \frac{2\zeta'(4)}{\zeta(4)} + \frac{5n+2}{2n+8} \right]. \quad (2.131)$$

Der Fall $\mathbf{c}_1 = \mathbf{c}_2 = 0$ spielt hier eine besondere Rolle. Offensichtlich wird hier nicht das aus [18, 19] bekannte Ergebnis reproduziert. In diesem taucht ein Term $\propto \epsilon^{3/2}$ auf. Es lautet

$$\Delta^{(\text{sp}, \text{sp})}/n = a_0 + a_1(n)\epsilon + a_{3/2}(n)\epsilon^{3/2} + o(\epsilon^{3/2}) \quad (2.132)$$

mit

$$a_{3/2}(n) = -\frac{\pi^2}{72\sqrt{6}} \left(\frac{n+2}{n+8} \right)^{3/2}. \quad (2.133)$$

Vielmehr erhält man auch hier den in [12, 17] berechneten — in diesem Grenzfall falschen — Ausdruck mit nur ganzzahligen Potenzen von ϵ

$$\lim_{\mathbf{c} \rightarrow 0} D(\mathbf{c}, \mathbf{c}) = \Delta^{(o, o)}/n + O(\epsilon^2). \quad (2.134)$$

Ursächlich für diese Diskrepanz ist die in der Herleitung der Schleifenentwicklung gemachte Annahme, dass $c_1 + c_2 > 0$. Nur durch diese Annahme ist auch die Positivität des kleinsten Eigenwertes $k_1^2 > 0$ des Operators $-\partial_z^2$ auf dem Intervall $[0, L]$ mit Robin-Randbedingungen gewährleistet. Für $c_1 = c_2 = 0$ wird jedoch $k_1^2 = 0$ und im freien Propagator taucht eine Nullmode auf. Dies verursacht den Zusammenbruch der gewöhnlichen Störungstheorie am *Bulk*-kritischen Punkt $T_{c, \infty}$ [18, 19, 116]. Einen Hinweis auf die Probleme, die im Limes $\mathbf{c}_1 = \mathbf{c}_2 \rightarrow 0$ auftreten, gibt schon die Analyse des Verhaltens der Skalenfunktion $D(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)$ für kleine Argumente. Während es für die Spezialfälle $(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) \rightarrow (\infty, \infty)$ und $(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) \rightarrow (\infty, 0)$ möglich ist, die Entwicklung der Skalenfunktion D in \mathbf{c}_j durch Vertauschen der Entwicklung und der Integrationen zu erhalten, scheitert dies im Fall $\mathbf{c}_1 = \mathbf{c}_2 = 0$, da das Integral im linearen Entwicklungskoeffizienten nicht konvergiert. Eine genauere Analyse ergibt das Verhalten der Skalenfunktion (2.126)

$$D(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) = [a_0 + o(\mathbf{c}_1^0, \mathbf{c}_2^0)] + \left\{ a_1(n) - \frac{3\pi}{144} \frac{n+2}{n+8} \sqrt{\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2} + O(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) \right\} \epsilon + O(\epsilon^2) \quad (2.135)$$

für kleine \mathbf{c}_j . Dieses Ergebnis erhält man durch Wiederholung der im Abschnitt 2.2 und in diesem Abschnitt durchgeführten Schritte — also Schleifenentwicklung, Renormierung und Umschreiben des Ergebnisses auf die Skalenform — unter Verwendung des asymptotischen Verhaltens (2.22) der Eigenwerte k_m anstelle der exakten Eigenwerte als Lösung

der transzendenten Gleichung (2.16). Statt der Summationsformeln aus Anhang A.1 wird dann bei der Rechnung nur die Definition der Riemannschen Zeta-Funktion benötigt. Der Wurzel-Term in (2.135) hat seinen Ursprung in dem Beitrag zum Zweischleifenterm $f_{\text{res}}^{[2]}$, bei dem die Modensumme \sum_{m_1, m_2} bei der einen Schleife auf $m_1 = 1$ beschränkt ist und bei der anderen Schleife über alle $m_2 > 1$ geht. Gleichung (2.135) zeigt, dass die Funktion $D(c_1, c_2)$ bei $c_1 = c_2 = 0$ nicht analytisch ist, da der Gradient hier divergiert. Diese IR-Divergenz ist jedoch unphysikalisch, da das System mit $c_1 = c_2 = 0$ für $L < \infty$ kein kritisches Verhalten und somit keine Singularitäten bei $T = T_{c, \infty}$ aufweisen sollte. Diese Nichtanalytizität ist damit ganz analog zu dem von Krech und Dietrich diskutierten Verhalten der Skalenfunktion der freien Energie mit (sp, sp)-Randbedingungen am *Bulk*-kritischen Punkt.

Damit erhält man im Zweischleifenterm bereits Anzeichen für Probleme der Schleifenentwicklung in Modellen mit einer Nullmode im Spektrum. Richtig manifest werden diese Probleme jedoch erst in Dreischleifenordnung [18, 19, 116]. Hier zeigt sich, dass diese Entwicklung nur für Systeme wohldefiniert ist, bei welchen keine Nullmode im Spektrum auftritt. Die Argumentation dafür soll im Folgenden kurz nachvollzogen werden.

Dazu wird der Beitrag eines bestimmten Dreischleifendiagramms analysiert. Entwickelt man die freie Energie bis zur zweiten Ordnung in \hat{u} und wertet die verschiedenen Kontraktionen aus, so erhält man zwei unterschiedliche Dreischleifendiagramme:

$$O(3 \text{ Schleifen}) = \text{Diagramm 1} + \text{Diagramm 2}. \quad (2.136)$$

Für die Argumentation ist das erste dieser zwei Diagramme von Bedeutung. Es beinhaltet drei Summationen über das Spektrum und drei Impulsintegrationen. Am *Bulk*-kritischen Punkt gilt

$$\text{Diagramm 1} \propto \sum_{m, m_1, m_2=1}^{\infty} \int_{\mathbf{p}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2}^{(d-1)} \frac{\Delta_{m_1, m_1, m, m}}{\mathbf{p}_1^2 + k_{m_1}^2} \frac{1}{(\mathbf{p}^2 + k_m^2)^2} \frac{\Delta_{m, m, m_2, m_2}}{\mathbf{p}_2^2 + k_{m_2}^2}. \quad (2.137)$$

Die Impulsintegrale können wieder problemlos mit den bei der Bestimmung des Zweischleifenterms benutzten Verfahren in hypersphärischen Koordinaten berechnet werden. Die daraus erhaltenen Summen über das Spektrum werden nun zerlegt in den Anteil der untersten Mode $m = 1$ und einen Rest $m = 2, 3, \dots, \infty$. Für den Beitrag zu dem Diagramm (2.137), bei dem im zentralen Teil $m = 1$ und in den beiden äußeren Teilen $m_j > 1$ ist, ergibt sich

$$\text{Diagramm 1} \propto k_1^{d-5} \left(\sum_{m=2}^{\infty} \Delta_{1,1,m,m} k_m^{d-3} \right)^2. \quad (2.138)$$

Die blau strichlierte Linie steht dabei für einen Propagator, bei dessen Berechnung die unterste Mode ausgenommen wird. Im Gegensatz dazu beschreibt die grüne Linie einen Propagator, bei dem *nur* die unterste Mode einbezogen wird. In der Nähe der oberen kritischen Dimension $d^* = 4$ divergiert dieser Anteil des Dreischleifenterms im Limes $\mathring{c}_1 \rightarrow 0$, $\mathring{c}_2 \rightarrow 0$, da damit auch $k_1 \rightarrow 0$ geht. Dieser Effekt tritt nur am kritischen Punkt $\mathring{r} = 0$ und erst in dieser Ordnung der Störungstheorie auf. Sowohl der Ein- als auch der Zweischleifen-term sind noch endlich. In [18] wurde gezeigt, wie dieses Problem am kritischen Punkt für Neumann-Neumann-Randbedingungen und periodische Randbedingungen gelöst werden kann. Die Auswirkung auf die Berechnung der Skalenfunktion wurde in [19] diskutiert. Im Folgenden soll das Ergebnis (2.126) mit den dort verwendeten Methoden so verbessert werden, dass sich für alle Spezialfälle (o, o), (o, sp) und (sp, sp) der richtige Grenzwert ergibt und die Skalenfunktion glatt zwischen diesen Fällen interpoliert.

2.4 Modifizierte renormierungsgruppenverbesserte Störungstheorie

Die im letzten Kapitel durchgeführte renormierungsgruppenverbesserte Störungstheorie für die Skalenfunktionen des *Finite-Size*-Anteils der freien Energie sowie der Casimir-Kraft weist erhebliche Mängel auf, wenn beide Oberflächenkopplungen c_j klein sind: Zwar ist die in Gleichung (2.126) definierte Skalenfunktion — wie gewünscht — für alle endlichen Werte der c_j eine glatte Funktion, jedoch enthält sie eine unphysikalische IR-Divergenz bei $c_1 = c_2 = 0$. Ursache für diese Divergenz ist, dass die Landau-Theorie für das *Bulk*-System und das System mit endlicher Filmdicke dieselbe kritische Temperatur vorausagt — $T_{c,\infty} = T_{c,L}$ — wenn der Propagator des endlichen Systems eine Nullmode enthält. Dies entspricht jedoch nicht der physikalischen Realität, da nach der Theorie des *Finite-Size-Scaling* $T_{c,\infty} > T_{c,L}$ sein muss. Zudem ist das Ergebnis (2.126) offenbar nicht in der Lage, den im Limes $c_1 = c_2 \rightarrow 0$ auftretenden $\epsilon^{3/2}$ -Term in der ϵ -Entwicklung zu reproduzieren. Damit ist der Grenzwert der Extrapolation zu $d = 3$ für gegebene Werte von n stark abweichend von der in [18] erhaltenen Extrapolation. Es ist jedoch äußerst wünschenswert, dass die Skalenfunktion für kleine c_j eine glatte Funktion bleibt und den korrekten Grenzwert aufweist. Einen Ausweg aus diesem Dilemma bietet die Anwendung der in [18, 19, 116] vorgeschlagenen Methode der Umordnung der Störungstheorie. So wie diese Methode in [19, 116] erfolgreich die unphysikalischen Nichtanalytizitäten der Skalenfunktion bei periodischen und (sp, sp)-Randbedingungen am *Bulk*-kritischen Punkt entfernt hat, kann sie hier dazu verwendet werden, das Auftreten der erwähnten

IR-Divergenzen bei $c_1 = c_2 \rightarrow 0$ zu verhindern. Dazu wird der problematische Anteil der niedrigsten Mode zum Ordnungsparameterfeld von dem Beitrag der übrigen Moden abgespalten. Ausintegration des Beitrags der höheren Moden liefert dann eine effektive Theorie für die niedrigste Mode. Wie sich herausstellt, ist diese effektive Theorie auch am *Bulk*-kritischen Punkt massiv. Somit treten an $T_{c,\infty}$ keine IR-Divergenzen auf und die Schleifenentwicklung der freien Energie bleibt auch in höheren Ordnungen wohldefiniert. Weiterhin erhält man so eine für alle c_j glatte Funktion mit dem korrekten Grenzwert $c_1 = c_2 \rightarrow 0$.

2.4.1 Effektive Nullmodentheorie

Der Strategie von [18,19,116] folgend, wird zur Umordnung der Störungstheorie das Ordnungsparameterfeld in zwei Anteile aufgespalten. Man schreibt also

$$\phi(\mathbf{y}, z) = \bar{\varphi}(\mathbf{y}, z) + \psi(\mathbf{y}, z). \quad (2.139)$$

Dabei bezeichnet der erste Summand den Beitrag der niedrigsten Mode zu $\phi(\mathbf{y}, z)$

$$\bar{\varphi}(\mathbf{y}, z) = L^{-1/2} \varphi(\mathbf{y}) v_1(z/L) \quad (2.140)$$

und der zweite Summand den Rest, also

$$\psi(\mathbf{y}, z) = L^{-1/2} \sum_{m=2}^{\infty} \phi^{(m)}(\mathbf{y}) v_m(z/L). \quad (2.141)$$

Dabei wurden die Entwicklungskoeffizienten

$$\phi^{(m)}(\mathbf{y}) = \int_0^1 d\zeta v_m(\zeta) \phi(\mathbf{y}, \zeta L) \quad (2.142)$$

und

$$\varphi(\mathbf{y}) \equiv \phi^{(1)}(\mathbf{y}) \quad (2.143)$$

definiert. Die Orthogonalität der Eigenfunktionen $v_m(\zeta)$ überträgt sich sofort auf die beiden Anteile des Ordnungsparameterfeldes. Damit sind $\bar{\varphi}(\mathbf{y}, z)$ und $\psi(\mathbf{y}, z)$ auch orthogonal und es gilt

$$\int d^d x \psi(\mathbf{y}, z) \cdot \bar{\varphi}(\mathbf{y}, z) = 0. \quad (2.144)$$

Es soll nun, analog zu den genannten Arbeiten, durch Ausintegration des ψ -Feldes ein effektiver *Hamiltonian* für das φ -Feld hergeleitet werden. Der Hauptunterschied zu den

Rechnungen für periodische oder Neumann-Neumann-Randbedingungen ist die Tatsache, dass die ($m = 1$)-Mode — solange $\dot{c}_1 + \dot{c}_2 > 0$ gilt — nicht z -unabhängig ist. Aus der Orthogonalität folgt damit nicht mehr das Verschwinden des Integrals

$$\int_0^L dz \psi(\mathbf{y}, z) \neq 0, \quad \dot{c}_1 + \dot{c}_2 > 0. \quad (2.145)$$

Vielmehr liefert dieses Integral weitere Kopplungsterme zwischen den Feldern ψ und φ . Einsetzen der Aufspaltung (2.139) in den *Hamiltonian* (2.5) liefert die Zerlegung

$$\mathcal{H}[\phi] = \mathcal{H}_\varphi[\varphi] + \mathcal{H}_\psi[\psi] + \mathcal{H}_{\text{int}}[\varphi, \psi] \quad (2.146)$$

in einen nur von der untersten Mode abhängigen Teil $\mathcal{H}_\varphi[\varphi]$, einen nur von ψ abhängigen Teil $\mathcal{H}_\psi[\psi]$ und einen Kopplungsanteil $\mathcal{H}_{\text{int}}[\varphi, \psi]$, der von φ und ψ abhängt. Eine einfache Rechnung zeigt, dass diese Teile als

$$\mathcal{H}_\varphi[\varphi] = \int d^{d-1}y \left[\frac{1}{2} \varphi(\mathbf{y}) (-\nabla_{\mathbf{y}}^2 + \dot{\tau} + k_1^2) \varphi(\mathbf{y}) + \frac{\dot{u}}{4!L} \Delta_{1,1,1,1} |\varphi(\mathbf{y})|^4 \right], \quad (2.147)$$

$$\mathcal{H}_\psi[\psi] = \int d^d x \left[\frac{1}{2} \psi(\mathbf{x}) (-\nabla_{\mathbf{x}}^2 + \dot{\tau}) \psi(\mathbf{x}) + \frac{\dot{u}}{4!} |\psi(\mathbf{x})|^4 \right] \quad (2.148)$$

und

$$\mathcal{H}_{\text{int}}[\varphi, \psi] = \frac{\dot{u}}{4!} \int d^d x \left[4(\bar{\varphi} \cdot \psi)^2 + 2\bar{\varphi}^2 \psi^2 + 4\bar{\varphi}^2 (\psi \cdot \bar{\varphi}) + 4\psi^2 (\bar{\varphi} \cdot \psi) \right], \quad (2.149)$$

geschrieben werden können. Die aus dem Gradiententerm folgenden Kopplungsterme verschwinden aufgrund der Orthogonalität (2.144), sodass in $\mathcal{H}_{\text{int}}[\varphi, \psi]$ keine Gradienten auftreten.

Um eine effektive Theorie für die niedrigste Mode zu erhalten, wird das ψ -Feld ausintegriert. Der *Hamiltonian* für das φ -Feld wird dann definiert als

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi] = -\log \text{Sp}_\psi e^{-\mathcal{H}[\phi]}, \quad (2.150)$$

wobei der nur von φ abhängige Term in $\mathcal{H}[\phi]$ direkt aus der Spur ausgeklammert werden kann. Definiert man zudem den Erwartungswert bezüglich des ψ -Feldes

$$\langle \dots \rangle_\psi = \frac{\text{Sp}_\psi (\dots e^{-\mathcal{H}_\psi[\psi]})}{\text{Sp}_\psi e^{-\mathcal{H}_\psi[\psi]}} \quad (2.151)$$

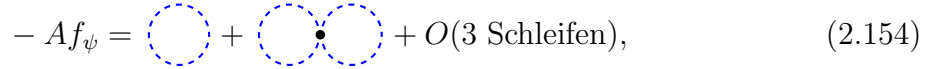
und die mit dem Feld ψ assoziierte freie Energie

$$Af_\psi = -\log \text{Sp}_\psi e^{-\mathcal{H}_\psi[\psi]}, \quad (2.152)$$

so lässt sich der *Hamiltonian* der effektiven Theorie umschreiben zu

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi] = Af_\psi + \mathcal{H}_\varphi[\varphi] - \log \langle e^{-\mathcal{H}_{\text{int}}[\varphi, \psi]} \rangle_\psi. \quad (2.153)$$

Der erste Beitrag in Gleichung (2.153) ist offenbar unabhängig von φ . Die Schleifenentwicklung dieses Terms kann direkt aus Abschnitt 2.2 übernommen werden. Dazu muss nur in den auftretenden Modensummen der kleinste Eigenwert ausgeschlossen werden. Die diagrammatische Entwicklung lautet damit

$$-Af_\psi = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + O(3 \text{ Schleifen}), \quad (2.154)$$


wobei die blau strichlierten Linien für den freien Propagator des ψ -Feldes

$$G_\psi(\mathbf{x}, \mathbf{x}'|L) = \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \sum_{m=2}^{\infty} \frac{\langle z|m \rangle \langle m|z' \rangle}{\mathbf{p}^2 + k_m^2 + \hat{\tau}} e^{-i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{y}')} \quad (2.155)$$

stehen. Der zweite Beitrag zu $\mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi]$ ergibt sich aus Gleichung (2.147) und beschreibt eine $(d-1)$ -dimensionale φ^4 -Theorie mit der Masse $\hat{\tau} + k_1^2$ und der Kopplungskonstanten $\hat{u}\Delta_{1,1,1,1}/L$. Der letzte Term in Gleichung (2.153) liefert Schleifenkorrekturen zu der Masse und der Kopplungskonstanten des *Hamiltonians* $\mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi]$. Diese können mit störungstheoretischen Methoden berechnet werden. Dazu entwickelt man besagten Term in Gleichung (2.153) in \hat{u} . Es ergibt sich:

$$\begin{aligned} -\log \langle e^{-\mathcal{H}_{\text{int}}[\varphi, \psi]} \rangle_\psi &= \frac{\hat{u}}{4!} \sum_{\alpha, \beta=1}^n \int d^d x \langle 4\bar{\varphi}_\alpha \bar{\varphi}_\beta \psi_\alpha \psi_\beta + 2\bar{\varphi}_\alpha \bar{\varphi}_\alpha \psi_\beta \psi_\beta + 4\bar{\varphi}_\alpha \bar{\varphi}_\alpha \bar{\varphi}_\beta \psi_\beta \\ &\quad + 4\bar{\varphi}_\alpha \psi_\alpha \psi_\beta \psi_\beta \rangle_\psi + O(\hat{u}^2). \end{aligned} \quad (2.156)$$

Durch eine Auswertung der möglichen Kontraktionen der ψ -Felder nach dem Wickschen Theorem ergibt sich die Schleifenentwicklung der Wechselwirkungsbeiträge von $\mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi]$. Der Erwartungswert des dritten und vierten Summanden verschwindet in der ungeordneten Phase, da hier ungerade Anzahlen von ψ -Feldern auftauchen. Erst in höherer Ordnung in \hat{u} liefern diese Terme Beiträge. Durch Einsetzen von $\bar{\varphi}$ gemäß Gleichung (2.140) lassen

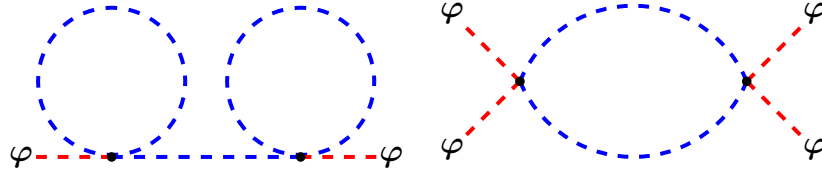


Abbildung 2.1: Nichtlokale Schleifenbeiträge zu Zweipunkt- und Vierpunktvertices von $\mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi]$.

sich die Beiträge der ersten zwei Terme berechnen. Man erhält somit

$$\begin{aligned} -\log \langle e^{-\mathcal{H}_{\text{int}}[\varphi, \psi]} \rangle_{\psi} &= \frac{1}{2} \delta \dot{\tau}_L \int d^{d-1} y \varphi^2(\mathbf{y}) + O(\dot{u}^2) \\ &= - \text{Diagramm} + O(\dot{u}^2) \end{aligned} \quad (2.157)$$

mit

$$\delta \dot{\tau}_L(\dot{c}_1, \dot{c}_2) = \frac{n+2}{3} \frac{\dot{u}}{2L^{d-2}} \sum_{m=2}^{\infty} \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \frac{\Delta_{1,1,m,m}(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2)}{\mathbf{p}^2 + \kappa_m^2}. \quad (2.158)$$

Damit wird aus Gleichung (2.153) für den effektiven *Hamiltonian* des φ -Feldes in linearer Ordnung in \dot{u}

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi] &= Af_{\psi} + \int d^{d-1} y \left\{ \frac{1}{2} \varphi \left[-\nabla_{\mathbf{y}}^2 + k_1^2 + \dot{\tau} + \delta \dot{\tau}_L(\dot{c}_1, \dot{c}_2) \right] \varphi \right. \\ &\quad \left. + \frac{\dot{u}}{4!L} \Delta_{1,1,1,1}(\dot{c}_1 L, \dot{c}_2 L) |\varphi|^4 + O(\dot{u}^2) \right\}. \end{aligned} \quad (2.159)$$

Er beschreibt also eine $(d-1)$ -dimensionale translationsinvariante Theorie bei einer um $k_1^2 + \delta \dot{\tau}_L(\dot{c}_1, \dot{c}_2)$ verschobenen Temperatur mit der Kopplungskonstanten $\dot{u} \Delta_{1,1,1,1}/L$. Aufgrund der Verschiebung der Temperatur und der Tatsache, dass $\delta \dot{\tau}_L(0,0) > 0$ ist, treten die erwähnten Divergenzen in dem Dreischleifendiagramm an der *Bulk*-kritischen Temperatur nicht auf. Die Schleifenentwicklung der freien Energie ist somit wieder wohldefiniert. In höheren Ordnungen von \dot{u} treten in $\mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi]$ offensichtlich nichtlokale Zweipunktvertices und $2s$ -Punktvertices mit $s \geq 2$ auf. Beispiele dafür sind in Abbildung 2.1 dargestellt.

Ausgehend von Gleichung (2.159) kann nun unter Zuhilfenahme des mit dem Feld φ assoziierten freien Propagators $(\mathbf{p}^2 + \kappa_1^2 + \dot{\tau} + \delta \dot{\tau}_L)^{-1}$ die Entwicklung der freien Energie in Feynman-Diagrammen formuliert werden. Sie lautet

$$Af = -\log \text{Sp}_{\varphi} e^{-\mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi]}. \quad (2.160)$$

In der diagrammatischen Schreibweise ergibt sich somit die Zerlegung der freien Energie in einen von ψ und einen von φ kommenden Anteil

$$f(L, \hat{\tau}, \hat{u}, \hat{c}_1, \hat{c}_2) = f_\psi(L, \hat{\tau}, \hat{u}, \hat{c}_1, \hat{c}_2) + f_\varphi(L, \hat{\tau}, \hat{u}, \hat{c}_1, \hat{c}_2) \quad (2.161)$$

mit den Schleifenentwicklungen

$$\begin{aligned} f_\psi(L, \hat{\tau}, \hat{u}, \hat{c}_1, \hat{c}_2) &= f_\psi^{[1]}(L, \hat{\tau}, \hat{c}_1, \hat{c}_2) + f_\psi^{[2]}(L, \hat{\tau}, \hat{u}, \hat{c}_1, \hat{c}_2) + O(3 \text{ Schleifen}) \\ &= -\frac{1}{A} \text{---} \text{---} \text{---} - \frac{1}{A} \text{---} \text{---} \text{---} + O(3 \text{ Schleifen}) \end{aligned} \quad (2.162)$$

und

$$\begin{aligned} f_\varphi(L, \hat{\tau}, \hat{u}, \hat{c}_1, \hat{c}_2) &= f_\varphi^{[1]}(L, \hat{\tau}, \hat{u}, \hat{c}_1, \hat{c}_2) + f_\varphi^{[2]}(L, \hat{\tau}, \hat{u}, \hat{c}_1, \hat{c}_2) + O(3 \text{ Schleifen}) \\ &= -\frac{1}{A} \text{---} \text{---} - \frac{1}{A} \text{---} \text{---} + O(3 \text{ Schleifen}), \end{aligned} \quad (2.163)$$

wobei mit den roten Linien der freie Propagator des $(d-1)$ -dimensionalen *Bulk*-Systems bei der Temperatur $\hat{\tau} + k_1^2 + \delta\hat{\tau}_L(\hat{c}_1, \hat{c}_2)$ bezeichnet sei. Die roten Punkte stehen für die Kopplungskonstante $\hat{u}\Delta_{1,1,1,1}/L$.

Die explizite Form von $f_\psi^{[1]}(L, 0, \hat{c}_1, \hat{c}_2)$ und $f_\psi^{[2]}(L, 0, \hat{u}, \hat{c}_1, \hat{c}_2)$ kann direkt aus den Gleichungen (2.46) und (2.47) für die Entwicklungsterme der gewöhnlichen Schleifenentwicklung abgelesen werden. Man erhält sie durch Einschränkung der in (2.46) und (2.47) auftretenden Summen über das Spektrum auf den Bereich $m \geq 2$. Die Beiträge des φ -Feldes zur freien Energie sind noch einfacher zu berechnen, da sie einer translationsinvarianten Theorie entsprechen und somit nur die Impulsintegrale bestimmt werden müssen. Zudem enthalten sie weder *Bulk*- noch Oberflächenterme. Für den Einschleifenterm ergibt sich am kritischen Punkt

$$f_{\varphi,\text{res}}^{[1]}(L, 0, \hat{u}, \hat{c}_1, \hat{c}_2) = -n \frac{A_{d-1}}{d-1} [k_1^2 + \delta\hat{\tau}_L(\hat{c}_1, \hat{c}_2)]^{(d-1)/2}. \quad (2.164)$$

Ebenso lässt sich der Zweischleifenterm auswerten. Man erhält

$$f_{\varphi,\text{res}}^{[2]}(L, 0, \hat{u}, \hat{c}_1, \hat{c}_2) = \Delta_{1,1,1,1}(\hat{c}_1 L, \hat{c}_2 L) \frac{\hat{u}}{L} \frac{n(n+2)}{4!} A_{d-1}^2 [k_1^2 + \delta\hat{\tau}_L(\hat{c}_1, \hat{c}_2)]^{d-3}. \quad (2.165)$$

Auch diese Entwicklung der freien Energie, ebenso wie die Entwicklungen der Korrelationsfunktionen, hat vorerst nur eine formale Bedeutung, da die hier auftretenden Ausdrücke UV-divergent sind. Es muss also eine Methode zur Regularisierung eingeführt

werden, welche erst nach der Renormierung des Modells entfernt werden darf. Die Berechnung dieser Diagramme und die anschließende Renormierung soll im nächsten Abschnitt durchgeführt werden. Dabei kann erheblich von den Ergebnissen der in Kapitel 2.2 durchgeführten gewöhnlichen Schleifenentwicklung profitiert werden. Auf diese Weise wird der renormierte *Finite-Size*-Anteil der freien Energie am *Bulk*-kritischen Punkt berechnet. Das Ergebnis wiederum wird durch Einführung der Skalenvariablen c_1 und c_2 auf die von der Renormierungsgruppe vorhergesagte Skalenform gebracht und so die Skalenfunktion der Casimir-Amplitude $D(c_1, c_2)$ und der Casimir-Kraft $\mathcal{D}(c_1, c_2)$ bestimmt. Aus diesen Ergebnissen folgen dann alle zuvor genannten Entwicklungen der Casimir-Amplitude als Grenzfälle. Dies sind die Entwicklung der Skalenfunktion $D(c_1, c_2)$ für den Fall $c_1 + c_2 > 0$ nach Gleichung (2.126) sowie die der Amplituden $\Delta^{(o,o)}$ und $\Delta^{(sp,o)}$ nach Gleichungen (2.128) und (2.129). Zusätzlich erhält man aber auch die ϵ -Entwicklung für $\Delta^{(sp,sp)}$ nach Gleichung (2.132) mitsamt dem $\epsilon^{3/2}$ -Term, da sich die hier genutzte Umordnung der Störungstheorie im Limes $c_1 = c_2 = \tau \rightarrow 0$ auf die in [18, 19] genutzte reduziert.

2.4.2 Berechnung der Beiträge des ψ -Feldes

Zunächst sollen die Beiträge des ψ -Feldes zur freien Energie bestimmt werden. Die Rechnungen werden wieder in dimensioneller Regularisierung durchgeführt. Der Einschleifen-term $f_\psi^{[1]}(L, \dot{\tau}, \dot{c}_1, \dot{c}_2)$ lautet am kritischen Punkt

$$f_\psi^{[1]}(L, 0, \dot{c}_1, \dot{c}_2) = \frac{n}{2} \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \sum_{m=2}^{\infty} \log \left(\frac{\mathbf{p}^2 + k_m^2}{2\pi} \right). \quad (2.166)$$

Wird der ($m = 1$)-Term addiert und subtrahiert, so lässt sich auf Gleichung (2.58) für den Einschleifen-term $f^{[1]}(L, 0, \dot{u}, \dot{c}_1, \dot{c}_2)$ zurückgreifen. Zieht man die Oberflächenterme (2.65) ab, so ergibt sich für den *Finite-Size*-Anteil der mit dem ψ -Feld assoziierten freien Energie in Einschleifenordnung

$$\frac{L^{d-1}}{n} f_{\psi, \text{res}}^{[1]}(L, 0, \dot{c}_1, \dot{c}_2) = \frac{L^{d-1}}{n} f_{\text{res}}^{[1]}(L, 0, \dot{c}_1, \dot{c}_2) + \frac{A_{d-1}}{d-1} \kappa_1^{d-1}. \quad (2.167)$$

Zur Berechnung des Zweischleifendiagramms des ψ -Feldes wird abermals der Beitrag der untersten Mode addiert und subtrahiert, damit das Ergebnis für $f^{[2]}(L, 0, \dot{u}, \dot{c}_1, \dot{c}_2)$ ausgenutzt werden kann. In der diagrammatischen Schreibweise gilt

$$\text{Diagramm} = \text{Diagramm} - \text{Diagramm} + \text{Diagramm}, \quad (2.168)$$

wobei die schwarzen Linien für den gewöhnlichen freien Propagator des Films stehen, die grünen Linien für den Anteil der untersten Mode und die blau strichlierten Linien für den Anteil der übrigen Moden. Ausgedrückt in Formeln bedeutet Gleichung (2.168)

$$\begin{aligned}
 & f_{\psi}^{[2]}(L, 0, \dot{u}, \dot{c}_1, \dot{c}_2) \\
 &= L^{-(d-1)} L^{\epsilon} n(n+2) \frac{\dot{u}}{4!} A_{d-1}^2 \sum_{m_1, m_2=2}^{\infty} \Delta_{m_1, m_1, m_2, m_2} \kappa_{m_1}^{d-3} \kappa_{m_2}^{d-3} \\
 &= L^{-(d-1)} L^{\epsilon} n(n+2) \frac{\dot{u}}{4!} A_{d-1}^2 \left(-2 \sum_{m=1}^{\infty} \Delta_{1,1,m,m} \kappa_1^{d-3} \kappa_m^{d-3} + \Delta_{1,1,1,1} \kappa_1^{2(d-3)} \right) \\
 &+ f^{[2]}(L, 0, \dot{u}, \dot{c}_1, \dot{c}_2), \tag{2.169}
 \end{aligned}$$

wobei die auftretenden Impulsintegrale bereits mit Gleichung (2.54) berechnet wurden und $f^{[2]}(L, 0, \dot{u}, \dot{c}_1, \dot{c}_2)$ in den Gleichungen (2.60) und (2.61) angegeben ist. Die Vertexbeiträge $\Delta_{1,1,m,m}(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2)$ erhält man aus der Definition (2.48) und die verbleibende Summe in Gleichung (2.169) kann mit der Summationsformel (A.23) berechnet werden. Man erhält

$$\sum_{m=1}^{\infty} \Delta_{1,1,m,m} \kappa_m^{d-3} = \frac{1}{4} \sum_{\sigma, \rho=0}^2 \frac{\lambda_1 \kappa_1^{2\sigma}}{(\mathcal{C}_1^2 + \kappa_1^2)(\mathcal{C}_2^2 + \kappa_1^2)} P_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(\sigma, \rho)} \left(X_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(d, \rho)} + Y_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(d, \rho)} \right) + \frac{\lambda_1}{4} \kappa_1^{d-3}. \tag{2.170}$$

Eine Dimensionsanalyse der Terme in der großen Klammer von Gleichung (2.169) zeigt, dass in diesen keine *Bulk*- und Oberflächenbeiträge enthalten sind. Diese Beiträge stecken vollständig in $f^{[2]}(L, 0, \dot{u}, \dot{c}_1, \dot{c}_2)$ und sind in den Gleichungen (2.65) und (2.66) angegeben. Damit bleibt für den Zweischleifenbeitrag des *Finite-Size*-Anteils der freien Energie

$$\begin{aligned}
 & \frac{L^{d-1}}{n} f_{\psi, \text{res}}^{[2]}(L, 0, \dot{u}, \dot{c}_1, \dot{c}_2) \\
 &= \frac{L^{d-1}}{n} f_{\text{res}}^{[2]}(L, 0, \dot{u}, \dot{c}_1, \dot{c}_2) + L^{\epsilon} \frac{n+2}{2} \frac{\dot{u}}{4!} A_{d-1}^2 \left[2\Delta_{1,1,1,1} \kappa_1^{2(d-3)} \right. \\
 &\quad \left. - \sum_{\sigma, \rho=0}^2 \frac{\lambda_1 \kappa_1^{2\sigma+d-3}}{(\mathcal{C}_1^2 + \kappa_1^2)(\mathcal{C}_2^2 + \kappa_1^2)} P_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(\sigma, \rho)} \left(X_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(d, \rho)} + Y_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(d, \rho)} \right) - \lambda_1 \kappa_1^{2(d-3)} \right]. \tag{2.171}
 \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck enthält offenbar — verursacht durch die Funktionen $X_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(d,1)}$ und $X_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(d,2)}$ — zusätzlich zu den in $f_{\text{res}}^{[2]}(L, 0, \dot{u}, \dot{c}_1, \dot{c}_2)$ auftretenden Singularitäten (siehe Gleichung (2.69))

einfache Pole in vier Dimensionen. Sie lauten:

$$\begin{aligned} & \frac{L^{d-1}}{n} \left[f_{\psi, \text{res}}^{[2]}(L, 0, \dot{u}, \dot{c}_1, \dot{c}_2) - f_{\text{res}}^{[2]}(L, 0, \dot{u}, \dot{c}_1, \dot{c}_2) \right] \\ &= -\frac{n+2}{24\pi} \frac{u}{\epsilon} \lambda_1 \frac{(\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2) \kappa_1^3 (\mathcal{C}_1 \mathcal{C}_2 + \kappa_1^2)}{(\mathcal{C}_1^2 + \kappa_1^2)(\mathcal{C}_2^2 + \kappa_1^2)} + O(\epsilon^0). \end{aligned} \quad (2.172)$$

Man überzeugt sich leicht davon, dass die in $f_{\psi, \text{res}}^{[2]}$ auftretenden Polterme wieder durch die Reparametrisierungen (2.77) und (2.86) absorbiert werden können. Der Mechanismus dabei ist klar: In Abschnitt 2.3 wurde bereits gezeigt, dass die genannten Reparametrisierungen in $f_{\text{res}}^{[1]}$ die Pole in $f_{\text{res}}^{[2]}$ wegheben können. Es bleibt also nur noch zu zeigen, dass dies auch für $f_{\psi, \text{res}} - f_{\text{res}}$ gilt. Dies ist tatsächlich der Fall, wie eine einfache Rechnung zeigt. Dazu schreibt man zunächst

$$\begin{aligned} \kappa_1^{d-1}(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2) &= \kappa_1^{d-1}(L\mu Z_c c_1, L\mu Z_c c_2) \\ &= \kappa_1^{d-1} + (d-1) \frac{n+2}{3\epsilon} \kappa_1^{d-2} \sum_{j=1}^2 L\mu c_j \frac{\partial \kappa_1(L\mu c_1, L\mu c_2)}{\partial (L\mu c_j)} + O(u^2). \end{aligned} \quad (2.173)$$

In dem durch die Reparametrisierung der Oberflächenkopplungen im Einschleifenterm $f_{\psi, \text{res}}^{[1]} - f_{\text{res}}^{[1]}$ verursachten Polterm tauchen also noch die Ableitungen von κ_1 nach den Oberflächenkopplungen $L\mu c_j$ auf. Obwohl die explizite Form von κ_1 nicht bekannt ist, können die Ableitungen berechnet werden. Dazu wird der Satz von der impliziten Funktion verwendet. $\kappa_1(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2)$ ist eine Lösung der Gleichung $R_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa) = 0$, somit gilt für die Ableitung

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^2 \mathcal{C}_j \frac{\partial \kappa_1(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2)}{\partial \mathcal{C}_j} &= - \sum_{j=1}^2 \mathcal{C}_j \left. \frac{\partial R_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa) / \partial \mathcal{C}_j}{\partial R_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa) / \partial \kappa} \right|_{\kappa=\kappa_1} \\ &= \frac{(\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2) \kappa_1 \cos \kappa_1 + 2\mathcal{C}_1 \mathcal{C}_2 \sin \kappa_1}{(2 + \mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2) \kappa_1 \sin \kappa_1 - (\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2 + \mathcal{C}_1 \mathcal{C}_2 - \kappa_1^2) \cos \kappa_1} \\ &= \frac{\lambda_1 (\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2) \kappa_1 (\mathcal{C}_1 \mathcal{C}_2 + \kappa_1^2)}{2(\mathcal{C}_1^2 + \kappa_1^2)(\mathcal{C}_2^2 + \kappa_1^2)}, \end{aligned} \quad (2.174)$$

wobei für die Umformung der zweiten in die dritte Zeile die Identität $R_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa_1) = 0$ verwendet wurde, um die trigonometrischen Funktionen zu eliminieren. Fasst man die Gleichungen (2.173), (2.174) und (2.167) zusammen und entwickelt anschließend in ϵ , so erkennt man, dass die Polterme des Ein- und Zweischleifenterms von $f_{\psi, \text{res}, \text{ren}}$ tatsächlich gegeneinander wegheben. Somit erhält man ein UV-endliches Ergebnis für $f_{\psi, \text{res}, \text{ren}}$. Setzt man zudem $u = u^*$ und führt die Skalenvariablen c_1 und c_2 ein, so erhält man die Skalen-

funktion des Anteils des ψ -Feldes an der Funktion D

$$\begin{aligned} \frac{f_{\psi,\text{res,ren}}(\mu L, 0, u^*, c_1, c_2)}{n(\mu L)^{-(d-1)}} &\equiv D_\psi(c_1, c_2) \\ &= D_{\psi,0}(c_1, c_2) + \epsilon D_{\psi,1}(c_1, c_2) + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (2.175)$$

mit

$$D_{\psi,0}(c_1, c_2) = \frac{\kappa_1^3}{12\pi} + D_0(c_1, c_2) \quad (2.176)$$

und

$$\begin{aligned} D_{\psi,1}(c_1, c_2) &= D_1(c_1, c_2) + \frac{1}{72\pi} \kappa_1^3 \left[8 - 3\gamma_E - 3 \log \left(\frac{\kappa_1^2}{\pi} \right) \right] \\ &\quad + \frac{\lambda_1 \kappa_1^2}{8\pi} \frac{n+2}{n+8} \left[\sum_{\sigma,\rho=0}^2 \frac{\kappa_1^{2\sigma-1} P_{c_1,c_2}^{(\sigma,\rho)} J_{c_1,c_2}^{(\rho)}}{(\kappa_1^2 + \kappa_1^2)(\kappa_2^2 + \kappa_1^2)} + \kappa_1 \sum_{j=1}^2 \frac{c_j \log c_j}{c_j^2 + \kappa_1^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\pi}{\lambda_1} \Delta_{1,1,1,1}(c_1, c_2) - \frac{\pi}{2} - \frac{1 - \log 4}{2} \kappa_1 \frac{(c_1 + c_2)(c_1 c_2 + \kappa_1^2)}{(\kappa_1^2 + \kappa_1^2)(\kappa_2^2 + \kappa_1^2)} \right]. \end{aligned} \quad (2.177)$$

In Abbildung 2.2 ist der Beitrag der niedrigsten Mode zur ϵ -Entwicklung der Skalenfunktion $D(c_1, c_2)$ für $n = \epsilon = 1$ in linearer Ordnung in ϵ grafisch dargestellt. Diesen erhält man aus der Differenz der Skalenfunktion $D(c_1, c_2)$ nach Gleichung (2.126) und der Skalenfunktion $D_\psi(c_1, c_2)$ nach Gleichung (2.175). Er verschwindet, wenn sich die Skalenvariablen (c_1, c_2) dem Ursprung $c_1 = c_2 = 0$ nähern, und hat ein Minimum bei dem Fixpunkt $c_1 = c_2 \rightarrow \infty$, also bei Dirichlet-Randbedingungen auf beiden Oberflächen \mathfrak{B}_1 und \mathfrak{B}_2 .

2.4.3 Berechnung der Beiträge des φ -Feldes

Es bleibt die Berechnung des Beitrags des φ -Feldes zur Skalenfunktion der Casimir-Amplitude am kritischen Punkt. Die Formeln für die Ein- und Zweischleifenterme $f_\varphi^{[1]}$ und $f_\varphi^{[2]}$ sind in den Gleichungen (2.164) und (2.165) angegeben. Der hier auftretende Ausdruck $k_1^2 + \delta\hat{\tau}_L(\hat{c}_1, \hat{c}_2)$ kann als Fourier-Transformation $\hat{\gamma}_{\text{ren}}^{(2)}(\mathbf{p} = \mathbf{0}, L, \tau, u, c_1, c_2, \mu)$ der Zweipunktvertexfunktion

$$\gamma^{(2)}(\mathbf{y} - \mathbf{y}') \delta_{\alpha\beta} \equiv \left. \frac{\delta^2 \mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi]}{\delta\varphi_\alpha(\mathbf{y}) \delta\varphi_\beta(\mathbf{y}')} \right|_{\varphi=0} \quad (2.178)$$

der effektiven Theorie $\mathcal{H}_{\text{eff}}[\phi]$ verstanden werden. Zunächst soll eine Renormierungsgruppenanalyse dieser Größe durchgeführt und anschließend die zugehörige Skalenfunktion

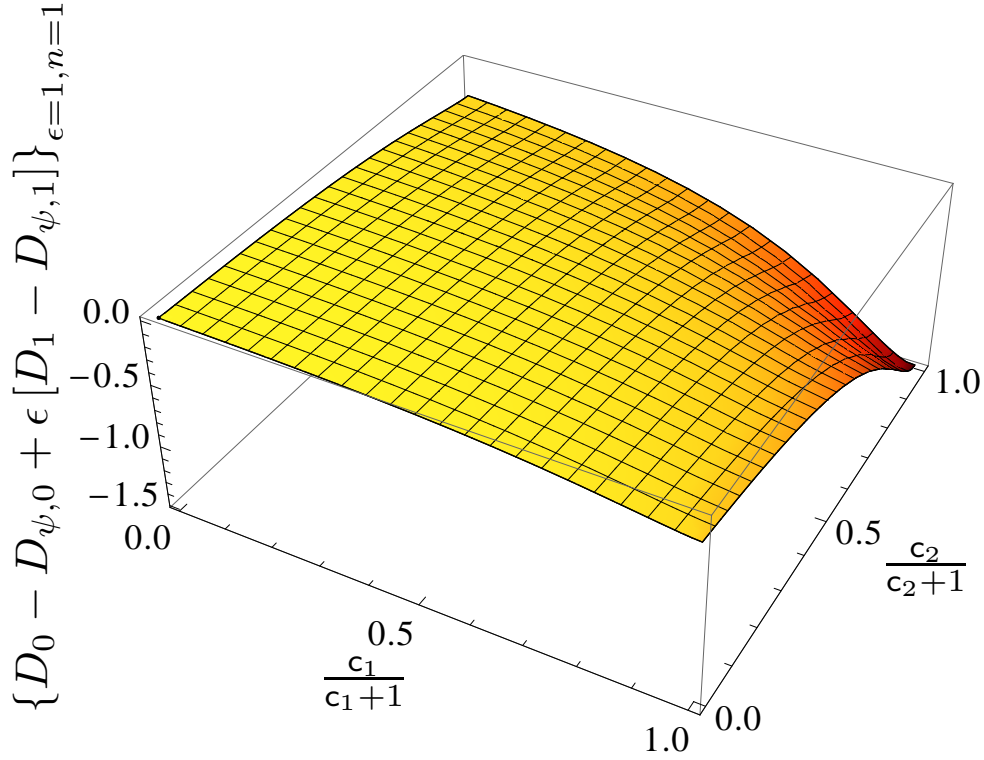


Abbildung 2.2: Beitrag der niedrigsten Mode zur ϵ -Entwicklung der Skalenfunktion $D(c_1, c_2)$ für $n = \epsilon = 1$. Um das gesamte Intervall $(0, \infty)$ der Skalenvariablen c_j abzudecken, wird entlang der Achsen $c_j/(c_j + 1)$ aufgetragen.

$\Omega(c_1, c_2)$ bestimmt werden. $\hat{\gamma}_{\text{ren}}^{(2)}(\mathbf{p}, L, \tau, u, c_1, c_2, \mu)$ erfüllt die Renormierungsgruppengleichung

$$(\mathcal{D}_\mu - \eta)\hat{\gamma}_{\text{ren}}^{(2)}(\mathbf{p}, L, \tau, u, c_1, c_2, \mu) = 0. \quad (2.179)$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung erfolgt analog zu der Rechnung für die freie Energie in Abschnitt 2.2.2 mit der Methode der Charakteristiken und liefert

$$\hat{\gamma}_{\text{ren}}^{(2)}(\mathbf{p} = \mathbf{0}, L, \tau = 0, u, c_1, c_2, \mu) \underset{L \rightarrow \infty}{\approx} \mu^\eta [E_{h_b}(u^*, u)]^2 L^{-2+\eta} \Omega(c_1, c_2) \quad (2.180)$$

mit dem in Gleichung (2.108b) definierten, nicht-universellen metrischen Faktor E_{h_b} , welcher am Fixpunkt $u = u^*$ gleich Eins ist, und der Skalenfunktion $\Omega(c_1, c_2)$, deren ϵ -Entwicklung bis zur linearen Ordnung nun bestimmt werden soll. Dazu setzt man die in der Zweipunktvertexfunktion auftretende Temperaturverschiebung $\delta\tau_L(\dot{c}_1, \dot{c}_2)$ gemäß Gleichung (2.158) ein und erhält als Näherung für $\hat{\gamma}_{\text{ren}}^{(2)}(\mathbf{p} = \mathbf{0}, L, 0, u, c_1, c_2, \mu)$

$$L^2 (k_1^2 + \delta\tau_L) = \kappa_1^2 + \frac{n+2}{3} \frac{\dot{u}}{2} L^\epsilon \sum_{m=2}^{\infty} \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \frac{\Delta_{1,1,m,m}}{\mathbf{p}^2 + \kappa_m^2}, \quad (2.181)$$

wobei der Eigenwert κ_1 und die Vertexbeiträge $\Delta_{1,1,m,m}$ Funktionen der nackten Oberflächenkopplungen \mathcal{C}_1 und \mathcal{C}_2 sind. Berechnung des Impulsintegrals mit Hilfe von Gleichung (2.54) und anschließendes Ausführen der Summe nach Gleichung (2.170) liefert den Ausdruck

$$\begin{aligned}
 L^2 (k_1^2 + \delta\tau_L) &= \kappa_1^2 + \frac{n+2}{3} \frac{\dot{u}}{2} L^\epsilon \sum_{m=2}^{\infty} \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \frac{\Delta_{1,1,m,m}(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2)}{\mathbf{p}^2 + \kappa_m^2} \\
 &= \kappa_1^2 - \frac{n+2}{3} \frac{\dot{u}}{2} L^\epsilon A_{d-1} \left[\frac{1}{4} \sum_{\sigma, \rho=0}^2 \frac{\lambda_1 \kappa_1^{2\sigma}}{(\mathcal{C}_1^2 + \kappa_1^2)(\mathcal{C}_2^2 + \kappa_1^2)} P_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(\sigma, \rho)} \left(X_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(d, \rho)} + Y_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{(d, \rho)} \right) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\lambda_1}{4} \kappa_1^{d-3} - \Delta_{1,1,1,1} \kappa_1^{d-3} \right], \tag{2.182}
 \end{aligned}$$

in dem wieder bei $d = 4$ divergierende Anteile stecken. Sie lauten

$$L^2 [k_1^2 + \delta\tau_L(\dot{c}_1, \dot{c}_2)] = -\frac{n+2}{3\epsilon} u \lambda_1 \frac{(\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2) \kappa_1^2 (\mathcal{C}_1 \mathcal{C}_2 + \kappa_1^2)}{(\mathcal{C}_1^2 + \kappa_1^2)(\mathcal{C}_2^2 + \kappa_1^2)} + O(\epsilon^0) \tag{2.183}$$

und können, völlig analog zu der Rechnung im vorangegangenen Abschnitt, durch den Übergang zu den renormierten Größen absorbiert werden. Schreibt man das Ergebnis am Fixpunkt $u = u^*$ auf die Skalenvariablen \mathbf{c}_1 und \mathbf{c}_2 um, so erhält man die ϵ -Entwicklung der Skalenfunktion $\Omega(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)$

$$\begin{aligned}
 \Omega(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) &= \kappa_1^2 + \epsilon \lambda_1 \kappa_1 \frac{n+2}{n+8} \left[\sum_{\sigma, \rho=1}^2 \frac{\kappa_1^{2\sigma-1} P_{\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2}^{(\sigma, \rho)} J_{\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2}^{(\rho)}}{(\mathbf{c}_1^2 + \kappa_1^2)(\mathbf{c}_2^2 + \kappa_1^2)} + \kappa_1 \sum_{j=1}^2 \frac{\mathbf{c}_j \log \mathbf{c}_j}{\mathbf{c}_j^2 + \kappa_1^2} - \frac{\pi}{2} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{2\pi}{\lambda_1} \Delta_{1,1,1,1}(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) - (1 - \log 4) \kappa_1 \frac{(\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2)(\mathbf{c}_1 \mathbf{c}_2 + \kappa_1^2)}{2(\mathbf{c}_1^2 + \kappa_1^2)(\mathbf{c}_2^2 + \kappa_1^2)} \right] + O(\epsilon^2), \tag{2.184}
 \end{aligned}$$

wobei κ_1 den kleinsten Eigenwert $\kappa_1(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)$ und λ_1 den Normierungsfaktor $\lambda_1(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)$ bezeichnen. Abbildung 2.3 zeigt diese Funktion für $n = \epsilon = 1$.

Die Funktion $\Omega(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)$ kann für die Spezialfälle mit $\mathbf{c}_j \in \{0, \infty\}$ in geschlossener Form angegeben werden, da hier die Eigenwerte κ_m analytisch bekannt sind. Ebenso kann der lineare Term der Entwicklung für kleine $\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2$ bestimmt werden. Man erhält die Ergebnisse

$$\lim_{\mathbf{c} \rightarrow \infty} \Omega(\mathbf{c}, \mathbf{c}) = \pi^2 + \epsilon \frac{13\pi^2}{6} \frac{n+2}{n+8} + O(\epsilon^2), \tag{2.185}$$

$$\lim_{\mathbf{c} \rightarrow \infty} \Omega(\mathbf{c}, 0) = \lim_{\mathbf{c} \rightarrow \infty} \Omega(0, \mathbf{c}) = \frac{\pi^2}{4} + \epsilon \frac{11\pi^2}{12} \frac{n+2}{n+8} + O(\epsilon^2), \tag{2.186}$$

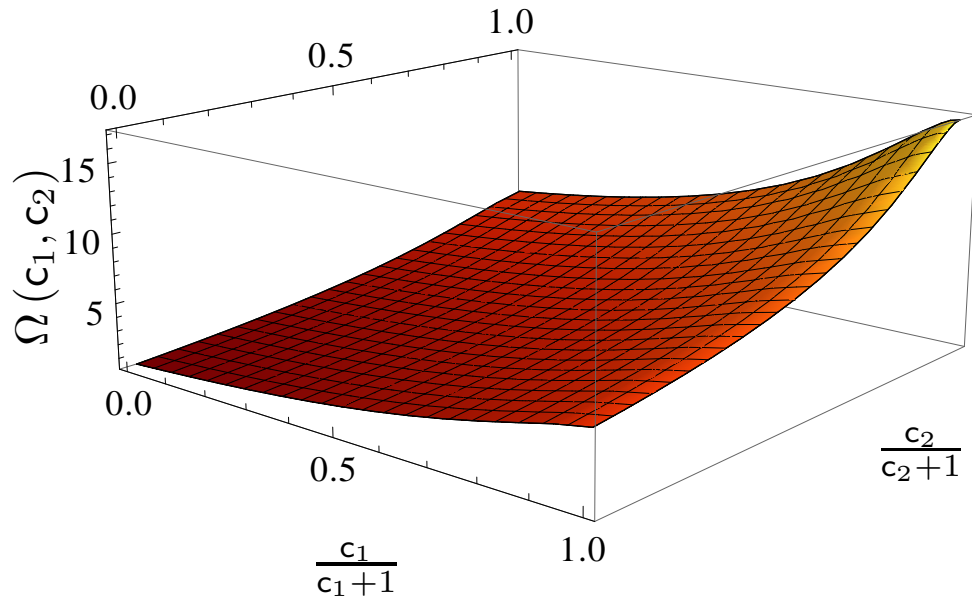


Abbildung 2.3: Die Skalenfunktion $\Omega(c_1, c_2)$ für $d = 3$ und $n = 1$, erhalten aus der Extrapolation des $O(\epsilon)$ -Ergebnisses (2.184) zu $\epsilon = 1$.

sowie

$$\begin{aligned} \Omega(c_1, c_2) &= c_1 + c_2 + O(c_1^2, c_2^2, c_1 c_2) \\ &+ \epsilon \frac{n+2}{n+8} \left\{ \frac{\pi^2}{6} + (c_1 + c_2) \left[\frac{3}{2} - \gamma_E + \log(2\pi) \right] + O(c_1^2, c_2^2, c_1 c_2) \right\} + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (2.187)$$

Der erste Term auf der rechten Seite hat seinen Ursprung im Verhalten des kleinsten Eigenwertes κ_1 für kleine c_j (siehe Gleichungen (2.22)). Die übrigen Terme repräsentieren die Entwicklung der Temperaturverschiebung $\delta\hat{\tau}_L$ für kleine c_j :

$$\delta\hat{\tau}_L(\hat{c}_1, \hat{c}_2) = \delta\hat{\tau}_L^{\text{SP}} + (\hat{c}_1 + \hat{c}_2) \delta\hat{\tau}_L^{\prime, \text{SP}} + O(\hat{c}_1^2, \hat{c}_2^2, \hat{c}_1 \hat{c}_2). \quad (2.188)$$

Der niedrigste Term kann leicht aus Gleichung (2.158) gewonnen werden. Das Ergebnis ist im Einklang mit dem in Gleichung (14) von Referenz [18] angegebenen und lautet:

$$\delta\hat{\tau}_L^{\circ, \text{SP}} \equiv \delta\hat{\tau}_L^{\circ}(0, 0) = \frac{n+2}{3} \frac{\hat{u} N_d}{L^{d-2}} \frac{\Gamma(d/2) \zeta(d-2)}{\Gamma(3-d/2)}. \quad (2.189)$$

Genauso kann die lineare Korrektur $\delta\hat{\tau}_L^{\prime, \text{SP}}$ bestimmt werden. Setzt man das asymptotische Verhalten für kleine c_j von den Eigenwerten κ_m und den Vertexbeiträgen $\Delta_{1,1,m,m}$ in

Gleichung (2.158) ein, so erhält man¹²

$$\delta\tau_L^{\text{sp}} = \frac{n+2}{3} \frac{\dot{u}N_d}{L^{d-3}} \frac{(d-2)(2d-7)\Gamma(3/2-d/2)}{4\pi^{9/2-d}\Gamma(3-d/2)} \zeta(5-d). \quad (2.190)$$

Gleichungen (2.188)–(2.190) sind in Übereinstimmung mit der Entwicklung (2.187), wie man durch Renormierung, ϵ -Entwicklung von (2.188)–(2.190) und Einführung der Skalenvariablen \mathbf{c}_j erkennt. Setzt man nun die Skalenform (2.184) in die Gleichungen (2.164) und (2.165) für $f_\varphi^{[1]}$ und $f_\varphi^{[2]}$ ein, so lässt sich die Skalenfunktion des vom φ -Feld kommenden Anteils zum *Finite-Size*-Anteil der freien Energie am kritischen Punkt angeben. Man erhält

$$\begin{aligned} \frac{f_{\varphi,\text{ren}}(\mu L, 0, u^*, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)}{n(\mu L)^{-(d-1)}} &\equiv D_\varphi(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) \\ &= -\frac{A_{d-1}}{d-1} [\Omega(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)]^{(d-1)/2} + \Delta_{1,1,1,1}(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) \frac{u^*}{N_d} \frac{n+2}{4!} A_{d-1}^2 [\Omega(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)]^{d-3} + \dots, \end{aligned} \quad (2.191)$$

wobei die Auslassungspunkte für Beiträge stehen, die von der Ordnung $O(u^*\epsilon, \epsilon^2)$ sind, solange $\Omega(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) = O(\epsilon^0)$ erfüllt ist. Nach Gleichung (2.187) ist dies immer dann gewährleistet, wenn $\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2 > 0$ gilt. Genau dann hat die Funktion $D_\varphi(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)$ eine ϵ -Entwicklung mit ganzzahligen Potenzen von ϵ . Sie lautet:

$$\begin{aligned} D_\varphi(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) &= -\frac{\kappa_1^3}{12\pi} + \epsilon \left[\frac{\kappa_1^3}{72\pi} \left(3\gamma_E - 8 + 3 \log \frac{\kappa_1^2}{\pi} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{n+2}{n+8} \frac{\kappa_1^2}{8} \Delta_{1,1,1,1} - \frac{\kappa_1 \Omega'_0}{8\pi} \right] + O(\epsilon^2), \quad \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2 > 0 \end{aligned} \quad (2.192)$$

mit dem Koeffizienten $\Omega'_0 \equiv \partial\Omega(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)/\partial\epsilon|_{\epsilon=1}$ des $O(\epsilon)$ -Terms von Gleichung (2.184).

Ist die Bedingung $\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2 > 0$ nicht erfüllt, so treten in der Entwicklung offenbar nicht-ganzzahlige Potenzen von ϵ auf. Man erhält die Entwicklung

$$D_\varphi(0, 0) = a_{3/2}(n) \epsilon^{3/2} + o(\epsilon^{3/2}), \quad (2.193)$$

mit dem in Gleichung (2.133) angegebenen Koeffizienten $a_{3/2}(n)$. Die gesamte Skalenfunktion

$$D(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) = D_\psi(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) + D_\varphi(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) \quad (2.194)$$

¹²Diese Rechnung wurde in Anhang D von [20] explizit durchgeführt. Alternativ kann man das Ergebnis auch erhalten, wenn man Entwicklung und Integration in Gleichung (2.182) vertauscht.

hat also sowohl im Fall $c_1 = c_2 = 0$ als auch im Fall $c_1 + c_2 > 0$ die gewünschte ϵ -Entwicklung nach Gleichung (2.132) beziehungsweise (2.126). Trotzdem ist bei der Interpretation dieses Ergebnisses Vorsicht geboten: Es eignet sich noch nicht zur direkten Berechnung von $D(c_1, c_2)$ in drei Dimensionen. Ursächlich dafür ist der in $D_\varphi(c_1, c_2)$ auftretende Koeffizient A_{d-1} , der in drei Dimensionen wie $A_{d-1} = [2\pi(d-3)]^{-1} + O(1)$ divergiert. Damit ist D_φ für $\epsilon < 1$ UV-endlich, für $\epsilon = 1$ jedoch nicht. Die Möglichkeiten zur Extrapolation von Gleichung (2.194) werden im folgenden Abschnitt näher erläutert.

2.5 Extrapolation zu $d = 3$ und Diskussion der Ergebnisse

Lässt man zunächst die bei kleinen $c_1 + c_2$ auftretenden Probleme außer Acht und konzentriert sich auf den Fall $c_1 + c_2 > 0$, so erhält man die einfachste Extrapolation der Skalenfunktion $D(c_1, c_2)$, indem man $\epsilon = 1$ setzt. Abbildung 2.4 zeigt einen *Contourplot* von $D(c_1, c_2)$ als Funktion der Variablen $c_j/(c_j + 1)$ für $n = \epsilon = 1$. Ein 3d-Plot ist in Abbildung 2.5 dargestellt. Die Funktion $D(c_1, c_2)$ ist negativ in der Umgebung der Hauptdiagonalen und ändert ihr Vorzeichen bei den fett eingezeichneten Kurven. Aus dieser Funktion folgt die Skalenfunktion $\mathcal{D}(c_1, c_2)$ gemäß Gleichung (2.118). Diese Funktion ist in Abbildung 2.6 als *Contourplot* und in Abbildung 2.7 als 3d-Plot, ebenfalls für $n = 1$, dargestellt. Um diese Plots zu erhalten, wurde in Gleichung (2.118) der extrapolierte Ausdruck $[D_0 + D_1]$ für D eingesetzt. Für den Vorfaktor $d - 1 + \Phi/\nu$ wurde dabei der Wert 2.718 verwendet. Dieser basiert auf der von Hasenbusch angegebenen, mit Monte-Carlo-Simulationen bestimmten Abschätzung $\Phi/\nu = 0.718(2)$ [117].¹³ Das Verhalten der beiden Skalenfunktionen ist qualitativ gleich. Auch die Kraft ist in der Nähe der Hauptdiagonalen negativ und somit attraktiv. Dies ist im Einklang mit dem von Bachas bewiesenen Theorem, dass reflektionspositive Systeme immer attraktive Casimir-Kräfte aufweisen [14]. In dem *Contourplot* der Casimir-Kraft sind zusätzlich die Linien, die bei konstanten (c_1, c_2) und variierender Filmdicke L durchlaufen werden, als blaue Kurven eingezeichnet.¹⁴ Anhand dieser Kurven erkennt man, dass für Wahlen des Wertepaares (c_1, c_2) genügend weit entfernt von der Hauptdiagonalen die Casimir-Kraft als Funktion der Filmdicke zweimal ihr Vorzeichen ändert: Für kleine Werte von L verlaufen die Kurven im attraktiven Be-

¹³Ein etwas anderer Wert als $\Phi/\nu \simeq 0.718(2)$ würde die Funktion \mathcal{D} nur quantitativ, nicht aber qualitativ beeinflussen.

¹⁴Die Form dieser Kurven folgt daraus, dass die Funktion \mathcal{D} nicht als Funktion von c_j , sondern von $c_j/(c_j + 1)$ dargestellt wurde. Bei einer einfachen linearen Auftragung wären diese Kurven Geraden durch den Ursprung.

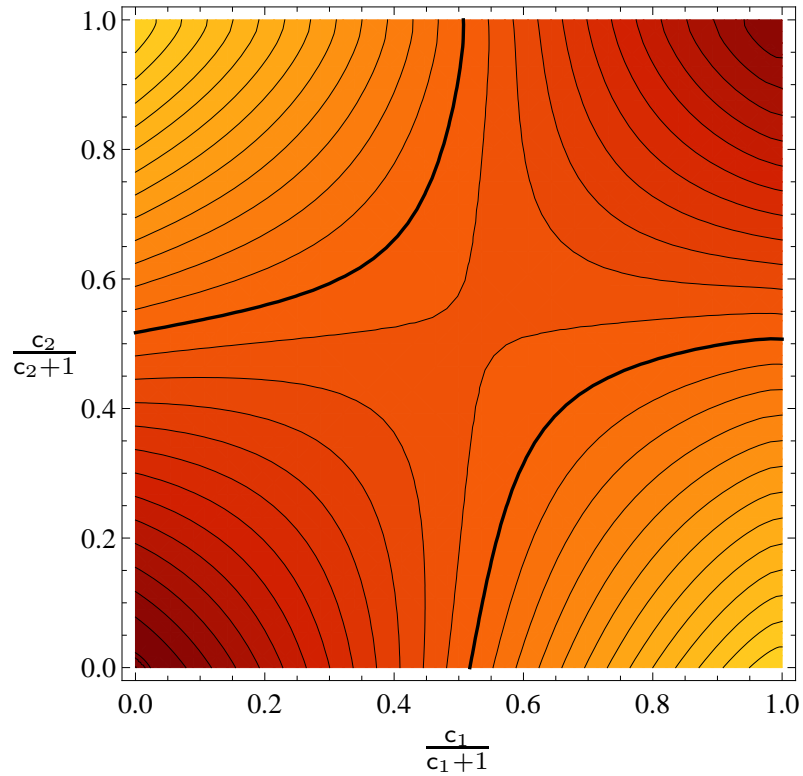


Abbildung 2.4: *Contourplot* der Skalenfunktion $D(c_1, c_2)$ des *Finite-Size*-Anteils der freien Energie als Funktion der Variablen $c_j/(c_j + 1)$ für $n = \epsilon = 1$.

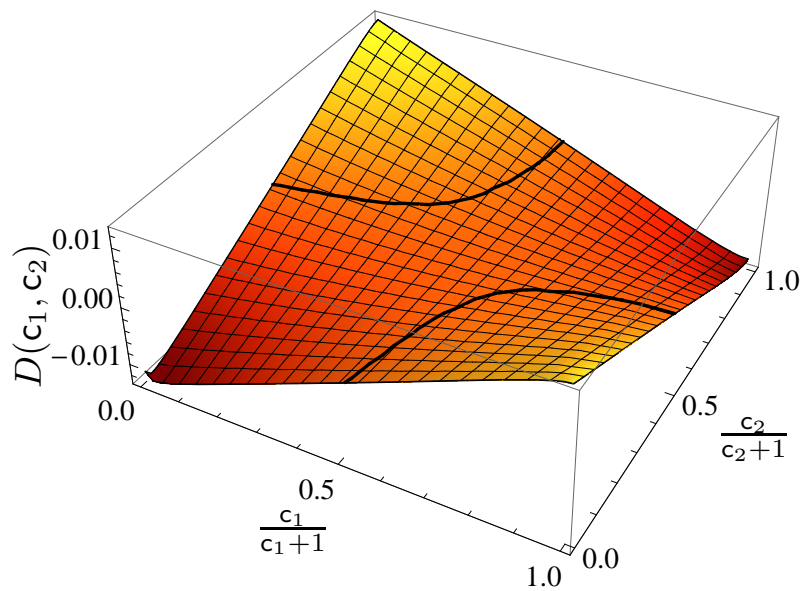


Abbildung 2.5: 3d-Plot der Skalenfunktion $D(c_1, c_2)$ für $n = \epsilon = 1$.

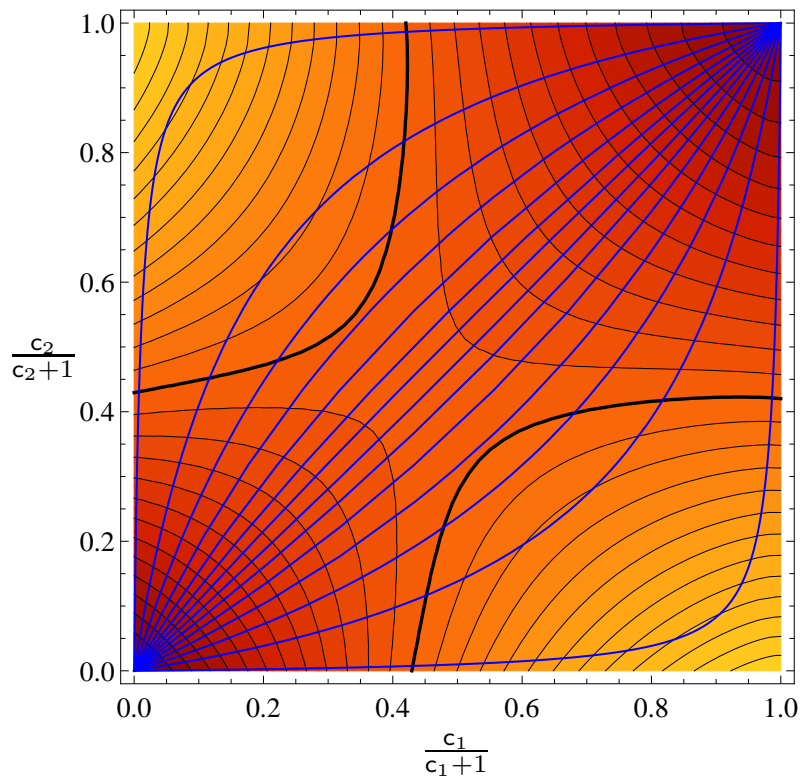


Abbildung 2.6: *Contourplot* der Skalenfunktion $\mathcal{D}(c_1, c_2)$ der Kraft für $n = 1$.

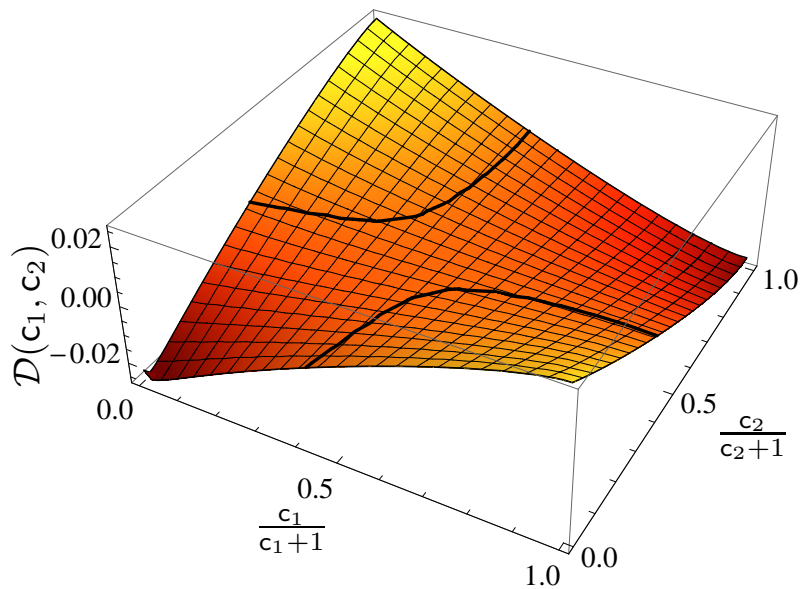


Abbildung 2.7: 3d-Plot der Skalenfunktion $\mathcal{D}(c_1, c_2)$ für $n = 1$.

reich der Skalenfunktion. Bei einem kritischen Wert $L_1(c_1, c_2)$ wird die fett eingezeichnete Linie überschritten und die Kraft wird negativ. Wird die Filmdicke weiter erhöht, so ergibt sich ab einem zweiten kritischen Wert $L_2(c_1, c_2)$ wieder eine attraktive Kraft. Für $L \rightarrow \infty$ konvergieren die Kräfte dann gegen den Dirichlet-Wert. Für gewisse Wertepaare (c_1, c_2) gibt es also zwei kritische Filmdicken, an denen die Casimir-Kraft verschwindet und ein glatter *Crossover* zwischen Attraktivität und Repulsivität auftritt. Während sich bei L_1 offenbar ein instabiles Gleichgewicht zwischen den Platten ergibt, wird dieses bei L_2 stabil. Aus den Plots erhält man die Bedingungen $c_1/c_2 \gtrsim 2.36$ oder $c_2/c_1 \gtrsim 2.36$ für das Auftreten dieses *Crossovers*.

Die erläuterten Ergebnisse zeigen deutlich, dass das übliche Bild von Casimir-Kräften und ihrer Attraktivität zu einfach ist. Es wird häufig gesagt, dass für ein gegebenes System der Dimension d die Casimir-Kraft — und somit auch das Vorzeichen dieser — von den Randbedingungen \wp auf den Platten abhängt und am *Bulk*-kritischen Punkt mit einem Potenzgesetz wie L^{-d} verschwindet. Der zugehörige Vorfaktor wird charakterisiert durch die universelle, aber von den Randbedingungen abhängige Casimir-Amplitude $\Delta_C^{(\wp)}$. Die kritische Casimir-Kraft wird dann geschrieben als:

$$\beta\mathcal{F}_C \approx -\frac{\partial}{\partial L}\Delta_C^{(\wp)}L^{-(d-1)} = (d-1)\Delta_C^{(\wp)}L^{-d}. \quad (2.195)$$

Die hier präsentierten Ergebnisse zeigen aber, dass dieses einfache Bild nur an den Fixpunkten $c_j = c_j^* \in \{-\infty, c_{\text{sp}}, +\infty\}$ gilt. Randbedingungen, die mit von diesen Werten abweichenden Oberflächenkopplungen c_j beschrieben werden, sind vielmehr *skalenabhängige Eigenschaften* des Systems: Für feste Werte (c_1, c_2) sind — abhängig von der Filmdicke L — sowohl attraktive als auch repulsive Kräfte möglich. Abbildung 2.8 zeigt zwei Beispiele für diese Übergänge zwischen Attraktivität und Repulsivität. Dort ist die Skalenfunktion $\mathcal{D}(c_1L^{\Phi/\nu}, c_2L^{\Phi/\nu})$ für feste Werte $(c_1, c_2) = (0, 1/2)$ (strichlierte Linie) und $(c_1, c_2) = (1, 5)$ (durchgezogene Linie) als Funktion von L dargestellt. Für $(c_1, c_2) = (0, 1/2)$ ist bei kleinen Werten der Filmdicke $c_1 \simeq c_2$ und die Kraft attraktiv. Übersteigt L jedoch einen kritischen Wert, so ist die Symmetrie stark genug gebrochen und die Wechselwirkung wird repulsiv. Ähnlich verhält sich die Kraft für $(c_1, c_2) = (1, 5)$. Hier gibt es jedoch eine zweite kritische Filmdicke, ab der die Kraft zwischen den Platten wieder attraktiv wird.

Die Tatsache, dass die universelle Zahl $\Delta_C^{(\wp)}$ für allgemeine Werte von c_j durch eine universelle Skalenfunktion $D(c_1, c_2)$ ersetzt wird, führt somit auch dazu, dass es Abweichungen von dem an den Fixpunkten c_j^* gültigen Potenzgesetz gibt. Die Casimir-Kraft verschwindet also nicht mehr mit einer Potenz L^{-d} , obwohl sich das System am *Bulk*-kritischen

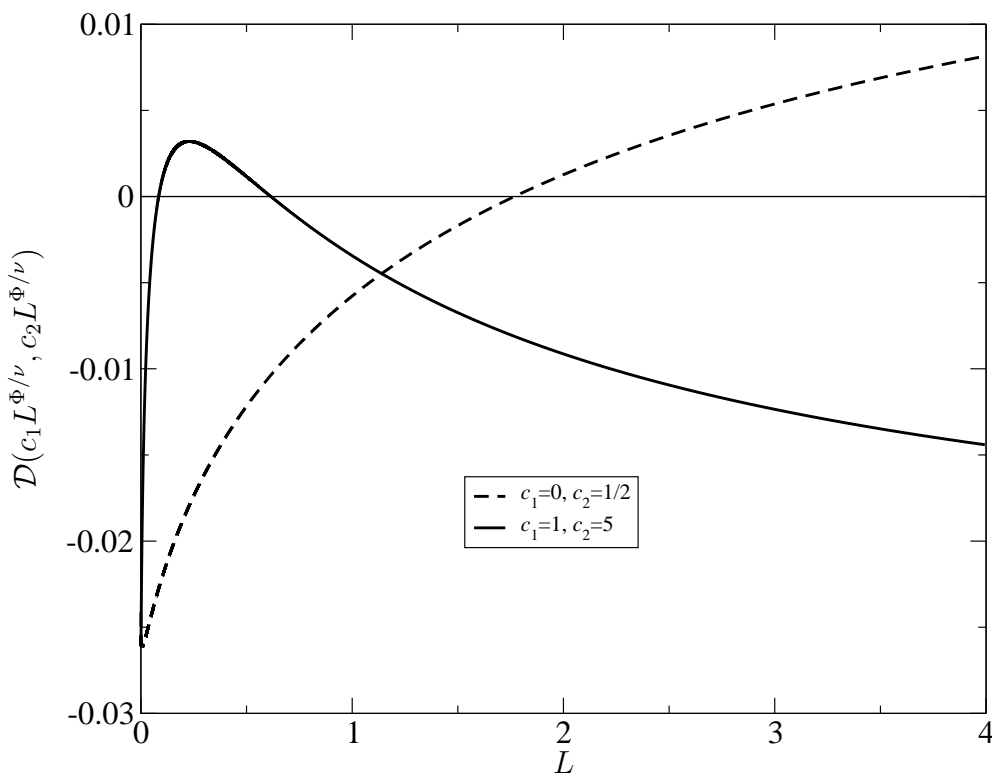


Abbildung 2.8: Beispiele für Übergänge zwischen attraktivem und repulsivem Verhalten der Skalenfunktion $\mathcal{D}(c_1 L^{\Phi/\nu}, c_2 L^{\Phi/\nu})$ der Casimir-Kraft.

Punkt befindet.

Ein ähnlicher *Crossover* tritt auch im Fall $\hat{c}_1 = 0$ auf. Aus dem näherungsweisen Zusammenhang zwischen den Kopplungskonstanten J und $J_1^{(1)}$ des Spin-Gittermodells und der Oberflächenkopplung $\hat{c}_1 = 0$ (siehe Gleichung (1.16)) ergibt sich, dass in drei Dimensionen aus $\hat{c}_1 = 0$ das Verhältnis $J_1^{(1)}/J \simeq 5/4$ folgt. Dieser Wert ist aber kleiner als der zu c_{sp} gehörende Wert. Dieser wurde in [118, 119] mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen zu $J_1^{(1)}/J = 1.5004(20)$ bestimmt. Dies bedeutet, dass aus der auf mesoskopischen Skalen geltenden Neumann-Randbedingung auf großen Längenskalen eine Dirichlet-Randbedingung wird. Abhängig von der Oberflächenkopplung der zweiten Oberfläche können hier dementsprechend auch Änderungen des Vorzeichens der Casimir-Kraft auftreten.

In den bisher vorgenommenen Extrapolationen wurde $c_1 + c_2 > 0$ angenommen, um das Auftreten einer Nullmode im Spektrum und somit das Problem der nicht-ganzzahligen Potenzen von ϵ in der ϵ -Entwicklung zu vermeiden. Wie bereits in Abschnitt 2.3 diskutiert, hat die so gewonnene Extrapolation unphysikalische Nichtanalytizitäten bei $c_1 = c_2 = 0$. Nach Gleichung (2.135) gilt nämlich

$$[D_0 + D_1]_{n=1}(\mathbf{c}, \mathbf{c}) = -0.0116593\dots - 0.0308534\dots\sqrt{\mathbf{c}} + O(\mathbf{c}), \quad (2.196)$$

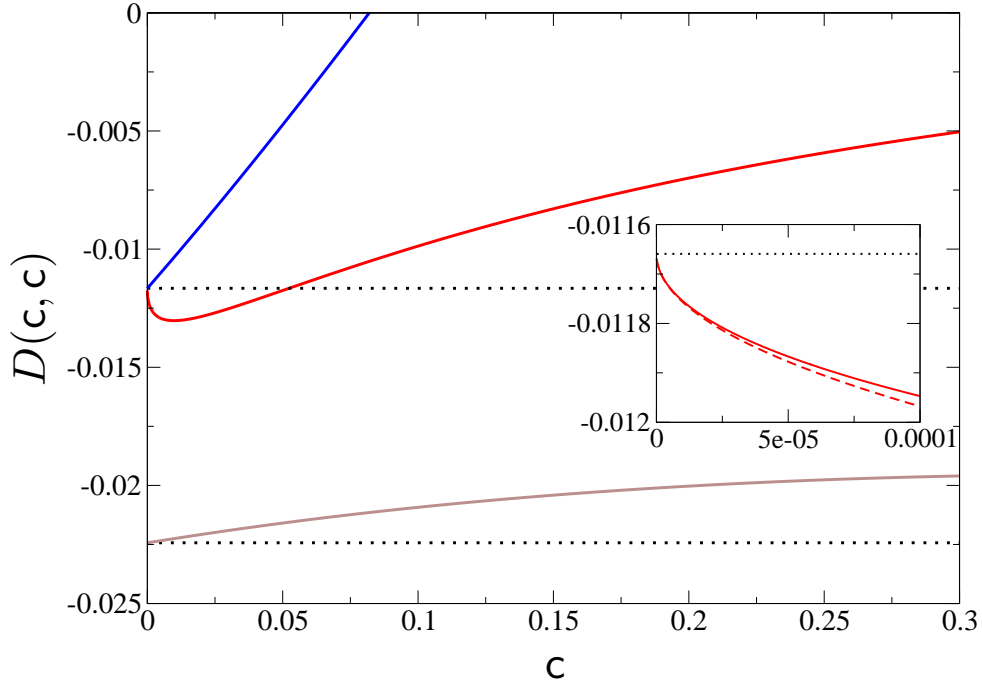


Abbildung 2.9: Verhalten der Extrapolation der Skalenfunktion $D(c, c)$ für kleine c : Die rote durchgezogene Linie zeigt die naive Extrapolation $[D_0 + D_1]_{n=1}$ mit der Singularität bei $c = 0$. In der Ausschnittsvergrößerung ist zusätzlich als rot strichlierte Linie das asymptotische Verhalten nach Gleichung (2.196) dargestellt. Die blaue Linie zeigt $D_\psi|_{n=\epsilon=1}$ und ist regulär bei $c = 1$. Die braune Kurve stellt die Extrapolation nach Gleichung (2.197) dar.

was bedeutet, dass die Ableitung $\partial/\partial c$ bei $c = 0$ divergiert. Diese IR-Singularität ist jedoch unphysikalisch, da man nicht erwartet, dass das System bei $T - T_{c,\infty} = c_1 = c_2 = 0$ und $L < \infty$ kritisches Verhalten aufweist. In der in Abbildung 2.9 eingefügten Ausschnittsvergrößerung ist das asymptotische Verhalten (Gleichung (2.196), rot strichlierte Kurve) zusammen mit der Extrapolation der Skalenfunktion $[D_0 + D_1]_{n=1}(c, c)$ (rote durchgezogene Kurve) dargestellt. Dass der Term $\propto \sqrt{c}$ tatsächlich von der kleinsten Mode herrührt, kann anhand der blauen Kurve in Abbildung 2.9 abgelesen werden. Diese stellt für $n = 1$ die naive Extrapolation $[D_{\psi,0} + D_{\psi,1}]_{n=1}(c, c)$ der Skalenfunktion $D_\psi(c, c)$ dar. Sie unterscheidet sich von der in derselben Abbildung rot eingezeichneten Skalenfunktion D nur durch den Beitrag der niedrigsten Mode und ist im Gegensatz zu D regulär bei $c = 0$. Die in Abbildung 2.9 braun eingezeichnete Kurve stellt die auf Gleichung (2.194) basierende Extrapolation

$$D_{\text{app}}(c_1, c_2) \simeq \left\{ D_{\psi,0}(c_1, c_2) + \epsilon D_{\psi,1}(c_1, c_2) - \frac{A_3}{3} [\Omega(c_1, c_2)]^{3/2} \right\}_{\epsilon=1} \quad (2.197)$$

dar. Dabei wird also der Zweischleifenterm des Beitrags D_φ der kleinsten Mode zur Skalenfunktion der Casimir-Amplitude vernachlässigt. Zudem wird der Vorfaktor $A_{d-1}/(d-1)$ des Einschleifenterms durch seinen Wert bei $d = 4$ ersetzt. Die Motivation, diese Extrapolation zu verwenden, ist die Folgende: Im Fall $\mathbf{c}_1 = \mathbf{c}_2 = 0$ ergibt sich aus dem letzten Term in Gleichung (2.197) exakt der $a_{3/2}(n)\epsilon^{3/2}$ -Beitrag zu $D(0, 0)$. Andererseits ergibt sich bei der Entwicklung dieses D_φ in ϵ für $\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2 > 0$ für die Funktion $D_{\psi,0} + \epsilon D_{\psi,1} + D_\varphi$ genau das $O(\epsilon)$ -Ergebnis $D_0 + \epsilon D_1$.

Somit hat Gleichung (2.197) den gewünschten Grenzwert $\Delta_C^{(\text{sp},\text{sp})}|_{\epsilon=1}/n$ für $\mathbf{c}_1 = \mathbf{c}_2 \rightarrow 0$. Zudem ist auch die Ableitung $\partial D_{\text{app}}(\mathbf{c}, \mathbf{c})/\partial c$ bei $\mathbf{c} = 0$ endlich. Trotz dieser Eigenschaften der Extrapolation (2.197) kann diese nur für kleine Werte von $\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2$ als der naiven Extrapolation $D_0 + D_1$ überlegen angesehen werden. Ursache dafür ist die Größenordnung der Funktion $\Omega(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)|_{\epsilon=1}$ für große Werte von $\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2$ (siehe Abbildung 2.3). Dies führt dazu, dass die Differenz zwischen $(A_3/3)\Omega(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)$ und der extrapolierten Entwicklung $(1 + \partial_\epsilon|_{\epsilon=0})(A_3/3)\Omega(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)$ nicht klein ist. Daher soll an dieser Stelle darauf verzichtet werden, die Extrapolation (2.197) für beliebige Werte von \mathbf{c}_j darzustellen.

Zuletzt sollen noch einige Anmerkungen zum Verhalten der Skalenfunktion für große \mathbf{c}_j gemacht werden. Es ist bekannt, dass Abweichungen der Oberflächenkopplungen \mathbf{c}_j von ihrem Fixpunktwert $\mathbf{c}_j = \infty$ zu Korrekturen zum Skalenverhalten $\propto L^{-1}$ führen [93, 120]. Die Berücksichtigung dieser Korrekturen ist essentiell für die Auswertung von numerischen Rechnungen für Casimir-Kräfte, wie zum Beispiel Monte-Carlo-Simulationen [21, 22, 83, 87, 121] oder numerisch exakte *Large-n*-Rechnungen [26, 27]. Die hier präsentierten $O(\epsilon)$ -Ergebnisse ermöglichen es, die Existenz solcher Korrekturen explizit zu verifizieren. Die Skalenfunktion $D(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)$ muss das asymptotische Verhalten

$$nD(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) \underset{\mathbf{c}_1=\mathbf{c}_2 \rightarrow \infty}{\approx} \Delta^{(o,o)} + \left(\mathbf{c}_1^{-\nu/\Phi} + \mathbf{c}_2^{-\nu/\Phi} \right) \Delta_1^{(o,o)} \quad (2.198a)$$

und

$$nD(0, \mathbf{c}_2) \underset{\mathbf{c}_2 \rightarrow \infty}{\approx} \Delta^{(\text{sp},o)} + \mathbf{c}_2^{-\nu/\Phi} \Delta_1^{(\text{sp},o)} \quad (2.198b)$$

aufweisen, um mit $1/L$ -Korrekturen des *Finite-Size*-Anteils der freien Energie im Einklang zu sein. Eine Analyse zeigt, dass das Ergebnis (Gleichungen (2.126), (2.120) und (2.127)) der Skalenfunktion tatsächlich mit diesem asymptotischen Verhalten vereinbar ist: Die in D_1 auftretenden Terme $\propto \epsilon \log(\mathbf{c}_j)/\mathbf{c}_j$ können zu dem Verhalten (2.198) aufexponentiert

werden. Die Amplituden $\Delta_1^{(o,o)}$ und $\Delta_1^{(sp,o)}$ sind universell und haben die ϵ -Entwicklungen

$$\Delta_1^{(o,o)} = \frac{\pi^2}{480} + \epsilon \frac{\pi^2}{960} \left[3\gamma_E - \frac{17}{3} + \log \frac{4}{\pi} - \frac{180}{\pi^4} \zeta'(4) - \frac{n+2}{n+8} \left(\gamma_E - \frac{1}{2} + \log 4 \right) \right] + O(\epsilon^2) \quad (2.199)$$

und

$$\Delta_1^{(sp,o)} = -\frac{7\pi^2}{3840} + \epsilon \frac{\pi^2}{7680} \left[\frac{35}{3} - 7\gamma_E - 12 \log 2 - 7 \log \pi + \frac{1260}{\pi^4} \zeta'(4) + \frac{n+2}{n+8} (7\gamma_E - 19 + 14 \log 2) \right] + O(\epsilon^2). \quad (2.200)$$

Die in den Abbildungen 2.6 und 2.7 dargestellten Extrapolationen der Casimir-Kraft weisen dieses Verhalten jedoch nicht auf. Dies liegt daran, dass sie gewonnen wurden, indem die naive Extrapolation $[D_0 + D_1]$ verwendet wurde, um die Kraft zu berechnen. Daher konvergiert die so bestimmte Kraft für große c_j inkorrekt mit $\log(c_j)/c_j$ statt mit $c_j^{-\nu/\Phi}$. Es soll jedoch darauf verzichtet werden, dieses Verhalten der Extrapolation durch geeignete Methoden der Aufexponentierung zu verbessern.

3 Thermodynamischer Casimir-Effekt im Limes

$$n \rightarrow \infty$$

Die in Teil 2 dieser Arbeit durchgeführten Rechnungen für die Skalenfunktionen D und \mathcal{D} des *Finite-Size*-Anteils der freien Energie und der Casimir-Kraft waren auf die *Bulk*-kritische Temperatur beschränkt. Eine Erweiterung auf höhere Temperaturen wäre zwar technisch aufwendig, aber ohne grundlegende Probleme möglich. Die physikalisch interessanten Phänomene beim thermodynamischen Casimir-Effekt treten jedoch häufig unterhalb dieses Temperaturintervalls auf und sind mit den bisher vorgestellten Methoden — der ϵ -Entwicklung um die obere kritische Dimension im Rahmen der renormierungsgruppenverbesserten Störungstheorie — unzugänglich. Beispiele für diese Effekte wären der dimensionelle *Crossover* von d - zu einem $(d-1)$ -dimensionalen kritischen Verhalten, die bei Systemen mit genügend hoher Dimensionalität unterhalb der kritischen Temperatur des endlichen Systems $T_{c,L}$ auftretende spontane Symmetriebrechung sowie die zu langreichweitigen Kräften im Tieftemperaturbereich führenden Goldstone-Moden für Ordnungsparameter mit kontinuierlichen Symmetrien. Diese Effekte führen beim Beispiel suprafluider Heliumfilme dazu, dass die Skalenfunktion hier unterhalb der *Bulk*-kritischen Temperatur ein ausgeprägtes Minimum hat. Zur Beschreibung der Experimente an binären Flüssigkeitsgemischen ist es zudem notwendig, symmetriebrechende externe Felder zu berücksichtigen. Durch Oberflächenfelder werden dabei die Eigenschaften der Wände beschrieben, eine der beiden Komponenten des Gemischs zu bevorzugen. Homogene *Bulk*-Felder dagegen beschreiben Abweichungen der Differenz der chemischen Potentiale beider Spezies von der Differenz am kritischen Punkt. Insbesondere der Einfluss von Oberflächenfeldern kann in diesen Systemen nicht vernachlässigt werden, da diese in den Experimenten generisch vorhanden sind. Auch diese Auswirkungen der Brechung der $O(n)$ -Symmetrie kann bislang nicht im Rahmen der ϵ -Entwicklung beschrieben werden. Feldtheoretische Ergebnisse gehen hier bisher kaum über die Landau-Theorie (also die Nullschleifennäherung) hinaus.

Diese Beschränkung der renormierungsgruppenverbesserten Störungstheorie macht eine andere Herangehensweise an die Beschreibung der Experimente erforderlich. Eine Möglichkeit zur Untersuchung des thermodynamischen Casimir-Effekts im gesamten Tempera-

turbereich ist die Analyse der ϕ^4 -Theorie im Grenzwert, bei welchem die Anzahl der Ordnungsparameterkomponenten gegen unendlich geht (*Large-n-Limes*). Dieser Limes ist exakt handhabbar und kann die zuvor genannten physikalischen Effekte beschreiben. Beschränkt man sich auf dreidimensionale Systeme, so gibt es im Limes $n \rightarrow \infty$ aufgrund des Mermin-Wagner-Theorems keine geordnete Tieftemperaturphase für endliche Filmdicken $L < \infty$ [122–124]. Es gilt hier also $T_{c,L} = 0$. Dies ist ein wesentlicher Unterschied zu den experimentell relevanten Systemen: Zwar gibt es bei suprafluidem Helium aufgrund der kontinuierlichen $O(2)$ -Symmetrie keine geordnete Tieftemperaturphase, jedoch tritt bei diesem Spezialfall mit $n = 2$ unterhalb des Kosterlitz-Thouless-Übergangs bei $T_{KT}(L) < T_{c,\infty}$ eine Phase mit quasi-langreichweitiger Ordnung auf [125–127]. Dies führt zu Singularitäten in den Skalenfunktionen bei $x = x_{KT} < 0$ [125]. Dieser Effekt kann im Limes $n \rightarrow \infty$ nicht reproduziert werden. Die qualitativen Abweichungen zum dreidimensionalen Ising-Modell sind offensichtlicher: Der wesentliche Unterschied ist hier die diskrete Symmetrie des Ising-Modells. Diese führt dazu, dass im Tieftemperaturbereich auch für endliche Filmdicken eine langreichweitig geordnete Phase auftritt. Zudem gibt es keine Goldstone-Moden im System, was zum Verschwinden der Casimir-Kraft bei $T = 0$ führt.

Auf die Bestimmung der Skalenfunktionen des *Finite-Size-Anteils* der freien Energie und der Casimir-Kraft im *Large-n-Limes* von ϕ^4 -Theorien mit experimentell relevanten Randbedingungen soll in diesem Teil der Arbeit eingegangen werden. Die analytische Lösung dieses Problems ist bislang nur für Systeme mit periodischen Randbedingungen gelungen [28, 29]. Die Skalenfunktionen weisen hier jedoch ein qualitativ anderes Verhalten als die experimentell gefundenen Resultate auf, da sie kein Minimum haben, sondern monoton steigende Funktionen sind. In [26] und [27] ist es Diehl *et. al* erstmals gelungen, die Skalenfunktionen bei offenen Rändern numerisch exakt zu bestimmen. Die hier gefundene Ergebnisse sind — bis auf die fehlende Singularität bei x_{KT} — qualitativ identisch mit den für suprafluides Helium aus Experimenten und Monte-Carlo-Simulationen bekannten Resultaten. Teile dieser Ergebnisse wurden in [128] mit deutlich geringerer Genauigkeit reproduziert. Die Kenntnis von solchen exakten Lösungen ist von großer Bedeutung in der statistischen Physik: Sie bieten die Möglichkeit zur Überprüfung der Qualität von Näherungsverfahren (zum Beispiel [65, 129]), der Korrektheit von numerisch exakten Ansätzen (zum Beispiel [130]) und können gleichzeitig als Startpunkt für eine systematische Behandlung von physikalisch relevanteren Modellen dienen.

Der Rest dieses Teils der Arbeit gliedert sich folgendermaßen: Zunächst wird in Kapitel 3.1 das untersuchte Modell vorgestellt und der Zusammenhang zwischen dem *Large-n-Limes* und den sogenannten sphärischen Modellen erläutert. Anschließend werden Gleichungen

für die freie Energie des kontinuierlichen Systems hergeleitet. In diesen tritt eine stationäre Schrödingergleichung mit dem Potential $V(z)$ auf, welches selbstkonsistent berechnet werden muss. Zur numerischen Lösung dieser Gleichungen wird in Kapitel 3.3 eine Diskretisierung der Theorie eingeführt. In den folgenden Abschnitten werden die so erhaltenen Gleichungen numerisch gelöst und die Casimir-Amplitude sowie die Skalenfunktionen bestimmt. Kapitel 3.7 befasst sich mit der Analyse des Einflusses von externen Feldern auf den Casimir-Effekt. Zuletzt wird in Kapitel 3.8 eine Reihe von Erweiterungsmöglichkeiten und Anwendungen der hier genutzten Methoden präsentiert.

3.1 Das sphärische Modell und der Limes $n \rightarrow \infty$

Seit der exakten Lösung des 1920 von Lenz vorgeschlagenen Ising-Modells [131] durch Ising [132] in einer Dimension im Jahr 1925 und der 1944 von Onsager präsentierten analytischen Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells spielen exakt lösbare Modelle eine wesentliche Bedeutung in der statistischen Physik. Die Hoffnung auf eine exakte Lösung des physikalisch interessantesten dreidimensionalen Falles erfüllte sich in den darauf folgenden Jahren und bis heute leider nicht. Gleiches gilt für die ebenso relevanten, aber bereits deutlich komplexeren XY- und Heisenberg-Modelle. Diese Modelle können durch die Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j \in \Lambda} J_{i,j} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - \sum_{i \in \Lambda} \mathbf{H}_i \cdot \mathbf{s}_i \quad (3.1)$$

geschrieben werden. Die \mathbf{s}_i sind dabei n -komponentige Spins der Länge $|\mathbf{s}_i| = 1$, welche sich auf dem i -ten Gitterplatz eines Kristallgitters Λ befinden. Die Matrix J_{ij} gibt die durch die Austauschwechselwirkung verursachte Kopplung zwischen den verschiedenen Spins an. \mathbf{H}_i beschreibt ein auf den i -ten Spin wirkendes Magnetfeld.

Nachdem die Suche nach exakten Lösungen dieses Modells in höheren Dimensionen keinen Fortschritt machte, ging man dazu über, nach Vereinfachungen des durch Gleichung (3.1) für $n = 1$ beschriebenen Ising-Modells zu suchen. Ziel dabei war es, ein exakt lösbares Modell zu finden, welches trotzdem ein nicht-triviales kritisches Verhalten aufweist. Einen ersten Versuch in diesem Bestreben unternahm Kac mit der Einführung des sogenannten Gaußschen Modells 1947 [133, 134]. Hier wird die Nebenbedingung, dass die Ising-Spins nur diskrete Werte von $s_i = \pm 1$ annehmen können, so modifiziert, dass die Spins nun kontinuierliche Werte $s_i \in \mathbb{R}$ mit einer Gaußschen Verteilungsfunktion annehmen können. Dieses Modell ist dann in beliebigen Dimensionen exakt lösbar, weist jedoch unabhängig von der Dimension ein triviales, *Mean-Field*-artiges kritisches Verhalten auf. Zudem existiert die Lösung nur oberhalb einer kritischen Temperatur. Unterhalb dieser wird die

freie Energie aufgrund eines negativen Eigenwertes komplex.

Um dieses Problem bei tiefen Temperaturen in den Griff zu bekommen, wurde wenige Wochen später — ebenfalls von Kac — das sphärische Modell vorgeschlagen und mit Hilfe von Berlin exakt gelöst [134]. Auch hier dürfen die Spinvariablen wieder kontinuierliche Werte annehmen, jedoch werden nun nur Konfigurationen zugelassen, für die die sphärische Zwangsbedingung

$$\sum_{i \in \Lambda} s_i^2 = |\Lambda| \quad (3.2)$$

gilt. Die $|\Lambda|$ lokalen Nebenbedingungen $|s_i| = 1$ des Ising-Modells werden also durch eine globale Nebenbedingung ersetzt. Berlin und Kac lösten dieses Modell für $d = 1, 2, 3$ und fanden — wie gewünscht — ein nicht-triviales kritisches Verhalten¹. Lewis und Wannier [136] modifizierten dieses Modell weiter, indem sie anstelle der exakten sphärischen Zwangsbedingung (3.2) fordern, dass diese nur im Mittel erfüllt ist, also

$$\left\langle \sum_{i \in \Lambda} s_i^2 \right\rangle = |\Lambda|. \quad (3.3)$$

Aus diesem Grund wird es als *Mean-sphärisches* Modell bezeichnet. Dieses Modell hat den Vorteil, dass es wesentlich einfacher zu behandeln ist und zudem in translationsinvarianten Geometrien dieselben kritischen Eigenschaften wie das sphärische Modell hat (siehe zum Beispiel Kapitel 3.1 in [75]). Insbesondere sagen diese beiden sphärischen Modelle für $d > 2$ die Existenz eines Phasenübergangs voraus. Für $d > 4$ wird das kritische Verhalten dieser Modelle wieder trivial, das heißt *Mean-Field*-artig. Die untere kritische Dimension, bei welcher hier kein Phasenübergang auftritt, ist also $d_* = 2$. Die obere kritische Dimension ist $d^* = 4$.

Ein wichtiger Schritt zum Verständnis der sphärischen Modelle und insbesondere deren physikalischer Relevanz gelang 1968 Stanley [137]. Er zeigte, dass das sphärische Modell äquivalent zu dem durch Gleichung (3.1) definierten n -Vektor-Modell im Grenzfall unendlich großer Ordnungsparameterdimension $n \rightarrow \infty$ ist. Obwohl das sphärische Modell also als Näherung für das Ising-Modell — also ein Modell mit $n = 1$ — konzeptioniert wurde, sollten seine Voraussagen für Systeme mit größerem n verlässlicher und für $n \rightarrow \infty$ exakt werden. Voraussetzung dafür ist jedoch Translationsinvarianz des Systems. Es muss also entweder unendlich ausgedehnt sein oder bei endlichen Systemen periodische beziehungsweise antiperiodische Randbedingungen aufweisen [137–139].

Bei endlichen Systemen mit offenen Rändern gilt diese Äquivalenz nicht mehr [75, 140].

¹Unabhängig davon wurden diese Ergebnisse auch von Montroll gefunden [135].

Knops zeigt 1973, dass das sphärische Modell, will man die Äquivalenz dieser Systeme beibehalten, modifiziert werden muss [141]. Für ein System, bei dem die Translationsinvarianz nur in einer Richtung gebrochen ist, müssen nun statt einer globalen sphärischen Zwangsbedingung lokale Zwangsbedingungen

$$\sum_{i \in \Lambda_l} s_i^2 = |\Lambda_l| \tag{3.4}$$

eingeführt werden. Λ_l sei dabei die l -te senkrecht zu der durch die Brechung der Invarianz ausgezeichneten Richtung liegende Schicht und $\Lambda = \bigcup_l \Lambda_l$. In diese Klasse von Systemen fällt die in dieser Arbeit untersuchte Filmgeometrie. Bei einem Film der Dicke L hat man es daher nun mit L Zwangsbedingungen statt nur einer zu tun, was die analytische Behandlung extrem verkompliziert oder — in den meisten Fällen — gar unmöglich macht. Einzige Ausnahme bis heute ist das in [142, 143] am kritischen Punkt analytisch gelöste halbbunendliche Modell.

Aufgrund dieser Schwierigkeiten für endliche Systeme mit realen Randbedingungen wurden zunächst nur periodische Randbedingungen untersucht. Wegen der weiter bestehenden Translationsinvarianz bleibt es hier bei einer globalen Zwangsbedingung und diese Systeme können in vielen Fällen analytisch behandelt werden (siehe zum Beispiel [28, 29, 76, 144]). Für eine Übersicht über diese und weitere Publikationen sei auf [75] verwiesen.

Ein anderer Ansatz wurde in [144–146] verfolgt. Hier wurde ein sphärisches Modell mit offenen Randbedingungen gelöst, ohne die für Systeme mit gebrochener Translationsinvarianz erforderlichen Modifikationen zur Erhaltung der Äquivalenz mit dem $O(n \rightarrow \infty)$ -Modell zu berücksichtigen. Auf diese Weise können also auch sphärische Modelle mit offenen Rändern untersucht werden. Aufgrund der fehlenden Äquivalenz ist es dabei jedoch schwierig, die gefundenen Ergebnisse auf reale Systeme zu übertragen. Teilweise verletzen die Resultate sogar die *Finite-Size*-Skalenhypothese. In [144] und den dort angegebenen Referenzen kann eine Übersicht über den Stand der Theorie gewonnen werden.

Ziel dieses Teils der Arbeit ist es, das durch Gleichung (3.1) definierte Modell im Limes $n \rightarrow \infty$ zu untersuchen. Ausgangsbasis dafür soll jedoch nicht das Gittermodell, sondern — wie auch im vorangegangenen Teil dieser Arbeit — das dazugehörige kontinuierliche ϕ^4 -Modell sein. Dies ist äquivalent zu dem gemäß [141] modifizierten sphärischen Modell. Aufgrund der großen Komplexität des Problems wird dies nicht analytisch, dafür aber numerisch exakt behandelt. Die so erhaltenen Ergebnisse sind aufgrund der Äquivalenz zu $O(n)$ -symmetrischen Modellen von größerer Relevanz für reale physikalische Systeme.

3.2 Das Kontinuumsmodell

In diesem Kapitel soll — wie auch in Kapitel 2.1 — das nach Gleichung (2.4) definierte, n -komponentige ϕ^4 -Modell in einer Filmgeometrie behandelt werden. Ausgangspunkt dafür sei die durch eine partielle Integration gewonnene Darstellung der Zustandssumme für das kontinuierliche Modell (siehe Gleichung (2.8))

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \int \mathcal{D}[\phi] e^{-\mathcal{H}[\phi]} \\ &= \int \mathcal{D}[\phi] \exp \left\{ - \int_{\mathfrak{B}} d^d x \left[\frac{1}{2} \phi (-\nabla^2 + \hat{\tau}) \phi + \frac{g}{4!n} |\phi|^4 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

bevor später eine für die numerische Behandlung nötige Diskretisierung eingeführt wird. Aus diesem Ausdruck soll die freie Energie im Limes $n \rightarrow \infty$ berechnet werden. Dafür muss die Kopplungskonstante u gemäß $u = g/n$ mit $1/n$ reskaliert werden, um einen wohldefinierten und nicht-trivialen Grenzwert $n \rightarrow \infty$ zu erhalten (siehe zum Beispiel Kapitel 6.8.2 in [108]). Das Funktionalintegral über das Feld ϕ geht wieder nur über die Felder ϕ , die den vorgegebenen Randbedingungen genügen. Es sei wieder die Gültigkeit von Robin-Randbedingungen

$$(\partial_z - \hat{c}_1)\phi(\mathbf{y}, 0) = (\partial_z + \hat{c}_2)\phi(\mathbf{y}, L) = 0 \quad (3.6)$$

auf den Oberflächen des Systems angenommen.

Mit einer Hubbard-Stratonovich-Transformation [147, 148] lässt sich der im *Hamiltonian* auftretende ϕ^4 -Term als Gauß-Integral schreiben. Diese Transformation beruht auf der Identität

$$e^{-ax^2} = \frac{1}{\sqrt{16\pi a}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp \left[\frac{1}{2} xi y - \frac{1}{16a} y^2 \right]. \quad (3.7)$$

Durch den Übergang von gewöhnlichen Integralen zu Pfadintegralen und die Substitutionen $x \equiv \phi^2$, $a \equiv \frac{g}{24n}$ und $y \equiv \psi$ ergibt sich für die Zustandssumme des Systems

$$\mathcal{Z} = C \int \mathcal{D}[\phi] \int \mathcal{D}[\psi] e^{-\frac{1}{2} \int_{\mathfrak{B}} d^d x [\phi(-\nabla^2 + \hat{\tau} + i\psi)\phi + \frac{3n}{g}\psi^2]}, \quad (3.8)$$

wobei die Konstante C von der Kopplungskonstante g und der Anzahl n der Ordnungsparameterkomponenten ist. Diese gibt jedoch nach Logarithmierung von Gleichung (3.8) nur einen trivialen Hintergrundterm in der freien Energie und spielt daher im Folgenden keine Rolle. Die Zustandssumme kann somit durch Einführung eines zweiten Funktionalintegrals über das skalare Feld ψ durch Gauß-Integrale ausgedrückt werden. Dies ist jedoch

gegenüber Gleichung (3.5) nur eine scheinbare Vereinfachung: Durch das Auftreten des Kopplungsterms $\psi\phi^2$ in Gleichung (3.8) können die Integrale nicht analytisch berechnet werden. Das in (3.8) auftretende Integral über ϕ kann jedoch direkt ausgewertet werden. Berechnen des Gauß-Integrals ergibt

$$\mathcal{Z} \propto \int \mathcal{D}[\psi] \exp \left\{ -\frac{n}{2} \left[\text{Sp} \log (-\nabla^2 + \dot{\tau} + i\psi) + \frac{3}{g} \int d^d x \psi^2 \right] \right\}. \quad (3.9)$$

Das resultierende ψ -Integral ist offenbar nicht-trivial und kann nicht allgemein berechnet werden. Jedoch kann das Verhalten im Limes $n \rightarrow \infty$ direkt mit Hilfe der Sattelpunktsnäherung [104, Kapitel 4.6] analysiert werden. Dazu wird der Exponent in Gleichung (3.9) in eine Taylorreihe in $\psi(\mathbf{y}, z)$ um sein Maximum $\psi_0(\mathbf{y}, z)$ entwickelt². Aufgrund der Translationsinvarianz des Systems parallel zu den Platten (\mathbf{y} -Richtung) ist das Maximum nur eine Funktion der senkrechten Koordinate z : $\psi_0(\mathbf{y}, z) = \psi_0(z)$. Diese Entwicklung lässt sich schreiben als

$$\begin{aligned} & -\frac{n}{2} \left[\text{Sp} \log (-\nabla^2 + \dot{\tau} + i\psi) + \frac{3}{g} \int d^d x \psi^2 \right] = \\ & = -\frac{n}{2} \left[\text{Sp} \log (-\nabla^2 + \dot{\tau} + i\psi_0(z)) + \frac{3}{g} A \int_0^L dz \psi_0^2(z) \right] + \dots \end{aligned} \quad (3.10)$$

Die Auslassungspunkte stehen dabei für Terme quadratischer und höherer Ordnung in $\psi(\mathbf{x}) - \psi_0(z)$. Diese sollen hier vorerst nicht weiter berücksichtigt werden. Der lineare Term verschwindet offensichtlich am Extremum.

Im Limes $n \rightarrow \infty$ geht das durch Gleichung (3.5) definierte Modell in ein Gaußsches Modell über. Diese Eigenschaft kann leicht verstanden werden [149]: Der Term $\propto \phi^2$ ist für große n die Summe einer großen Anzahl von Summanden. Daher erwartet man, dass er — verursacht durch Selbst-Mittelung — nur schwach fluktuiert. Es gilt also

$$\frac{\langle (\phi^2 - \langle \phi^2 \rangle)^2 \rangle}{\langle \phi^2 \rangle^2} = O\left(\frac{1}{n}\right) \quad (3.11)$$

beziehungsweise $\Delta\phi^2 \ll \langle \phi^2 \rangle$. Setzt man $\phi^2 = \langle \phi^2 \rangle + \Delta\phi^2$ in den *Hamiltonian* ein, so erhält man unter Vernachlässigung des Terms $(\Delta\phi^2)^2$ ein Gaußsches Modell. Der quadratische Term hat dann den Koeffizienten $\dot{\tau}/2 + (g/12n) \langle \phi^2 \rangle$ anstelle von $\dot{\tau}/2$. $\langle \phi^2 \rangle$ muss dann — wie bei einer *Mean-Field*-Näherung — selbstkonsistent bestimmt werden und

²Variiert man ψ im Raum der reellen Funktionen, so hat der Exponent ein Maximum bei $\psi_0(\mathbf{y}, z)$. Setzt man nun aber $\tilde{\psi} = \dot{\tau} + i\psi$, so erhält man ein Minimum bei $\tilde{\psi}_0(\mathbf{y}, z) = \dot{\tau} + i\psi_0(\mathbf{y}, z)$. Daher spricht man hier von einer Sattelpunktsintegration. $\psi_0(\mathbf{y}, z)$ wird auch als Sattelpunkt bezeichnet.

ist offenbar direkt mit dem Feld $i\psi_0$ aus Gleichung (3.10) verknüpft. Im Limes $n \rightarrow \infty$ verschwindet $\Delta\phi^2$ und diese Näherung wird exakt.

Die Entwicklung (3.10) wird nun in Gleichung (3.9) eingesetzt und das ψ -Integral berechnet. Für die reduzierte freie Energie pro Fläche A und Ordnungsparameterdimension n

$$f_L = -\frac{\log \mathcal{Z}}{An} \quad (3.12)$$

ergibt sich der Ausdruck

$$f_L = f_L^{(0)} + \frac{1}{2} \text{Sp} \log (-\nabla^2 + \hat{\tau} + i\psi_0(z)) + \frac{3}{2g} \int_0^L dz \psi_0^2(z) + O(1/n). \quad (3.13)$$

Hierbei ist $f_L^{(0)}$ der oben bereits erwähnte triviale Hintergrundterm der freien Energie. Die führende Ordnung der freien Energie im Limes $n \rightarrow \infty$ ist also allein durch den Wert des Integranden am Extremum $\psi_0(z)$ gegeben. Es ist möglich zu zeigen, dass die durch die Auslassungspunkte angedeuteten weiteren Terme in (3.10) systematisch Beiträge höherer Ordnungen in $1/n$ zur freien Energie liefern. Darauf wird kurz in Abschnitt 3.8.3 eingegangen. Der Hauptteil dieser Arbeit ist aber allein der führenden Ordnung gewidmet.

Es bleibt noch die Bestimmung der Lage des Extremums ψ_0 . Diese ergibt sich aus der Forderung

$$\frac{\delta}{\delta\psi(\mathbf{x})} \text{Sp} \log (-\nabla^2 + \hat{\tau} + i\psi) \stackrel{!}{=} -\frac{3}{g} \frac{\delta}{\delta\psi(\mathbf{x})} \int d^d x' \psi^2(\mathbf{x}'). \quad (3.14)$$

Die Funktionalableitung auf der rechten Seite von Gleichung (3.14) kann sofort mit der fundamentalen Regel für Funktionalableitungen $\delta f(x)/\delta f(x') = \delta(x - x')$ berechnet werden und ergibt

$$-\frac{3}{g} \frac{\delta}{\delta\psi(\mathbf{x})} \int d^d x' \psi^2(\mathbf{x}') = -\frac{6}{g} \psi(\mathbf{x}). \quad (3.15)$$

Die Auswertung der linken Seite von Gleichung (3.14) gestaltet sich etwas schwieriger. Dazu ist es sinnvoll, die Spur in der Eigenbasis $\{|\nu, \mathbf{p}\rangle, E_{\nu, \mathbf{p}}\}$ des Operators $\hat{H}[\psi] = -\nabla^2 + i\psi$ auszudrücken

$$\text{Sp} \log (-\nabla^2 + \hat{\tau} + i\psi) = \sum_{\nu, \mathbf{p}} \log (E_{\nu, \mathbf{p}} + \hat{\tau}). \quad (3.16)$$

Die Abhängigkeit vom Feld $\psi(\mathbf{x}')$ in Gleichung (3.16) steckt nun allein in den Eigenwerten $E_{\nu, \mathbf{p}}$. Zur Berechnung der Funktionalableitung dieser Eigenwerte kann das Hellmann-Feynman-Theorem [150, 151] genutzt werden. In der Ortsdarstellung ergibt sich in der

Dirac-Notation

$$\begin{aligned}
 \frac{\delta}{\delta\psi(\mathbf{x})} \sum_{\nu, \mathbf{p}} \log(E_{\nu, \mathbf{p}} + \dot{\tau}) &= \sum_{\nu, \mathbf{p}} \frac{\int d^d x' \langle \mathbf{x}' | \nu, \mathbf{p} \rangle \frac{\delta \hat{H}[\psi(\mathbf{x}')] }{\delta \psi(\mathbf{x})} \langle \nu, \mathbf{p} | \mathbf{x}' \rangle}{E_{\nu, \mathbf{p}} + \dot{\tau}} \\
 &= \sum_{\nu, \mathbf{p}} \frac{\int d^d x' \langle \mathbf{x}' | \nu, \mathbf{p} \rangle i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \nu, \mathbf{p} | \mathbf{x}' \rangle}{E_{\nu, \mathbf{p}} + \dot{\tau}} \\
 &= i \langle \mathbf{x} | \frac{1}{-\nabla^2 + \dot{\tau} + i \psi(\mathbf{x})} | \mathbf{x} \rangle
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

und somit

$$i \psi_0(\mathbf{x}) \stackrel{!}{=} \frac{g}{6} \langle \mathbf{x} | \frac{1}{-\nabla^2 + \dot{\tau} + i \psi_0(\mathbf{x})} | \mathbf{x} \rangle. \tag{3.18}$$

Nutzt man nun noch die Invarianz $\psi_0(\mathbf{x}) = \psi_0(z)$ aus, so erhält man zusammen mit der Definition des z -abhängigen Extremums $i \psi_0(z) = V_L(z) - \dot{\tau}$ die Bestimmungsgleichung

$$V_L(z) - \dot{\tau} = \frac{g}{6} \langle z | \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \frac{1}{-\partial_z^2 + \mathbf{p}^2 + V} | z \rangle. \tag{3.19}$$

Mit dem Eigensystem $\{\varepsilon_\nu, \varphi_\nu(z)\}$ des Schrödinger-Operators $\hat{H} = -\partial_z^2 + V_L(z)$

$$[-\partial_z^2 + V_L(z)] \varphi_\nu(z) = \varepsilon_\nu \varphi_\nu(z) \tag{3.20}$$

lässt sich dies kompakt schreiben als

$$\dot{\tau} - V_L(z) = -\frac{g}{6} \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{|\varphi_\nu(z)|^2}{\mathbf{p}^2 + \varepsilon_\nu}. \tag{3.21}$$

Aus Gleichung (3.13) wird damit

$$f_L = \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^{\infty} \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \log(\mathbf{p}^2 + \varepsilon_\nu) - \frac{3}{2g} \int_0^L dz [\dot{\tau} - V_L(z)]^2, \tag{3.22}$$

wobei der Beitrag $f_L^{(0)}$ und Terme der Ordnung $O(1/n)$ von nun an unterdrückt werden. Gleichung (3.21) für das Potential und die Schrödinger-Gleichung (3.20) bilden zusammen mit den Randbedingungen (3.6) ein System von Gleichungen, welches selbstkonsistent nach $V_L(z)$ und dem Eigensystem $\{\varepsilon_\nu, \varphi_\nu(z)\}$ gelöst werden muss. Mit dem so gewonnenen Potential kann dann gemäß (3.22) die freie Energie des Systems im Limes $n \rightarrow \infty$ bestimmt werden.

Es soll noch angemerkt werden, dass die durch Gleichung (3.22) definierte freie Energie

an der durch die Sattelpunktgleichung (3.21) definierten Stelle ein globales Maximum hat. Es gilt also

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_L = \max_{V_L(z)} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\nu} \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \log(\mathbf{p}^2 + \varepsilon_{\nu}) - \frac{3}{2g} \int_0^L dz [\overset{\circ}{r} - V_L(z)]^2 \right\}. \quad (3.23)$$

Dies kann mit Hilfe eines Variationsverfahrens für die freie Energie (siehe zum Beispiel Kapitel 4.8 in [152]) erklärt werden.³ Demnach erhält man eine Näherung für die freie Energie eines gegebenen Systems mit dem *Hamiltonian* \mathcal{H} , indem man einen von verschiedenen Parametern λ abhängigen Näherungsansatz $\mathcal{H}_0(\lambda)$ für den *Hamiltonian* macht. Die freie Energie lässt sich dann gemäß

$$F \leq F_0(\lambda) + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0(\lambda) \rangle_0 \quad (3.24)$$

abschätzen, wobei $\langle \dots \rangle_0$ den Erwartungswert bezüglich \mathcal{H}_0 bezeichnet und F_0 die freie Energie des durch \mathcal{H}_0 beschriebenen Systems ist. Minimiert man also die rechte Seite von Gleichung (3.24), so erhält man eine Näherung für die freie Energie des untersuchten Systems.

Da das hier untersuchte Modell im Limes $n \rightarrow \infty$ in ein Gaußsches Modell übergeht, macht man hier also einen Gaußschen Näherungsansatz. Das Potential ψ ist der Variationsparameter. Minimiert man die freie Energie bezüglich ψ , so erhält man in diesem Fall die exakte freie Energie des ursprünglichen Systems. Aufgrund der imaginären Einheit im Zusammenhang zwischen $\psi_0(z)$ und $V_L(z)$, $i\psi_0(z) = V_L(z) - \overset{\circ}{r}$ wird aus dem globalen Minimum bei $\psi_0(z)$ ein globales Maximum bei $V_L(z)$. Statt die Selbstkonsistenzgleichung (3.21) zu lösen, kann man also auch den Ausdruck (3.22) für die freie Energie bezüglich des Potentials maximieren.

Diskussion des kritischen Verhaltens

Bevor das System in der Filmgeometrie weiter untersucht wird, soll zunächst auf das *Bulk*-System eingegangen und dessen kritisches Verhalten diskutiert werden. Dabei wird der Vorgehensweise von [153] gefolgt.

Da sich diese Arbeit in erster Linie mit dreidimensionalen Systemen beschäftigt und das *Bulk*-System im Gegensatz zum Film endlicher Dicke L einen Phasenübergang bei einer kritischen Temperatur $T_c > 0$ aufweist, ist es sinnvoll, das Feld ϕ aus Gleichung (3.8) zu zerlegen, $\phi = (\sqrt{n}\sigma, \boldsymbol{\pi})$, mit $\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_{n-1})$ und zunächst nur das Funktionalinte-

³Dies Verfahren verläuft analog zum Rayleigh-Ritzschen Variationsverfahren in der Quantenmechanik.

gral über das $(n-1)$ -komponentige Feld $\boldsymbol{\pi}$ auszuführen. Da die verbleibende Komponente von $\boldsymbol{\phi}$ mit \sqrt{n} skaliert wurde, ist es wieder möglich, die Funktionalintegrale über σ und ψ im Limes $n \rightarrow \infty$ mit Hilfe der Sattelpunktsnäherung auszuwerten. Aufgrund der Translationsinvarianz in alle Richtungen ist die Lage (r_b, σ_0) des Extremums unabhängig vom Ort \boldsymbol{x} . Es ergeben sich folgende Bestimmungsgleichungen für (r_b, σ_0) :

$$0 = r_b \sigma_0 \tag{3.25a}$$

$$0 = \frac{g}{3} \sigma_0^2 + \dot{\tau} - r_b + \frac{g}{6} \int_{\boldsymbol{p}}^{(d)} \frac{1}{\boldsymbol{p}^2 + r_b}. \tag{3.25b}$$

Analog zu der Rechnung im Film wurde dabei $r_b = i\psi_0 + \dot{\tau}$ gesetzt. r_b entspricht also dem Potential $V_L(z)$. Definiert man $V_\infty \equiv V(z|\infty)$ als Potential des Halbraums, so gilt

$$\lim_{z \rightarrow \infty} V_\infty(z) = V_\infty(\infty) \equiv V_b = r_b. \tag{3.26}$$

Aus der ersten Bestimmungsgleichung (3.25a) für das Extremum folgt sofort, dass entweder $r_b = 0$ oder $\sigma_0 = 0$ gelten muss. Wenn $\sigma_0 \neq 0$, so ist die $O(n)$ -Symmetrie spontan gebrochen und r_b verschwindet. Nach Gleichung (3.25b) ist r_b auch die Masse der $\boldsymbol{\pi}$ -Felder. Diese werden also masselos und entsprechen den $n-1$ Goldstone-Moden. $r_b = 0$ bedeutet demnach, dass das System sich in der geordneten Phase befindet. Ist hingegen $\sigma_0 = 0$, so gilt $r_b \neq 0$ und die n $\boldsymbol{\phi}$ -Felder haben dieselbe Masse r_b . Dieser Fall entspricht der ungeordneten Phase.

Zudem erkennt man an Gleichung (3.25b), dass die Lösung $r_b = 0$ — also die geordnete Phase — nur für $d > 2$ existieren kann, da das Integral auf der rechten Seite nur dann IR-konvergent ist. Dies ist konsistent mit der Aussage des Mermin-Wagner-Theorems [122–124], dass in einem System mit kurzreichweitiger Wechselwirkung für $d \leq 2$ eine kontinuierliche Symmetrie bei einer endlichen Temperatur nicht spontan gebrochen werden kann. Die masselosen Goldstone-Moden induzieren eine IR-Instabilität für $d \leq 2$ und sorgen dafür, dass der Erwartungswert σ_0 des Ordnungsparameters verschwindet. Der kritische Punkt des *Bulk*-Systems ist also durch die Bedingung

$$r_b = \sigma_0 = 0 \tag{3.27}$$

definiert. Hier gilt nach Gleichung (3.25b)

$$\dot{\tau}_c = \frac{g}{6} \int_{\boldsymbol{p}}^{(d)} \frac{1}{\boldsymbol{p}^2}. \tag{3.28}$$

Die in den Gleichungen (3.25b) und (3.28) auftretenden Impuls-Integrale sind nicht für alle Dimensionen d UV-konvergent. Wenn sie mit einem *Cutoff* Λ regularisiert werden — die Integrale also auf den Bereich $|\mathbf{p}| < \Lambda$ beschränkt werden — verhalten sie sich für große Λ wie Λ^{d-2} . Diese UV-Divergenz kann beseitigt werden, indem man die beiden Gleichungen voneinander abzieht. Es kann dann also der Limes $\Lambda \rightarrow \infty$ genommen werden. Mit der Definition

$$\dot{\tau} = \dot{\tau}_c + \tau \quad (3.29)$$

und dem *Bulk*-Integral

$$I_b(r_b) = \int_{\mathbf{p}}^{(d)} \left(\frac{1}{\mathbf{p}^2 + r_b} - \frac{1}{\mathbf{p}^2} \right) \quad (3.30)$$

$$= - \int_{\mathbf{p}}^{(d)} \frac{r_b}{\mathbf{p}^2 (\mathbf{p}^2 + r_b)} \quad (3.31)$$

erhält man also

$$0 = \frac{g}{3}\sigma_0^2 + \tau - r_b + \frac{g}{6}I_b(r_b). \quad (3.32)$$

Das Integral in der Definition von $I_b(r_b)$ konvergiert für $r_b > 0$ wenn $2 < d < 4$ und liefert

$$0 = \frac{g}{3}\sigma_0^2 + \tau - r_b - \frac{g}{6}A_d r_b^{d/2-1}, \quad (3.33)$$

mit der in Gleichung (2.56) definierten Funktion A_D . Gleichung (3.33) kann nun zusammen mit Gleichung (3.25a) für die zwei Fälle $r_b = 0$ und $\sigma_0 = 0$ in drei Dimensionen gelöst werden: In der geordneten Phase ($r_b = 0$) ergibt sich der Erwartungswert des Ordnungsparameters

$$\sigma_0 = \sqrt{-\frac{3\tau}{g}}. \quad (3.34)$$

In der ungeordneten Phase gilt wegen $A_3 = 1/4\pi$

$$0 = \tau - r_b - \frac{g}{24\pi}r_b^{1/2}, \quad (3.35)$$

was für kleine τ und r_b gelöst werden kann und

$$r_b = \left(\frac{24\pi\tau}{g} \right)^2 + O(\tau^3) \quad (3.36)$$

ergibt.

Regularisierung der Selbstkonsistenzgleichung

Im vorangegangenen Abschnitt wurden die kritischen Eigenschaften des *Bulk*-Systems im *Large-n*-Limes untersucht. Dabei war es nötig, das UV-divergente Integral in der Selbstkonsistenzgleichung (3.25b) mit einem *Cutoff* Λ zu regularisieren. Es wurde zudem gezeigt, dass dieser *Cutoff* — nach Subtraktion der Selbstkonsistenzgleichung am kritischen Punkt (3.28) — wieder entfernt und der Limes $\Lambda \rightarrow \infty$ vollzogen werden kann. Die erhaltenen Integrale sind UV-endlich und können — in dimensioneller Regularisierung berechnet — keine Polterme in $d = 3$ enthalten. Gleiches gilt auch für die Sattelpunktgleichung des endlichen Systems (3.21): Zieht man von dieser Gleichung die *Bulk*-Selbstkonsistenzgleichung am kritischen Punkt

$$\hat{\tau}_c = -\frac{g}{6} \int_{\mathbf{p}} \int_{k>0}^{(d-1)} \frac{dk}{\pi} \frac{1}{\mathbf{p}^2 + \varepsilon_{b,c}(k)} \quad (3.37)$$

ab, so erhält man UV-endliche Ausdrücke. Dabei bedeutet $\varepsilon_{b,c}(k)$ die *Bulk*-Dispersionsrelation am kritischen Punkt $r_b = 0$. Im kontinuierlichen Modell ist

$$\varepsilon_b(k) = r_b + k^2, \quad k \in \mathbb{R}^{\geq 0}. \quad (3.38)$$

In Gleichung (3.37) wurde jedoch bewusst $\varepsilon_{b,c}(k)$ statt k^2 geschrieben, um die Einführung einer Diskretisierung in der senkrechten Richtung zu ermöglichen. Die Dispersionsrelation des Gitters ist aus der Festkörperphysik bekannt und identisch mit der einer linearen Kette mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung. Sie lautet

$$\varepsilon_b^{\text{lc}}(k) = 4 \sin^2 \left(\frac{k}{2} \right), \quad 0 \leq k \leq \pi, \quad (3.39)$$

wobei die Gitterkonstante auf eins gesetzt wurde.

Aus der UV-divergenten Gleichung (3.21) erhält man damit — analog zum *Bulk*-Fall — mit der Definition

$$\hat{\tau} = \hat{\tau}_c + \tau \quad (3.40)$$

und der von der *Bulk*-Dispersion abhängigen Funktion

$$I_L(z) = \int_{\mathbf{p}} \int_{k>0}^{(d-1)} \left[\sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{|\varphi_{\nu}(z)|^2}{\mathbf{p}^2 + \varepsilon_{\nu}} - \frac{1}{\pi} \frac{1}{\mathbf{p}^2 + \varepsilon_{b,c}(k)} \right] \quad (3.41)$$

die UV-endliche Selbstkonsistenzgleichung

$$\tau - V_L(z) = -\frac{g}{6}I_L(z). \quad (3.42)$$

Dass das Integral $I_L(z)$ UV-endlich ist, wurde in [142, 143] für den halbunendlichen Fall, also für $I_\infty(z)$, explizit gezeigt. Auf die exakte Lösung des Problems in diesem Fall wird im nächsten Abschnitt kurz eingegangen. Für die Filmgeometrie $L < \infty$ mit periodischen Randbedingungen findet sich in [76] der Nachweis für die UV-Endlichkeit. Auf den Beweis für offene Randbedingungen im kontinuierlichen Film soll an dieser Stelle verzichtet werden, da für die Numerik eine Diskretisierung zur Analyse der Selbstkonsistenzgleichung nötig sein wird. In Abschnitt 3.3 wird dies jedoch für die in dieser Arbeit untersuchte Diskretisierung der senkrechten Richtung nachgeholt.

3.2.1 Exakte Lösung des halbunendlichen Systems

Das halbunendliche $O(n)$ -symmetrische Modell am kritischen Punkt ist bislang das einzige nicht translationsinvariante System, das im Limes $n \rightarrow \infty$ analytisch gelöst werden konnte [142, 143]. Deshalb und aufgrund der Relevanz dieser Ergebnisse für die Filmgeometrie soll in diesem Abschnitt auf den in [142, 143] verwendeten Lösungsweg eingegangen werden. Zudem soll erläutert werden, warum sich diese Methode nicht auf Systeme mit endlicher Dicke übertragen lässt und auf den kritischen Punkt beschränkt bleibt.

Ausgangspunkt für die Lösung des halbunendlichen Systems war die Zweipunktkumulante

$$G_{\alpha,\beta}(\mathbf{y}, z, z') \equiv \langle \phi_\alpha(\mathbf{y}, z) \phi_\beta(\mathbf{0}, z') \rangle - \langle \phi_\alpha(\mathbf{y}, z) \rangle \langle \phi_\beta(\mathbf{0}, z') \rangle = \delta_{\alpha,\beta} G_\alpha(\mathbf{y}, z, z'). \quad (3.43)$$

Deren Fouriertransformation $\delta_{\alpha,\beta} \tilde{G}_{\alpha,\mathbf{k}}(z, z')$ bezüglich der parallel zu der Oberfläche liegenden Ortskoordinaten \mathbf{y} erfüllt die Differentialgleichung

$$\left[-\frac{d^2}{dz^2} + k^2 + V_\infty(z) \right] \tilde{G}_{\alpha,\mathbf{k}}(z, z') = \delta(z - z') \quad (3.44)$$

und ist gemäß

$$V_\infty(z) = \frac{g}{6} \int_{k \leq \Lambda}^{(d-1)} \left[\tilde{G}_{\alpha,\mathbf{k}}(z, z) - \tilde{G}_{\alpha,\mathbf{k}}(\infty, \infty) \right] \quad (3.45)$$

mit dem Potential $V_\infty(z)$ verknüpft. Diese Gleichung ist offenbar das halbunendliche Analogon zu Gleichung (3.42). Bray und Moore konnten die Differentialgleichung (3.44) am kritischen Punkt mit Dirichlet-Randbedingungen $\dot{c} \rightarrow \infty$ auf der Oberfläche lösen. Dabei gingen sie wie folgt vor: Da für $\dot{\tau} = 0$ und $\dot{c} \rightarrow \infty$ keine zusätzlichen Längenskalen im

System auftreten, muss die Lösung aus Dimensionsgründen die Skalenform

$$\tilde{G}_{\mathbf{k}}(z, z') = \frac{1}{k} \tilde{G}_1(kz, kz') \quad (3.46)$$

erfüllen. Der freie Propagator des halbumendlichen Problems mit Dirichlet- oder Neumann-Randbedingungen hat am kritischen Punkt ebenfalls diese Skalenform [95]. Sobald jedoch $\dot{\tau} \neq 0$ oder $0 < \dot{c} < \infty$ gilt, treten im System neue charakteristische Längen auf, was dazu führt, dass die folgende Argumentation nicht mehr möglich ist.

Eine Analyse von Gleichung (3.44) zeigt, dass es Lösungen der Form (3.46) nur dann geben kann, wenn das Potential proportional zu $1/z^2$ ist. Macht man den Ansatz $V_\infty(z) = (\mu^2 - 1/4)/z^2$, so lässt sich die zugehörige stationäre Schrödinger-Gleichung analytisch lösen (siehe auch Anhang A.3). Der Propagator $\tilde{G}_{\alpha, \mathbf{k}}(z, z')$ kann dann aus dem Eigensystem berechnet werden und man erhält:

$$\tilde{G}_{\alpha, \mathbf{k}}(z, z') = \begin{cases} \sqrt{zz'} I_\mu(kz) K_\mu(kz'), & z < z' \\ \sqrt{zz'} K_\mu(kz) I_\mu(kz'), & z > z', \end{cases} \quad (3.47)$$

wobei I und K die modifizierten Bessel-Funktionen sind. Mit diesem Ausdruck für den Propagator lässt sich nun das Potential bestimmen. Weitere Analysen zeigen, dass zwei verschiedene Werte von dem Koeffizienten μ erlaubt sind. Diese korrespondieren mit dem gewöhnlichen Übergang

$$V_c^{\text{ord}}(z) = \frac{(d-3)^2 - 1}{4z^2}, \quad \text{für } 2 < d < 4 \quad (3.48)$$

und dem speziellen Übergang

$$V_c^{\text{sp}}(z) = \frac{(5-d)^2 - 1}{4z^2}, \quad \text{für } 3 < d < 4. \quad (3.49)$$

Für den in dieser Arbeit interessanten Fall $d = 3$ gibt es nur den gewöhnlichen Übergang, da das Mermin-Wagner-Theorem langreichweitige Ordnung in der Oberfläche verbietet. Das zugehörige Potential lautet

$$V_c^{\text{ord}}(z) \stackrel{d=3}{=} -\frac{1}{4z^2}. \quad (3.50)$$

Genauso wenig, wie sich diese analytische Herleitung auf endliche Temperaturen übertragen lässt, kann man sie auf Systeme endlicher Filmdicke erweitern. Die zusätzliche Längenskala L macht die vorangegangenen Dimensionsbetrachtungen hinfällig und die

analytische Lösung dieses Problems mit dieser Methode unmöglich.

Wenn auch die geschlossene Lösung für endliche Temperaturen und Filmdicken in weiter Ferne liegt, so ist es doch gelungen mit anderen Methoden einige weitere exakte Ergebnisse zu produzieren. In [154] wurde mit Hilfe der *Boundary Operator Expansion* die allgemeine Form des Potentials für endliche Temperaturen bestimmt. Durch Lösen der Selbstkonsistenzgleichung konnte damit die führende Korrektur zum Potential des halbunendlichen Systems für endliche Temperaturen bestimmt werden. Daraus wurden Aussagen zu der führenden Temperatursingularität der Exzess-Freien-Energie gemacht. Ebenso wurden exakte Ergebnisse für das Verhalten der Skalenfunktionen der freien Energie der Casimir-Kraft in der Nähe des kritischen Punktes erzielt. Diese Vorhersagen werden in Kapitel 3.6 mit den numerischen Ergebnissen verglichen. Es findet sich eine sehr gute Übereinstimmung. Ein weiterer Erfolg versprechender Ansatz, um analytische Ergebnisse für endliche Temperaturen oder Filmdicken zu erhalten, ist die inverse Streutheorie [155]. In Appendix A.3 wird gezeigt, wie man mit analytischen Rechnungen sehr gute Näherungen für die Casimir-Amplitude erhält. Statt die Selbstkonsistenzgleichung in der Filmgeometrie zu lösen und so das Potential $V_L(z)$ zu erhalten, wird ein Ansatz für das Potential gemacht und daraus die Amplitude berechnet. Nach dem Variationsverfahren für die freie Energie ist die so erhaltene Amplitude eine obere Schranke für die exakte Amplitude. Die Qualität der Näherung hängt dabei natürlich stark von dem geratenen Potential ab. Auch hierbei ist die analytische Lösung des halbunendlichen Modells von großem Nutzen, da sich das exakte Potential des Films in der Nähe der Oberflächen so wie das Potential des halbunendlichen Modells verhalten muss. Die Kenntnis dieses Verhaltens hilft nun dabei, gute Ansätze für $V_L(z)$ zu finden.

3.3 Diskretisierung des Problems

Die in Kapitel 3.2 vorgestellte kontinuierliche Beschreibung des Systems ist für analytische Untersuchungen sicherlich die bevorzugte Wahl. Es ist jedoch nicht gelungen, das in den Gleichungen (3.6), (3.21) und (3.20) definierte Gleichungssystem analytisch zu lösen. Für eine numerische Behandlung ist es jedoch unerlässlich, eine Diskretisierung einzuführen. Dazu gibt es mehrere Möglichkeiten mit verschiedenen Vor- und Nachteilen [26, 27]. Im Folgenden soll ausschließlich auf die Diskretisierung, bei der die $d - 1$ Richtungen parallel zu den Platten kontinuierlich bleiben und nur die verbleibende z -Richtung diskretisiert wird, eingegangen werden. Die \mathbf{p} -Integrale werden dann in dimensioneller Regularisierung berechnet. In [26] und [27] wurde zusätzlich dazu eine Alternative untersucht, bei der das System in allen Richtungen diskretisiert wird. Aus dem Kontinuum wird damit ein

d -dimensionales Gitter.

Der Vorteil der hier vorgestellten, nur teilweisen Diskretisierung des Systems besteht darin, dass die Impulsintegrale im Kontinuum aufgrund der einfacheren Dispersionsrelation von deutlich einfacherer Struktur sind. Die Ergebnisse lassen sich dann durch elementare Funktionen ausdrücken und erlauben zusätzlich die Untersuchung von Systemen mit nicht-ganzzahliger Dimension durch analytische Fortsetzung in d . Im Gegensatz dazu treten bei dem Gittermodell in drei Dimensionen die bekannten Watson-Integrale auf (siehe zum Beispiel [156]), was die Auswertung deutlich erschwert. Zudem bleibt man auf ganzzahlige Dimensionen beschränkt. Ein Vorteil des Gitters ist jedoch, dass ein Auftreten von UV-Singularitäten auf natürliche Weise durch den damit verbundenen *Cutoff* $\Lambda = \pi/a$ ausgeschlossen ist.

Es soll nun erläutert werden, wie das durch die Gleichungen (3.6), (3.21) und (3.20) definierte Problem diskretisiert werden kann. Das Intervall $[0, L]$ wird mit einer Gitterkonstante a diskretisiert. Das System besteht dann aus N Lagen, welche sich an den Stellen $z = a/2, a+a/2, \dots, a(N-1/2)$ befinden. Dann gilt $L = Na$ und im Limes $a \rightarrow 0$ wird das gesamte Intervall abgedeckt. Eine auf $[0, L]$ definierte Funktion $f(z)$ wird also jetzt dargestellt durch das N -Tupel $f_l = f[a(l-1/2)]$, $l = 1, 2, \dots, N$.

Für die weitere Analyse wird die diskrete Version des Schrödinger-Operators $\hat{H} = -\partial_z^2 + V(z)$ mit den Randbedingungen (3.6) benötigt. Der Limes $a \rightarrow 0$ soll dabei wieder das Kontinuumsmodell ergeben. Man kann sich leicht davon überzeugen, dass die $N \times N$ -Matrix

$$\mathbf{H} = -\mathbf{D}^2 + \mathbf{V} + (\hat{c}_1 a - 1)|1\rangle\langle 1| + (\hat{c}_2 a - 1)|N\rangle\langle N| \quad (3.51)$$

diese Eigenschaften erfüllt. $\mathbf{V} = \text{diag}(V_1, V_2, \dots, V_N)$ ist dabei die diagonale Potentialmatrix und \mathbf{D}^2 die tridiagonale diskrete Version der zweiten Ableitung

$$\mathbf{D}^2 = \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & 1 & \\ & & & 1 & -2 \end{pmatrix}. \quad (3.52)$$

Die Wahl der beiden Eckelemente in Gleichung (3.51) garantiert die Einhaltung der geforderten Robin-Randbedingungen. Dies lässt sich leicht überprüfen, indem man die reine Ableitungsmatrix $\mathbf{H} - \mathbf{V}$ auf einen diskretisierten Eigenvektor $|\nu\rangle$ mit den Komponenten $\langle l|\nu\rangle \equiv \varphi_{\nu,l}$ und dem Eigenwert ε_ν anwendet. Es ergibt sich die Eigenwertgleichung

$$\langle l|(\mathbf{H} - \mathbf{V})|\nu\rangle = \varepsilon_\nu \langle l|\nu\rangle \quad (3.53)$$

oder — komponentenweise geschrieben —

$$\begin{aligned}
 (\varphi_{\nu,1} - \varphi_{\nu,2} + \mathring{c}_1 a) &= \varepsilon_\nu \varphi_{\nu,1}, \quad l = 1, \\
 (-\varphi_{\nu,l-1} + 2\varphi_{\nu,l} - \varphi_{\nu,l+1}) &= \varepsilon_\nu \varphi_{\nu,l}, \quad l = 2, \dots, N-1, \\
 (\varphi_{\nu,N} - \varphi_{\nu,N-1} + \mathring{c}_2 a) &= \varepsilon_\nu \varphi_{\nu,N}, \quad l = N.
 \end{aligned} \tag{3.54}$$

Multipliziert man die zweite Gleichung mit $1/a^2$ und reskaliert den Eigenwert ε_ν gemäß $\tilde{\varepsilon}_\nu = \varepsilon_\nu/a^2$, so geht die zweite Gleichung im Limes $a \rightarrow 0$ in die Eigenwertgleichung der kontinuierlichen zweiten Ableitung mit den endlichen Eigenwerten $\tilde{\varepsilon}_\nu$ über. Nach Multiplikation der ersten und der dritten Zeile mit $1/a$ erhält man hier aus dem Differenzenquotienten die erste Ableitung. Aus $\varphi_{\nu,l}$ wird $\varphi_\nu(z)$ mit $z = (l - 1/2)a$. Dies bedeutet, dass $\varphi_{\nu,1} \rightarrow \varphi_\nu(0)$ und $\varphi_{\nu,N} \rightarrow \varphi_\nu(L)$ wird. Mit $\lim_{a \rightarrow 0}[a\tilde{\varepsilon}_\nu\varphi_\nu(0)] = \lim_{a \rightarrow 0}[a\tilde{\varepsilon}_\nu\varphi_\nu(L)] = 0$ ergeben sich die Gleichungen

$$\begin{aligned}
 (\partial_z - \mathring{c}_1) \varphi_\nu(0) &= 0 \\
 -\partial_z^2 \varphi_\nu(z) &= \tilde{\varepsilon}_\nu \varphi_\nu(z) \\
 (\partial_z + \mathring{c}_2) \varphi_\nu(L) &= 0.
 \end{aligned} \tag{3.55}$$

Der Ableitungsmatrix $-\mathbf{D}^2 + (\mathring{c}_1 a - 1)|1\rangle\langle 1| + (\mathring{c}_2 a - 1)|N\rangle\langle N|$ geht also — wie gefordert — im Kontinuumslimit in die zweite Ableitung mit Robin-Randbedingungen über.

Aus der exakten Lösung des halbumendlichen Modells kann zudem geschlossen werden, dass sich V_l auf Skalen der Ordnung $a \lesssim z \ll L, a|a^2\tau|^{-\nu}$ wie $V_l \sim (z/a)^{-2}$ verhalten muss. Daher sollte $a^{-2}V_l$ im Kontinuumslimit eine stetige Funktion $V(z)$ werden und die vorangegangene Argumentation kann auf die gesamte Schrödinger-Gleichung mit einem nichtverschwindenden Potential ausgeweitet werden.

Im Folgenden beschränkt sich diese Arbeit auf den dreidimensionalen Fall $d = 3$. Hier gibt es keinen speziellen Oberflächenübergang für endliche Temperaturen $T > 0$, da die zweidimensionale Oberfläche aufgrund des Mermin-Wagner-Theorems keine eigenständige langreichweitige Ordnung aufweisen kann. Somit spielt die Wahl der Oberflächenkopplungen \mathring{c}_j keine Rolle. Der Einfachheit halber wird daher

$$\mathring{c}_1 a = \mathring{c}_2 a = 1 \tag{3.56}$$

gewählt. Für diese spezielle Wahl reduziert sich die Schrödinger-Matrix (3.51) zu

$$\mathbf{H} = -\mathbf{D}^2 + \mathbf{V}. \tag{3.57}$$

Sie kann wie folgt interpretiert werden: Die Größe $1/\mathring{c}_j$ kann als Extrapolationslänge verstanden werden, da die lineare Extrapolation der Funktion $\varphi_\nu(z)$ mit Robin-Randbedingungen

$$\partial_z \log \varphi_\nu(z)|_{z_j} = \mathring{c}_j, \quad j = 1, 2 \quad (3.58)$$

mit $z_1 = a/2$ und $z_2 = L - a/2$ für $z = a/2 - 1/\mathring{c}_1$ und $z = L - a/2 + 1/\mathring{c}_2$ verschwindet. Wählt man die \mathring{c}_j gemäß Gleichung (3.56), so verschwinden die Eigenfunktionen bei $z = -a/2$ und $z = L + a/2$. Im Limes $a \rightarrow 0$ gelten damit Dirichlet-Randbedingungen auf den Rändern des kontinuierlichen Intervalls $[0, L]$. Diese Eigenschaft der Matrix \mathbf{D}^2 wird zum Beispiel bei der Berechnung von Pfadintegralen mit Hilfe des Gelfand-Yaglom-Theorems ausgenutzt (siehe zum Beispiel [157] oder Kapitel 2.7 in [158]). In Kapitel 3.6 wird anhand der Selbstkonsistenzgleichung explizit gezeigt, dass die Skalenfunktionen in drei Dimensionen unabhängig von den \mathring{c}_j sind.

An den vorangegangenen Überlegungen erkennt man, dass die Definition der Dicke des diskretisierten Films nicht eindeutig ist. Bei der oben beschriebenen Diskretisierung könnte die Filmdicke zum Beispiel auch als Abstand zwischen der ersten und der letzten Lage definiert werden. Damit würde man für dasselbe System die Dicke $\tilde{L} = L - a$ statt L erhalten. Alternativ könnte die Filmdicke als Abstand zwischen den Punkten definiert werden, bei denen die linearen Extrapolationen (3.58) verschwinden. Damit ergäbe sich eine Dicke von $\tilde{L} = L + a + 1/\mathring{c}_1 + 1/\mathring{c}_2$. In der Auswertung der numerischen Daten wird dieses Problem dadurch gelöst, dass eine effektive Filmdicke L_{eff} definiert wird. Diese wird so gewählt, dass die führenden Korrekturen zum Skalenverhalten verschwinden. Wie sich dabei herausstellt, kann allein damit ein wesentlicher Anteil der Korrekturen unterdrückt werden.

Zudem wird die Gitterkonstante im Folgenden auf eins gesetzt, so dass das Modell aus $N = L$ Lagen an den Orten $z = 1/2, 3/2, \dots, L - 1/2$ besteht. Auch dies bedeutet keine Einschränkung der Ergebnisse, da diese unabhängig von a sind. Im Folgenden wird die Bezeichnung z für die j -te Schicht verwendet. Für das Potential sei also $V_z \equiv V_l$, so dass $z = 1, \dots, L$ die Schichten durchzählt.

Aus der Schrödingergleichung (3.20) wird damit eine gewöhnliche Matrix-Eigenwertgleichung

$$\mathbf{H}|\nu\rangle = \varepsilon_\nu|\nu\rangle, \quad \nu = 1, 2, \dots, L. \quad (3.59)$$

Statt aus abzählbar unendlich vielen Eigenwerten bei der kontinuierlichen Schrödingergleichung besteht das Spektrum nur noch aus L Eigenwerten. Sie sind nicht entartet und die zugehörigen Eigenzustände somit vollständig und können so gewählt werden, dass sie

ein Orthonormalsystem bilden. Es gilt also

$$\sum_{\nu=1}^L |\nu\rangle\langle\nu| = \sum_{z=1}^L |z\rangle\langle z| = \mathbf{1} \quad (3.60)$$

sowie

$$\langle\nu|\nu'\rangle = \langle z|z'\rangle = \delta_{\nu,\nu'}. \quad (3.61)$$

Um die führenden UV-Singularitäten in Gleichung (3.21) zu beseitigen, muss — analog zu den Rechnungen im *Bulk*-Fall — die kritische Temperatur $\hat{\tau}_c$ auf beiden Seiten subtrahiert werden. Darauf wurde bereits in Abschnitt 3.2 hingewiesen. Im Folgenden soll nun gezeigt werden, dass das in Gleichung (3.42) auftretende Integral (3.41) für die hier verwendete Diskretisierung endlich ist. Dabei ist die in (3.41) auftretende Dispersionsrelation durch Gleichung (3.39) gegeben.

Das Integral

$$I_L(z) = \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \left[\sum_{\nu=1}^L \frac{\langle z|\nu\rangle\langle\nu|z\rangle}{\mathbf{p}^2 + \varepsilon_\nu} - \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} \frac{1}{\mathbf{p}^2 + 4 \sin^2\left(\frac{k}{2}\right)} \right] \quad (3.62)$$

lässt sich leicht berechnen und ergibt den Ausdruck (siehe Anhang A.4)

$$\tau - V_z = \frac{g}{6} A_{d-1} \sum_{\nu=1}^L \langle z|\nu\rangle\langle\nu|z\rangle \left[\varepsilon_\nu^{\frac{d-3}{2}} - \frac{2^d \Gamma\left(\frac{d-2}{2}\right)}{8\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} \right]. \quad (3.63)$$

Es ist für $2 < d < 5$ UV-konvergent und vereinfacht sich in drei Dimensionen zu

$$\tau - V_z = \frac{g}{24\pi} \sum_{\nu=1}^L \langle z|\nu\rangle\langle\nu|z\rangle \log \varepsilon_\nu, \quad (3.64)$$

beziehungsweise

$$\tau - V_z = \frac{g}{24\pi} \langle z|\log \mathbf{H}|z\rangle. \quad (3.65)$$

Dabei wurde die Vollständigkeit der Eigenzustände $\langle\nu|z\rangle$ verwendet. Das Potential V_z sowie die Parameter L , g und τ wurden dabei so mit der Gitterkonstanten a reskaliert, dass sie nun dimensionslos sind.⁴

Aus Gleichung (3.65) lässt sich also numerisch für gegebene Werte von L , τ und g das Potential V_z bestimmen.

⁴Wegen $a = 1$ soll auf eine Unterscheidung zwischen dimensionslosen und dimensionsbehafteten Größen verzichtet werden. Sie werden mit denselben Symbolen bezeichnet.

3.3.1 Berechnung der Exzess-Freien-Energie

Im vorangegangenen Kapitel wurde die regularisierte Selbstkonsistenzgleichung für das Potential V_z hergeleitet. Um aus diesem Potential die freie Energie des diskretisierten Films berechnen zu können, muss noch Gleichung (3.22) diskretisiert und ausgewertet werden. Dies soll im folgenden Abschnitt geschehen.

Freie Energie des Films

Durch die Einführung einer Diskretisierung gibt es statt abzählbar unendlich vieler Eigenwerte des Schrödinger-Operators \hat{H} nur noch L Eigenwerte der $L \times L$ -Matrix \mathbf{H} . Daher wird aus der Summe $\sum_{\nu=1}^{\infty}$ in Gleichung (3.22) eine Summe $\sum_{\nu=1}^L$. Diese endliche Summe muss damit nicht regularisiert werden. Zudem wird aus dem Integral über das Intervall $[0, L]$ eine Summe über die Stützstellen der Diskretisierung: $\int_0^L dz f(z) \rightarrow \sum_{z=1}^L f_z$. Es bleibt also nur die Berechnung des Impuls-Integrals in dimensioneller Regularisierung. Dies kann zum Beispiel durch Einfügen der partiellen- \mathbf{p} -Identität (siehe zum Beispiel [159])

$$1 = \frac{\nabla_{\mathbf{p}} \mathbf{p}}{d-1} \quad (3.66)$$

in den Integranden von (3.22) und anschließender partieller Integration berechnet werden. Setzt man zudem $\dot{\tau} = \dot{\tau}_c + \tau$ mit der *Bulk*-kritischen Temperatur $\dot{\tau}_c$ aus Gleichung (3.37) und der Gitterdispersion (3.39), so ergibt sich

$$f_L = -\frac{A_{d-1}}{d-1} \sum_{\nu=1}^L \varepsilon_{\nu}^{\frac{d-1}{2}} - \frac{3}{2g} \sum_{z=1}^L \left(\tau + \frac{g}{6} A_{d-1} I_d(0) - V_z \right)^2. \quad (3.67)$$

Dabei wurden die in Appendix A.4 untersuchten Funktionen gemäß

$$I_D(r) = \int_0^{\pi} \frac{dk}{\pi} \left[4 \sin^2 \left(\frac{k}{2} \right) + r \right]^{\frac{D-3}{2}} \quad (3.68)$$

definiert.

Dieser Ausdruck für die freie Energie enthält zunächst noch Polterme in $d = 3$ und muss daher noch renormiert werden. Bevor dies durchgeführt wird, soll jedoch erst der Ausdruck für die freie Energie des *Bulk*-Systems hergeleitet werden.

Bulk-freie Energie

Zur Berechnung der freien Energie des in z -Richtung diskretisierten *Bulk*-Systems kann Gleichung (3.22) mit der Bedingung (3.21) und der Schrödinger-Gleichung (3.20) ver-

wendet werden. Wie schon bei der Bestimmung der freien Energie des Films zerfällt das Problem in zwei Teile: Zuerst muss das Potential aus der Selbstkonsistenzgleichung bestimmt werden, dann kann daraus die freie Energie berechnet werden.

Aufgrund der Translationsinvarianz des *Bulk*-Systems in allen Richtungen ist das Potential unabhängig von z , $V_b(z) = r_b$. Mit dieser Bedingung kann die Schrödinger-Gleichung (3.59) im translationsinvarianten *Bulk*-Limes $L \rightarrow \infty$ direkt gelöst werden. Die Eigenfunktionen sind ebene Wellen

$$\phi_k(z_n) = c_1 e^{ikz_n} + c_2 e^{-ikz_n}. \quad (3.69a)$$

Durch Einsetzen dieses Ansatzes in Gleichung (3.59) erhält man den Zusammenhang zwischen den Eigenenergien ε und den Wellenzahlen k :

$$\varepsilon_b^{lc} = r_b + 4 \sin^2 \left(\frac{k}{2} \right), \quad -\pi < k \leq \pi. \quad (3.69b)$$

Aus dem diskreten Spektrum für endliche Filmdicken wird im thermodynamischen Limes ein kontinuierliches Spektrum. Dementsprechend wird aus der Summe in Gleichung (3.63) ein Integral über die erste Brillouin-Zone

$$\frac{1}{L} \sum_{\nu} \longrightarrow \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi}. \quad (3.70)$$

Einsetzen des Eigensystems (3.69) in die Selbstkonsistenzgleichung ergibt dann

$$\tau - r_b = -\frac{g}{6} \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \int_0^{\pi} \frac{dk}{\pi} \left[\frac{1}{\mathbf{p}^2 + r_b + 4 \sin^2 \left(\frac{k}{2} \right)} - \frac{1}{\mathbf{p}^2 + 4 \sin^2 \left(\frac{k}{2} \right)} \right]. \quad (3.71)$$

Das \mathbf{p} -Integral ist UV-konvergent in $d = 3$ und kann sofort berechnet werden. Anschließendes Ausführen des k -Integrals liefert

$$\tau - r_b = \frac{g}{6} A_{d-1} [I_d(r_b) - I_d(0)]. \quad (3.72)$$

Zur Entwicklung um $d = 3$ werden wegen

$$A_{d-1} = \frac{1}{2\pi(d-3)} + \frac{\gamma_E - \log(4\pi)}{4\pi} + O(d-3) \quad (3.73)$$

die linearen Terme der Entwicklung von $I_d(r_b)$ und $I_d(0)$ um $d = 3$ benötigt. Diese werden in Appendix A.4 bestimmt. Einsetzen liefert

$$r_b = \begin{cases} \tau - \frac{g}{12\pi} \operatorname{arsinh}\left(\frac{\sqrt{r_b}}{2}\right) & \text{für } \tau > 0 \\ 0 & \text{für } \tau \leq 0 \end{cases}. \quad (3.74)$$

Dass $r_b = 0$ für $\tau < \tau_c$ ist, folgt sofort aus den in Abschnitt 3.2 angestellten Überlegungen. Der nächste Schritt zur Bestimmung des *Bulk*-Anteils der freien Energie ist dann die Berechnung des Impuls-Integrals in (3.22). Dies erfolgt analog zu der Rechnung für den Film durch Einführung der partiellen- \mathbf{p} Identität und ergibt — ausgedrückt durch die Funktion $I_D(r)$ —

$$\begin{aligned} f_b &= -\frac{A_{d-1}}{d-1} \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} \left[r_b + 4 \sin^2\left(\frac{k}{2}\right) \right]^{\frac{d-1}{2}} - \frac{3}{2g} \left(\tau + \frac{g}{6} A_{d-1} I_d(0) - r_b \right)^2 \\ &= -\frac{A_{d-1}}{d-1} I_{d+2}(r_b) - \frac{3}{2g} \left(\tau + \frac{g}{6} A_{d-1} I_d(0) - r_b \right)^2. \end{aligned} \quad (3.75)$$

Auch dieser Ausdruck enthält offensichtlich noch Polterme in $d = 3$. Im nächsten Abschnitt soll die Renormierung von f_L und f_b durchgeführt werden.

Renormierung der freien Energien

Wie bereits erwähnt, enthalten sowohl die freie Energie des Films als auch die freie Energie des *Bulk*-Systems noch Polterme in drei Dimensionen. Mit den Gleichungen (3.73) und (A.71) für die Entwicklungen der Koeffizienten A_{d-1} und des Integrals $I_{d+2}(r)$ lassen sich die Polterme von f_b direkt angeben. Sie lauten:

$$f_b = -\frac{g}{96\pi^2(d-3)^2} + \frac{g[\log(4\pi) - \gamma_E] - 24\pi(2+\tau)}{96\pi^2(d-3)} + O[(d-3)^0]. \quad (3.76)$$

Die Polterme von f_L lassen sich ebenso angeben. Mit Hilfe der Spur-Identität

$$\sum_{\nu=1}^L \varepsilon_\nu = \operatorname{Sp} \mathbf{H} = 2L + \sum_{z=1}^L V_z \quad (3.77)$$

lässt sich leicht zeigen, dass

$$f_L = Lf_b + O[(d-3)^0] \quad (3.78)$$

gilt. Die freie Energie des Films und der *Bulk*-Anteil der freien Energie weisen also die gleichen Divergenzen auf. Daraus folgt unmittelbar, dass die Exzess-Freie-Energie f_{ex} in

drei Dimensionen endlich ist und nicht weiter renormiert werden muss:

$$\begin{aligned} f_{\text{ex}}(L, \tau, g) &\equiv f_{\text{ex}}^{\text{ren}}(L, \tau, g) \\ &= f_L(\tau, g) - Lf_b(\tau, g). \end{aligned} \quad (3.79)$$

Es ist jedoch auch möglich, f_L und f_b einzeln zu renormieren. Gemäß Gleichung (3.76) sind die Polterme erster und zweiter Ordnung unabhängig von beziehungsweise linear in der Temperatur τ . Daher lassen sich diese UV-Singularitäten entfernen, wenn von f_L und f_b die lineare Entwicklung des *Bulk*-Anteils der freien Energie in τ

$$S(\tau, g) = f_b(0, g) + \tau \left(\frac{\partial f_b}{\partial \tau} \right) (0, g) \quad (3.80)$$

subtrahiert wird. Die renormierte freie Energie des Films lautet dann

$$f_L^{\text{ren}}(\tau, g) = f_L(\tau, g) - LS(\tau, g) \quad (3.81a)$$

und die freie Energie des *Bulk*-Systems

$$f_b^{\text{ren}}(\tau, g) = f_b(\tau, g) - S(\tau, g). \quad (3.81b)$$

Die explizite Berechnung der Funktion $S(\tau, g)$ ist relativ aufwendig. Mit $r_b(0) = 0$ ergibt sich zunächst für den ersten Term

$$f_b(0, g) = -\frac{A_{d-1}}{d-1} I_{d+2}(0) - \frac{g}{24} A_{d-1}^2 [I_d(0)]^2. \quad (3.82)$$

Zur Berechnung des zweiten Terms muss berücksichtigt werden, dass das *Bulk*-Potential r_b eine Funktion von τ ist. Daher werden auch die Ableitungen $r'_b(0)$ benötigt. Diese erhält man durch Ableiten von Gleichung (3.72) nach τ . Es ergibt sich mit der Identität

$$\frac{\partial I_D(r)}{\partial r} = \frac{D-3}{2} I_{D-2}(r) \quad (3.83)$$

der Ausdruck

$$r'_b(0) = \left[1 + \frac{d-3}{2} \frac{g}{6} A_{d-1} I_{d-2}(0) \right]^{-1}, \quad (3.84)$$

womit sich der zweite Term von $S(\tau, g)$ gemäß

$$\frac{\partial f_b}{\partial \tau}(0, g) = -\frac{A_{d-1}}{2} r'_b(0) I_d(0) - \frac{1}{2} [1 - r'_b(0)] A_{d-1} I_d(0) \quad (3.85)$$

schreiben lässt. Die explizite Form der Integrale $I_D(0)$ findet sich in Appendix A.4 als Gleichung (A.59). Zusammen mit den dort ebenfalls berechneten Entwicklungen von $I_D(r)$ in D ergibt sich der explizite Ausdruck von f_b^{ren} in drei Dimensionen

$$f_b^{\text{ren}}(\tau, g) = \frac{1}{8\pi} \sqrt{r_b(r_b + 4)} - \frac{r_b + 2}{4\pi} \operatorname{arsinh} \left(\frac{\sqrt{r_b}}{2} \right) - \frac{3}{2g} (\tau - r_b)^2, \quad (3.86)$$

was sich unter Benutzung der Bestimmungsgleichung (3.74) für r_b noch weiter vereinfachen lässt:

$$f_b^{\text{ren}}(\tau, g) = \begin{cases} \frac{1}{8\pi} \sqrt{r_b(r_b + 4)} + \frac{3}{2g} (r_b - \tau)(r_b + \tau + 4) & \text{für } \tau > 0 \\ -\frac{3}{2g} \tau^2 & \text{für } \tau \leq 0 \end{cases}. \quad (3.87)$$

Im Einklang mit der Definition von f_b^{ren} gemäß Gleichungen (3.81b) und (3.80) erfüllt f_b^{ren} nach Gleichung (3.87) die Eigenschaften $f_b^{\text{ren}}(0, g) = \partial_\tau f_b^{\text{ren}}(0, g) = 0$.

Die explizite Formel für $f_L^{\text{ren}}(\tau, g)$ lässt sich mit erneuter Anwendung der Identität (3.77) umformen zu⁵

$$f_L^{\text{ren}}(\tau, g) = \frac{1}{8\pi} \sum_{\nu=1}^L \varepsilon_\nu (1 - \log \varepsilon_\nu) - \frac{3}{2g} \sum_{z=1}^L (\tau - V_z)^2 \quad (3.88a)$$

$$= \frac{1}{8\pi} \operatorname{Sp} [\mathbf{H} \cdot (1 - \mathbf{H})] - \frac{3}{2g} \sum_{z=1}^L (\tau - V_z)^2. \quad (3.88b)$$

Die Abzüge bei der Definition in den Gleichungen (3.81) heben sich offensichtlich bei der Berechnung der renormierten Exzess-Freien-Energie weg, sodass diese davon unberührt bleibt.

Die in diesem Kapitel hergeleiteten Formeln für die renormierten freien Energien f_L^{ren} und f_b^{ren} sowie die zugehörigen Potentiale V_z und r_b enthalten nun in drei Dimensionen keine Divergenzen mehr. Insbesondere sind die verbleibenden Summen über das Spektrum ε_ν endlich. Daher eignen sie sich sofort zur numerischen Berechnung der Exzess-Freien-Energie $f_{\text{ex}}^{\text{ren}}(L, \tau, g)$. Dies soll im folgenden Kapitel zunächst am kritischen Punkt $\tau = 0$ geschehen.

3.4 Numerik I: Casimir-Amplitude für endliche g

Statt direkt die Skalenfunktion für den gesamten Temperaturbereich zu bestimmen, ist es sinnvoll, zunächst die Casimir-Amplitude Δ_C — also den Wert der Skalenfunktion der frei-

⁵Hier und im Folgenden wird die Notation $\mathbf{A} + b \equiv \mathbf{A} + \mathbf{1} b$ verwendet.

en Energie am *Bulk*-kritischen Punkt — zu berechnen. Dabei bekommt man bereits einen guten Einblick in die bei diesem System auftretenden Korrekturen zum Skalenverhalten. Das hier erlangte Wissen wird dann bei der Bestimmung der vollständigen Skalenfunktion sehr hilfreich sein.

Zur Berechnung der Casimir-Amplitude muss die im letzten Kapitel hergeleitete Gleichung für das Potential V_z numerisch gelöst werden. Daraus lässt sich dann die freie Energie bestimmen.

Am *Bulk*-kritischen Punkt gilt $\tau = 0$. Gemäß Gleichungen (3.74) und (3.87) gilt hier $r_b = 0$ und somit auch $f_b^{\text{ren}}(0, g) = 0$. Die freie Energie des Films setzt sich also nur aus dem *Finite-Size*-Anteil f_{res} und den Oberflächenanteilen f_s zusammen. Das Potential des Films erfüllt für $\tau = 0$ die Gleichung

$$V_z = -\frac{g}{24\pi} \langle z | \log \mathbf{H} | z \rangle. \quad (3.89)$$

Die in diesem Kapitel präsentierten Ergebnisse resultieren aus der numerischen Lösung dieser Gleichung für alle Kombinationen (L, g) mit den Werten $L \in \{2^2, 2^3, \dots, 2^{11}\}$ und $g \in \{2^0, 2^1, 2^2, \dots, 2^9, \infty\}$ mit Hilfe des Computer-Programms MATHEMATICA [160]. Der Fall $g \rightarrow \infty$ ist offenbar als Grenzwert zu verstehen. Es ergibt sich hier die Gleichung⁶

$$0 = \langle z | \log \mathbf{H} | z \rangle. \quad (3.90)$$

Die Lösung der Selbstkonsistenzgleichung kann als Nullstellensuche im L -dimensionalen Raum der Potentiale V_z verstanden werden

$$G[V_z] \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.91)$$

und dementsprechend mit der MATHEMATICA-Routine FindRoot[$G[V_z], \{V_z, V_{z,0}\}$] gefunden werden. Dabei ist es sinnvoll, die Symmetrie des Systems $V_z = V_{L+1-z}$ auszunutzen und das Problem somit auf eine Nullstellensuche im $L/2$ -dimensionalen Raum zu reduzieren. Bei der Implementierung dieser Nullstellensuche ist die Wahl des Startwertes $V_{z,0}$ von entscheidender Bedeutung für die Numerik. Die Zahl der intern durchgeführten Rechenschritte und damit auch die Rechenzeit kann dadurch stark verringert werden.

Die so gewonnenen Potentiale V_z sind in Abbildung 3.1 dargestellt. In einer doppellogarithmischen Auftragung ist hier das mit $1/g^2$ skalierte Potential gegen gz für $z = 1, 2, \dots, L/2$ aufgetragen. Man erkennt deutlich einen *Crossover* von einem Verhalten $V_z \approx -g/48\pi z$

⁶Voraussetzung dafür ist die Eigenschaft des Potentials $\lim_{g \rightarrow \infty} V_z/g = 0$, was mit den numerischen Ergebnissen für große, endliche Werte von g im Einklang ist.

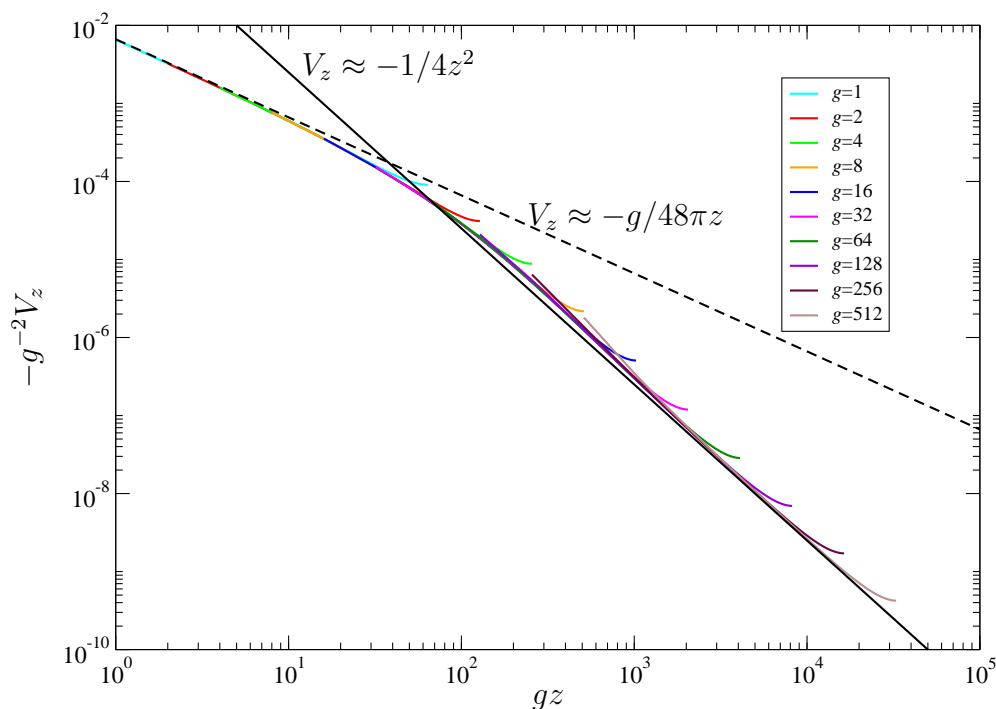


Abbildung 3.1: Doppellogarithmischer Skalenplot für das kritische Potential V_z mit $L = 128$ und $g = 1, 2, 4, 8, \dots, 512$. Ein *Crossover* vom z^{-1} - zum z^{-2} -Verhalten erfolgt bei $z = z^\times \simeq 12\pi/g$ (siehe Text).

für kleine gz zu der exakten Lösung des kontinuierlichen halboneendlichen Modells $V_z \approx -1/4z^2$. Der *Crossover* findet bei $z^\times \simeq 12\pi/g$ statt. Abbildung 3.2 zeigt zudem einen doppellogarithmischen Skalenplot für das kritische Potential V_z , $z = 1, 2, \dots, L/2$, mit $g = 512$ und $L = 32, 64, \dots, 2048$.

Nach Gleichung (3.88a) kann aus den numerisch bestimmten Potentialen die freie Energie berechnet werden:

$$f_{\text{ex}}(L, 0, g) = f_L^{\text{ren}}(0, g) = \frac{1}{8\pi} \sum_{\nu=1}^L \varepsilon_\nu (1 - \log \varepsilon_\nu) - \frac{3}{2g} \sum_{z=1}^L V_z^2. \quad (3.92)$$

Dazu müssen also nur die Eigenwerte ε_ν der Hamilton-Matrix \mathbf{H} bestimmt werden. Da die freie Energie bei $\tau = 0$ nur aus *Finite-Size*- und Oberflächentermen besteht, gilt für große L

$$f_L^{\text{ren}}(0, g) = 2f_s(0, g) + \Delta_C/L^2 + o(L^{-2}). \quad (3.93)$$

Definiert man die effektive Casimir-Amplitude $\tilde{\Delta}_C(L, g)$ als

$$\tilde{\Delta}_C(L, g) = L^2 [f_L^{\text{ren}}(0, g) - 2f_s(0, g)], \quad (3.94)$$

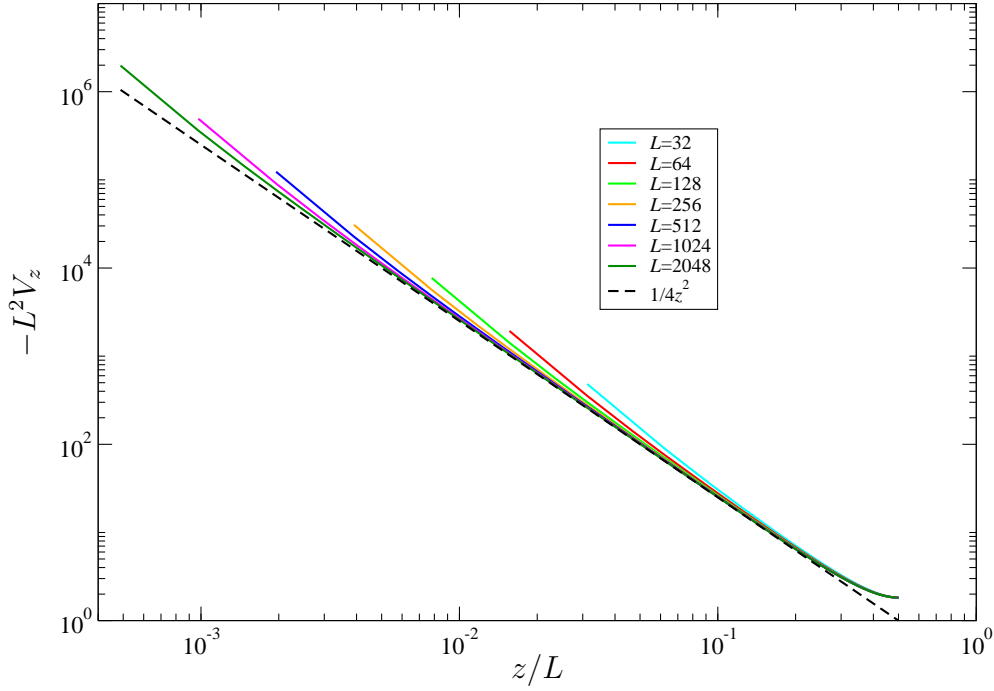


Abbildung 3.2: Doppellogarithmischer Skalenplot für das kritische Potential V_z mit $g = 512$ und $L = 32, 64, \dots, 2048$.

so lässt sich die Casimir-Amplitude Δ_C schreiben als

$$\Delta_C = \lim_{L \rightarrow \infty} \tilde{\Delta}_C(L, g). \quad (3.95)$$

Abbildung 3.3 zeigt die effektive Casimir-Amplitude für verschiedene Werte der Kopplungskonstanten g , aufgetragen gegen $1/L$. In dieser Auftragung ist die Casimir-Amplitude der Ordinatenabschnitt der Kurven. Offensichtlich ist dieser unabhängig von der Kopplungskonstanten g , was seine Ursache in der Universalität von Δ_C hat. Zudem erkennt man aber eine starke Abhängigkeit der Stärke der Konvergenz von der Wahl der Kopplungskonstanten: Während für große Werte von $g \gtrsim 64$ die Abweichung vom Grenzwert schon für relativ kleine Systeme $L \simeq 128$ weniger als 7% beträgt, müssen zum Beispiel für $g = 4$ Systemgrößen bis zu $L = 2048$ gerechnet werden, um eine ähnliche Genauigkeit zu erzielen. Für $g \leq 1$ wird die Konvergenz noch schlechter. Aus dem Verhalten von $\tilde{\Delta}_C(L, 1)$ könnte für Systemgrößen $L \lesssim 64$ eine Amplitude von $-0.026(1)$ extrapoliert werden⁷. Dies weicht um mehr als einen Faktor zwei von dem korrekten Wert $\tilde{\Delta}_C(\infty, 1) = -0.0108(1)$ ab.

Die Minima der in Abbildung 3.3 gezeigten Kurven befinden sich bei $L_{\min} \simeq 24\pi/g$. Dies

⁷Für $g = 1$ wurde in [161] ein Wert von $\Delta_C = -0.0266$ gefunden. In [162] wurde dies zu $\Delta_C = -0.012(1)$ verbessert.

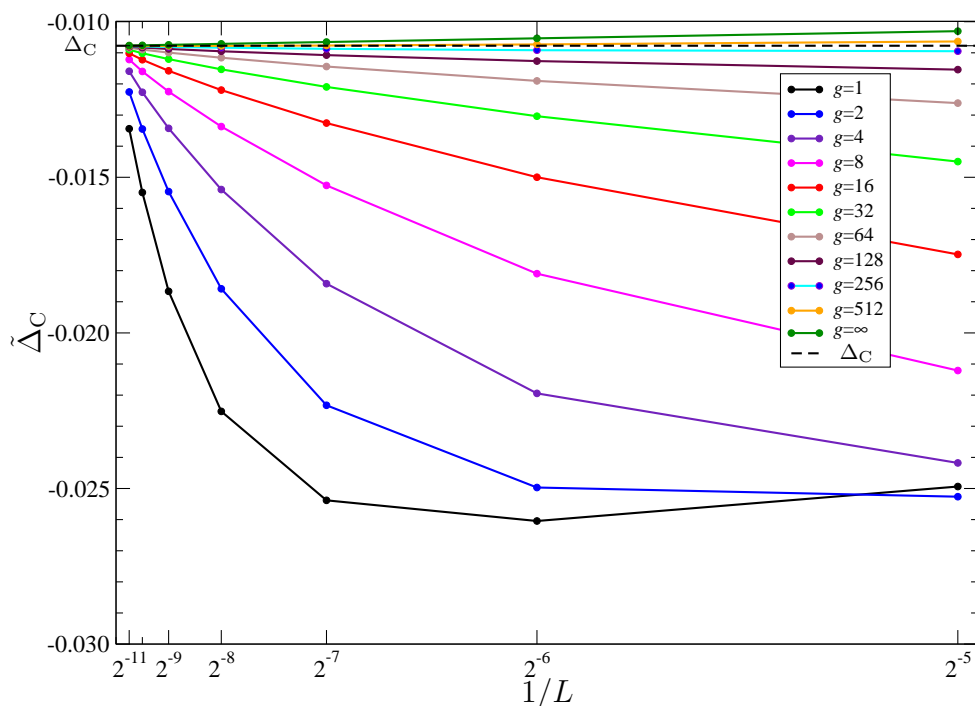


Abbildung 3.3: Effektive Casimir-Amplitude als Funktion von $1/L$ für verschiedene Werte der Kopplungskonstanten g .

kann mit dem im Verhalten der Potentiale beobachteten *Crossover* (siehe Abbildung 3.1) in Verbindung gebracht werden: Um für einen gegebenen Wert von g über das Minimum hinauszukommen, müssen Systemgrößen $L \gtrsim L_{\min}$ berücksichtigt werden. Ab dieser Wahl für L liegt der Großteil des zugehörigen Potentials, also die Punkte von V_z mit $z \gtrsim z^\times$, auf der Asymptoten $V_z \sim z^{-2}$. Aufgrund der Symmetrie von V_z gilt $L_{\min} = 2L^\times$. Für zu kleine Werte von L verhält sich das Potential wie $\sim z^{-1}$ und das System hat noch nicht das korrekte Skalenverhalten. In diesem Bereich dominieren also noch die Diskretisierungseffekte.

Um also bei einem vorgegebenen Wert für L_{\max} eine möglichst hohe Genauigkeit bei der Bestimmung der Casimir-Amplitude zu erzielen, muss die Kopplungskonstante sehr groß — also $g \simeq 512$ — gewählt werden. Aus den numerischen Ergebnissen ist ersichtlich, dass sowohl für das Potential als auch für die freie Energie sogar der Grenzwert $g \rightarrow \infty$ existiert. Dieser Fall wird später noch eine wichtige Rolle spielen.

Abbildung 3.4 zeigt eine Ausschnittsvergrößerung von Abbildung 3.3, in der die Konvergenz gegen die Casimir-Amplitude besser zu erkennen ist. Zusätzlich zu den numerischen Werten sind hier an die Daten angefitzte Funktionen der Form

$$\Delta_C + \frac{c_1}{L} + \frac{d_1}{gL} \log L \quad (3.96)$$

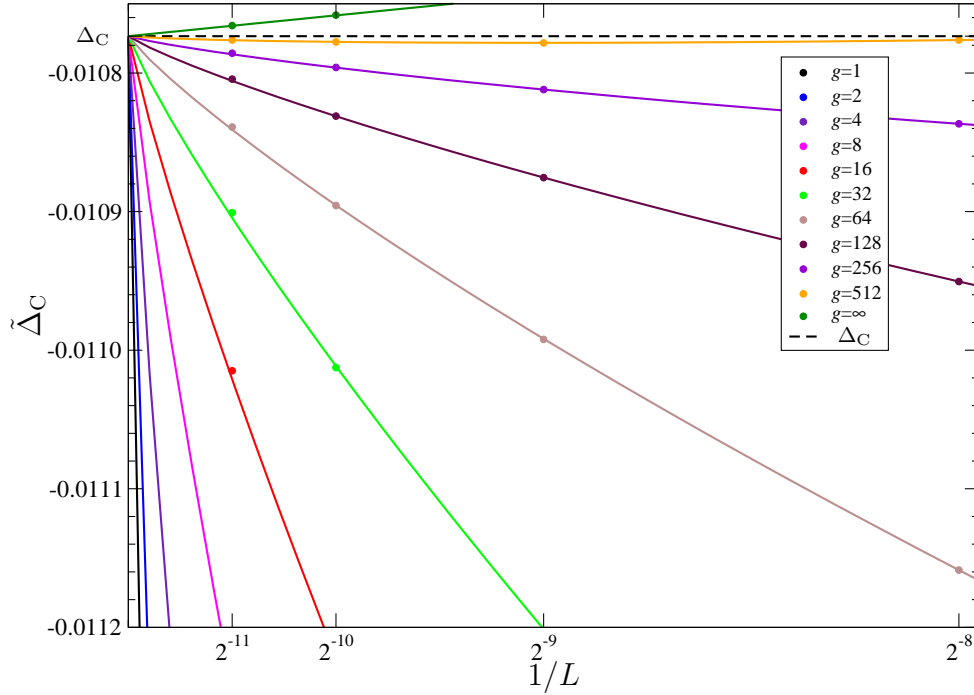


Abbildung 3.4: Ausschnittsvergrößerung von 3.3: Die Linien zeigen an die Daten gefittete Funktionen der Form $\Delta_C + c_1/L + d_1 \log(L)/gL$. Die logarithmischen Korrekturen verschwinden im Limes $g \rightarrow \infty$.

dargestellt. Die logarithmischen Korrekturen verschwinden für große g . Dies wird ersichtlich, wenn man die beiden Beiträge in Gleichung (3.92) zur freien Energie einzeln untersucht. Aus der Numerik erkennt man, dass der explizit g -abhängige Term keinen Beitrag zur Casimir-Amplitude liefert. In der Entwicklung für große L

$$f_{\text{ex}}^{(2)}(L, 0, g) = -\frac{3}{2g} \sum_{z=1}^L V_z^2 = c_0 + \frac{c_3}{L^3} \log\left(\frac{L}{L_0}\right) + O(L^{-4}) \quad (3.97)$$

treten also keine Terme $\propto L^{-2}$ auf. Daher ist es möglich, allein aus dem ersten Beitrag zur freien Energie

$$f_{\text{ex}}^{(1)}(L, 0, g) = \frac{1}{8\pi} \sum_{\nu=1}^L \varepsilon_\nu (1 - \log \varepsilon_\nu) \quad (3.98)$$

die Casimir-Amplitude zu bestimmen. Die numerischen Ergebnisse zeigen, dass dieser Beitrag keine logarithmischen Terme enthält. Die Auswertung der Daten gestaltet sich somit deutlich einfacher, wenn der zweite Beitrag vernachlässigt wird. Die so bestimmte Amplitude weist daher eine deutlich höhere Genauigkeit auf. In Tabelle 3.1 sind die Ergebnisse für die Exzess-Freien-Energien $f_{\text{ex}}(L, 0, g)$ und $f_{\text{ex}}^{(1)}(L, 0, g)$ für $g = 32$ und $L = 4, 8, \dots, 2048$ aufgelistet. Zusätzlich sind hier Abschätzungen für die Casimir-Amplitude

| $g = 32$ | | | | |
|----------|---------------------------|---------------------|---------------------------------|---------------------------|
| L | $f_{\text{ex}}(L, 0, 32)$ | Δ_{C} | $f_{\text{ex}}^{(1)}(L, 0, 32)$ | $\Delta_{\text{C}}^{(1)}$ |
| 2^2 | 0.033986923 | | 0.03697726312 | |
| 2^3 | 0.034730507 | | 0.03763498734 | |
| 2^4 | 0.034940507 | | 0.03779272647 | |
| 2^5 | 0.034990180 | | 0.03782727788 | |
| 2^6 | 0.035001152 | | 0.03783538961 | |
| 2^7 | 0.035003597 | -0.009556 | 0.03783738768 | -0.0109658366 |
| 2^8 | 0.035004159 | -0.010608 | 0.03783788490 | -0.0108180146 |
| 2^9 | 0.035004293 | -0.010813 | 0.03783800883 | -0.0107836748 |
| 2^{10} | 0.035004325 | -0.010795 | 0.03783803975 | -0.0107765624 |
| 2^{11} | 0.035004333 | -0.010781 | 0.03783804747 | -0.0107746967 |
| ∞ | 0.0350043353(1) | -0.01077(1) | 0.0378380500(1) | -0.0107735(10) |

Tabelle 3.1: Werte für $f_{\text{ex}}(L, 0, 32)$ sowie $f_{\text{ex}}^{(1)}(L, 0, 32)$ und die daraus bestimmten Abschätzungen für die Amplitude für $g = 32$.

Δ_{C} angegeben. Diese werden aus den Daten wie folgt gewonnen:

Fittet man Funktionen der Form

$$c_0 + \frac{c_2}{L^2} + \frac{c_3}{L^3} + \frac{d_3 \log L}{L^3} + \frac{c_4}{L^4} \quad (3.99)$$

an die Daten der freien Energie $f_{\text{ex}}(L, 0, g)$ sechs aufeinanderfolgender Systemgrößen, so lässt sich daraus die Amplitude bestimmen. Der Koeffizient c_2 ist dann die jeweilige Abschätzung für die Casimir-Amplitude. Die sich daraus ergebenden Werte für Δ_{C} stehen in Tabelle (3.1) in der dritten Spalte jeweils in der Zeile mit dem größten berücksichtigten L . So ergibt sich eine Folge von fünf Werten, die in der untersten Zeile nach $L \rightarrow \infty$ extrapoliert wird.

Zur Bestimmung der Amplitude aus $f_{\text{ex}}^{(1)}(L, 0, g)$ fittet man an die Daten aus der vierten Spalte der Tabelle für sechs aufeinanderfolgende Werte Funktionen der Form

$$f_L^{\text{ren}}(0, g) = 2f_s(0, g) + \Delta_{\text{C}}L^{-2} + \sum_{k=3}^6 f_k(g)L^{-k} \quad (3.100)$$

an. Auf diese Weise verifiziert man, dass in $f_{\text{ex}}(L, 0, g)$ keine logarithmischen Terme $L^{-k} \log L$ zusätzlich zu dem in $f_{\text{ex}}^{(2)}$ vorhandenen Term auftauchen. Die sich daraus ergebenden Abschätzungen für die Casimir-Amplitude und deren Extrapolation nach $L \rightarrow \infty$ sind in Spalte 5 von Tabelle 3.1 angegeben. Aufgrund der Abwesenheit von logarithmischen Korrekturen weisen diese gegenüber den aus f_{ex} bestimmten Werten eine deutlich höhere Genauigkeit auf. Diese Genauigkeit kann nochmals stark erhöht werden, wenn

deutlich größere Werte der Kopplungskonstanten g beziehungsweise der Limes $g \rightarrow \infty$ verwendet werden. Darauf wird — nach einem Exkurs über die theoretische Behandlung der Korrekturen zum Skalenverhalten — im übernächsten Kapitel eingegangen werden.

3.5 Einschub: Korrekturen zum Skalenverhalten

Eine entscheidende Schwierigkeit bei der numerischen Analyse der kritischen Eigenschaften des Modells hat sich im letzten Kapitel gezeigt: Zur präzisen Berechnung der Casimir-Amplitude ist die genaue Kenntnis des Verhaltens der Korrekturen zum Skalenverhalten vonnöten. Nur so können diese effektiv unterdrückt werden und eine effiziente Bestimmung der relevanten Größen aus möglichst kleinen Systemen wird damit erst möglich. Dieser Abschnitt der Arbeit ist den führenden Korrekturen zum Skalenverhalten im *Large- n* -Modell gewidmet. Der Schwerpunkt wird dabei auf den dreidimensionalen Fall gelegt.

Die Korrekturen zum Skalenverhalten können untersucht werden, wenn der Einfluss der verwendeten Regularisierung auf das Verhalten der *Bulk*-Funktion $I_b(r_b)$ (siehe Gleichung (3.30)) analysiert wird. Dazu orientiert sich die Argumentation im Folgenden an der Referenz [153, Seite 87 und Appendix A].

Die Regularisierung sei durch die *Cutoff*-Funktion $D(z)$ mit den Eigenschaften

$$D(0) = 1 \quad \text{und} \quad \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{z^{(d-2)/2}}{D(z)} = 0 \quad (3.101)$$

charakterisiert.⁸ Die *Cutoff*-regularisierte Version von $I_b(r_b)$ lässt sich dann schreiben als

$$\begin{aligned} I_b(r_b, \Lambda) &= \int_{\mathbf{p}}^{(d)} \left[\frac{1}{\mathbf{p}^2 D\left(\frac{\mathbf{p}^2}{\Lambda^2}\right) + r_b} - \frac{1}{\mathbf{p}^2 D\left(\frac{\mathbf{p}^2}{\Lambda^2}\right)} \right] \\ &= \Lambda^{d-2} \int_{\mathbf{p}}^{(d)} \left[\frac{1}{\mathbf{p}^2 D(\mathbf{p}^2) + x^2} - \frac{1}{\mathbf{p}^2 D(\mathbf{p}^2)} \right] \\ &= \Lambda^{d-2} I_b(x^2, 1), \end{aligned} \quad (3.102)$$

wobei $x^2 = r_b/\Lambda^2$ definiert wurde. Das Verhalten dieser Funktion soll nun abhängig von der Regularisierungsfunktion $D(z)$ untersucht werden. Dazu wird die Mellin-Transforma-

⁸Aufgrund der fehlenden Diskretisierungslänge sind die in diesem Kapitel vorkommenden Größen τ , r_b und g wieder dimensionsbehaftet.

tion [104, Kapitel 4.8]

$$M(s) = \int_0^\infty dx x^{-1-s} \int_{\mathbf{p}}^{(d)} \frac{1}{\mathbf{p}^2 D(\mathbf{p}^2) + x^2} \quad (3.103)$$

des x -abhängigen Anteils von I_b definiert. Für jeden Beitrag der Form x^α zu der Entwicklung für kleine x von I_b taucht in der Mellin-Transformation ein Polterm bei $s = \alpha$ auf. Das Residuum dieses Pols entspricht dann dem jeweiligen Entwicklungskoeffizienten. Auf diese Weise lässt sich die Potenzreihe in x von I_b bestimmen.

Mit der Substitution $x = z \mathbf{p}^2 D(\mathbf{p}^2)$ lässt sich Gleichung (3.103) auf die Form

$$M(s) = \int_0^\infty dz \frac{z^{-1-s}}{1+z^2} \int_{\mathbf{p}}^{(d)} [\mathbf{p}^2 D(\mathbf{p}^2)]^{-1-s/2} \quad (3.104)$$

bringen. Das Integral über z kann sofort berechnet werden [163, Gleichung 3.241 2.]. Man erhält damit den Ausdruck

$$M(s) = -\frac{\pi}{2 \sin(\pi s/2)} J_d(s), \quad (3.105)$$

wobei das Integral

$$J_d(s) = \int_{\mathbf{p}}^{(d)} [\mathbf{p}^2 D(\mathbf{p}^2)]^{-1-s/2} \quad (3.106)$$

definiert wurde.

In Gleichung (3.105) gibt es zwei unterschiedliche Quellen für Polterme: zum einen die zu den Nullstellen des Sinus gehörenden Pole

$$M(s) = (-1)^n J_d(2n) \frac{1}{2n-s} + O[(2n-s)^0] \quad (3.107)$$

und zum anderen die im Integral $J_d(s)$ enthaltenen IR-Divergenzen. Letztere können identifiziert werden, indem $D(\mathbf{p}^2)$ in \mathbf{p}^2 entwickelt wird und nur in der Umgebung von $\mathbf{p} = 0$ integriert wird:

$$J_d(s) \approx \frac{2}{(4\pi)^{d/2} \Gamma(d/2)} \int_0^1 dp p^{d-3-s} [D(\mathbf{p}^2)]^{-1-s/2} \quad (3.108)$$

$$= \frac{2}{(4\pi)^{d/2} \Gamma(d/2)} \left[\frac{1}{d-2-s} - \left(1 + \frac{d}{2}\right) D'(0) \frac{1}{d-s} + \dots \right]. \quad (3.109)$$

Die Auslassungspunkte stehen hier für weitere Polterme der Form $(d-2+2n-s)^{-1}$ mit $n = 2, 3, \dots$. Die Entwicklung des x -abhängigen Anteils von $I_b(x^2, 1)$ um $x = 0$ erhält

man durch Anwendung der inversen Mellin-Transformation. Sie lässt sich damit schreiben als

$$\int_{\mathbf{p}}^{(d)} \frac{1}{\mathbf{p}^2 D(\mathbf{p}^2) + x^2} = \sum_{n=0}^{\infty} [\alpha_n(d)x^{d-2+2n} + \beta_n(d)x^{2n}]. \quad (3.110)$$

Es bleibt also noch die Bestimmung der entsprechenden Entwicklungskoeffizienten. Die für $d > 2$ und kleine x führenden Terme in (3.110) sind

$$\int_{\mathbf{p}}^{(d)} \frac{1}{\mathbf{p}^2 D(\mathbf{p}^2) + x^2} = \beta_0(d) + \alpha_0(d)x^{d-2} + \beta_1(d)x^2 + O(x^d, x^4). \quad (3.111)$$

Der Koeffizient $\beta_0(d)$ kann direkt aus Gleichung (3.107) abgelesen werden und ergibt

$$\beta_0(d) = \int_{\mathbf{p}}^{(d)} \frac{1}{\mathbf{p}^2 D(\mathbf{p}^2)}. \quad (3.112)$$

$\alpha_0(d)$ ergibt sich aus (3.105) und (3.109) zu

$$\alpha_0(d) = -\frac{\pi}{2 \sin \left[\frac{\pi}{2}(d-2) \right]} \frac{2}{(4\pi)^{d/2} \Gamma(d/2)} = -A_d \quad (3.113)$$

und ist somit unabhängig von der *Cutoff*-Funktion $D(z)$, also universell. Der Vorfaktor des quadratischen Terms in (3.111) ist explizit von der Art des *Cutoffs* abhängig und somit nicht-universell. Es ergibt sich

$$\beta_1(d) = -J_d(2) = \begin{cases} -\int_{\mathbf{p}}^{(d)} \frac{1}{[\mathbf{p}^2 D(\mathbf{p}^2)]^2} & \text{für } d > 4 \\ \int_{\mathbf{p}}^{(d)} \left(\frac{1}{\mathbf{p}^4} - \frac{1}{[\mathbf{p}^2 D(\mathbf{p}^2)]^2} \right) & \text{für } d < 4 \end{cases}. \quad (3.114)$$

In vier Dimensionen hat $\beta_1(d)$ eine IR-Divergenz. Das Residuum ist identisch mit dem von A_d :

$$\beta_1(4 - \epsilon) = \frac{1}{8\pi^2 \epsilon} + O(\epsilon^0) = A_{4-\epsilon} + O(\epsilon^0). \quad (3.115)$$

Die gesuchte Potenzreihe von I_b lässt sich also schreiben als

$$I_b(r_b, \Lambda) = \Lambda^{d-2} [-A_d x^{d-2} - J_d(2)x^2 + O(x^d, x^4)]. \quad (3.116)$$

Abhängig von der *Cutoff*-Funktion $D(z)$ kann $-J_d(2)$ positiv oder negativ sein und sogar verschwinden. Der Einfluss dieses Koeffizienten auf die Korrekturen zum Skalenverhalten wird ausführlich in [153, Kapitel 2.4] diskutiert und soll hier nur kurz nachvollzogen

werden.

Aus Gleichungen (3.33) und (3.116) erhält man für $\sigma_0 = 0$ die bekannte Form der *Bulk*-Gleichung

$$\frac{\tau}{r_b} = 1 - \frac{g\beta_1(d)\Lambda^{-\epsilon}}{6} + \frac{g}{6}A_d r_b^{-\epsilon/2} + O\left(r_b^{1-\epsilon/2}/\Lambda^2\right). \quad (3.117)$$

Für kleine τ und r_b ergibt sich daraus

$$\tau \approx \frac{gA_d}{6}r_b^{1-\epsilon/2} \left[1 + \frac{6}{gA_d} \left(1 - \frac{g\beta_1(d)\Lambda^{-\epsilon}}{6} \right) r_b^{\epsilon/2} \right]. \quad (3.118)$$

Hier können sofort die $n \rightarrow \infty$ Standard-Ergebnisse

$$\gamma = 2\nu = \frac{2}{d-2} \quad (3.119)$$

sowie

$$\omega = 4 - d \quad (3.120)$$

für die kritischen Exponenten γ und ν sowie den *Corrections-To-Scaling*-Exponenten ω im *Large-n*-Limes abgelesen werden.

Wählt man nun in Gleichung (3.118) den speziellen Wert

$$g = g^* = \frac{6\Lambda^\epsilon}{\beta_1(d)} \quad (3.121)$$

der dimensionsbehafteten Kopplungskonstanten g , so verschwinden die Korrekturen zum Skalenverhalten $\propto r_b^{\epsilon/2}$. Dies ist jedoch nur möglich, wenn $\beta_1(d) \geq 0$, da die Kopplungskonstante immer größer als Null sein muss.

Diese Bedingung ist offensichtlich wegen Gleichung (3.115) für $4 - d \ll 1$ immer erfüllt. Abhängig von dem *Cutoff*-Verfahren kann dies jedoch in drei Dimensionen anders aussehen. Um dies zu verdeutlichen, soll nun der Koeffizient $\beta_1(d)$ für drei unterschiedliche *Cutoff*-Funktionen $D(z)$ berechnet werden.

- (i) Scharfer *Cutoff*: Die Impuls-Integration in Gleichung (3.114) ist auf die Hyperkugel $|\mathbf{p}| \leq \Lambda$ beschränkt. Die Integration kann sofort ausgeführt werden und ergibt für $d < 4$

$$\beta_1(d) = \frac{2}{(4\pi)^{d/2}\Gamma(d/2)} \int_1^\infty dp p^{d-5} = \frac{2}{(4\pi)^{d/2}\Gamma(d/2)} \frac{1}{\epsilon} \quad (3.122)$$

$$\stackrel{d \rightarrow 3}{=} \frac{1}{2\pi^2} > 0. \quad (3.123)$$

- (ii) Einfach kubisches Gitter in allen Richtungen: In drei Dimensionen kann die Funktion $I_b(r_b)$ durch die Watson-Integrale [156]

$$W_d(\lambda) \equiv \int_0^\pi \frac{dq_1}{\pi} \cdots \int_0^\pi \frac{dq_d}{\pi} \frac{1}{\lambda + 4 \sum_{i=1}^d \sin^2(q_i/2)} \quad (3.124)$$

ausgedrückt werden. Es folgt

$$I_b(r_b) \stackrel{d=3}{=} W_3(r_b) - W_3(0). \quad (3.125)$$

Der Entwicklungskoeffizient $\beta_1(3)$ ergibt sich aus den in [164] gewonnenen Ergebnissen für Watson-Integrale und kann gemäß

$$\beta_1(d=3) = \frac{1}{64\pi^2 W_3(0)} - \frac{7W_3(0)}{96} \quad (3.126)$$

durch Gamma-Funktionen [156]

$$\begin{aligned} W_3(0) &= \frac{1}{192\pi^3} (\sqrt{3} - 1) \left[\Gamma\left(\frac{1}{24}\right) \Gamma\left(\frac{11}{24}\right) \right]^2 \\ &= 0.252731009858663 \dots \end{aligned} \quad (3.127)$$

ausgedrückt werden. Damit erhält man den negativen Wert $\beta_1(3) = -0.01216 \dots$

- (iii) Diskretisierung der z -Koordinate mit dimensioneller Regularisierung der parallelen Richtungen: Das \mathbf{p} -Integral kann zum Beispiel mit Hilfe der Schwinger-Parametrisierung [165, 166] berechnet werden. Das verbleibende k -Integral ist von der Form (A.55) mit $r = 0$ und ergibt

$$\beta_1(d) = -\frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbf{p}} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{1}{[\mathbf{p}^2 + 4 \sin^2(\frac{k}{2})]^2} \quad (3.128)$$

$$= -\frac{\pi^{1-d/2} \Gamma(\frac{d}{2} - 2)}{16 \cos(\frac{d\pi}{2}) \Gamma^2(\frac{d-3}{2})} \quad (3.129)$$

$$\stackrel{d \rightarrow 3}{=} 0. \quad (3.130)$$

Während es also für Fall des scharfen *Cutoffs* möglich ist, die Kopplungskonstante auf ihren Fixpunkt g^* zu setzen, kann dies für die Gitterregularisierung wegen $\beta_1(d=3) < 0$ mit $g > 0$ nicht gelingen. Es ist hier also unmöglich, die führenden Korrekturen zum Skalenverhalten durch eine geschickte Wahl der Kopplungskonstanten zu unterdrücken. Für

die dritte vorgestellte Regularisierung müssen verschiedene Fälle unterschieden werden: Für $3 < d < 4$ ist hier $\beta_1(d) > 0$ und die Korrekturen zum Skalenverhalten können durch eine geeignete Wahl von g unterdrückt werden. Für $2 < d < 3$ ist dies wegen $\beta_1(d) < 0$ nicht möglich.⁹ Einen Spezialfall stellt der in dieser Arbeit relevante dreidimensionale Fall mit $\beta_1(d = 3) = 0$ dar. Um diesen Fall zu verstehen, ist es hilfreich, sich eine Folge von Regularisierungen mit $\beta_1^{(j)}(d) > 0$, $j = 1, 2, \dots, \infty$ und $\lim_{j \rightarrow \infty} \beta_1^{(j)}(d) = 0$ vorzustellen. Für jedes endliche j ist es möglich, die Kopplungskonstante g auf ihren IR-stabilen Fixpunkt $g_j^* > 0$ zu setzen. Mit $j \rightarrow \infty$ erhält man den Grenzwert $g_j^* \rightarrow g^* = \infty$. Aus Gleichung (3.118) ergibt sich, dass die Korrekturen zum Skalenverhalten auch für $j = \infty$ unterdrückt werden, wenn $g = g^* = \infty$ gesetzt wird und zusätzlich eine passend skalierte Temperatur-Variable $t \propto \tau/g$ eingeführt wird.

Auf die Korrekturen zum Skalenverhalten im halbumendlichen Modell sowie in der Filmgeometrie soll an dieser Stelle nur kurz für den dreidimensionalen Fall eingegangen werden, bei dem es ausschließlich den gewöhnlichen Oberflächenübergang gibt. Eine genauere Analyse findet sich in [27]. Die mit den Oberflächen \mathfrak{B}_1 und \mathfrak{B}_2 verknüpften irrelevanten Skalenfelder λ_1 und λ_2 skalieren exakt wie eine Länge [120]. Aus einer *Boundary Operator Expansion* des Ordnungsparameters um die Oberfläche \mathfrak{B}_j [97, 167] lässt sich schließen, dass für den zugehörigen Renormierungsgruppen-Eigenexponenten $y_\lambda = -1$ gilt. Daraus folgt für den damit verknüpften *Corrections-To-Scaling*-Exponenten ω_λ der Wert $\omega_\lambda = -y_\lambda = 1$.

In drei Dimensionen ist dieser Exponent also identisch mit dem üblichen Wegner-Exponenten $\omega = 4 - d$. Die hier auftretende Entartung führt nach der Argumentation von Wegner [168, Abschnitt V.E] zu logarithmischen Anomalien: Definiert man mit $\delta g = \mu(g - g^*)$ die Abweichung der dimensionsbehafteten Kopplungskonstanten von ihrem Fixpunkt und mit $\check{\lambda}_j$ die dimensionslosen linearen Oberflächenskalenfelder $\check{\lambda}_j = \lambda_j/\mu$, so lassen sich für diese Größen phänomenologische Flussgleichungen in der Form

$$\ell \frac{d}{d\ell} \delta g(\ell) = \omega \delta g(\ell) + \dots \quad (3.131a)$$

$$\ell \frac{d}{d\ell} \check{\lambda}_j(\ell) = \check{\lambda}_j(\ell) + a_{j,\omega} \delta g(\ell) + \dots, \quad j = 1, 2 \quad (3.131b)$$

formulieren. Annahme dabei ist, dass δg an andere lineare *Bulk*-Skalenfelder in den Flussgleichungen koppelt, nicht aber an lineare Oberflächenskalenfelder. Im Gegensatz dazu koppelt das lineare Oberflächenskalenfeld $\check{\lambda}_j$ sowohl an lineare *Bulk*-Felder als auch an zur selben Oberfläche \mathfrak{B}_j gehörende lineare Oberflächenskalenfelder. Lässt man alle nicht-

⁹Dies wird in Abschnitt 3.8.1 eine Rolle spielen.

linearen Terme weg und vernachlässigt die Kopplungen an weitere Skalenfelder, so erhält man die Gleichungen (3.131). Diese Gleichungen können mit den Anfangsbedingungen $\delta g(1) = \delta g$ und $\check{\lambda}_j(1) = \mu \lambda_j$ gelöst werden und liefern das Verhalten für große Längenskalen $\ell \rightarrow 0$

$$\delta g(\ell) \approx \ell^\omega \delta g \quad (3.132)$$

sowie

$$\lambda_j(\ell) \approx \ell \begin{cases} \check{\lambda}_j + a_{j,\omega} \delta g \frac{\ell^{\omega-1} - 1}{\omega - 1} & \text{für } \omega \neq 1 \\ \check{\lambda}_j + a_{j,\omega} \delta g \log \ell & \text{für } \omega = 1. \end{cases} \quad (3.133)$$

Setzt man $\ell = 1/(\mu L)$, so erkennt man, dass in L -abhängigen *Finite-Size*-Größen wie zum Beispiel dem *Finite-Size*-Anteil der freien Energie Korrekturen zum Skalenverhalten auftreten, die linear in $\check{\lambda}[1/(\mu L)]$ sind. Für den dreidimensionalen Fall mit entarteten Exponenten $\omega = \omega_\lambda = 1$ erhält man nach Gleichung (3.133) logarithmische Anomalien der Form $L^{-1} \log(\mu L)$.

Die in diesem Kapitel gewonnenen Ergebnisse sind von entscheidender Bedeutung für die Analyse der numerischen Daten. So ist es für das in allen Richtungen diskrete Modell also nicht möglich, die Korrekturen zum Skalenverhalten zu unterdrücken. Man hat bei der Auswertung immer mit Korrekturen umzugehen, welche in dem interessanten dreidimensionalen Fall auch noch logarithmisch sind. Dies wurde in [26, 27] mit großer Sorgfalt durchgeführt und es konnten trotz der Korrekturen sehr genaue Ergebnisse für dieses Modell erzielt werden. Im nur in der z -Richtung diskretisierten Modell ergeben sich deutlich weniger Schwierigkeiten: Während für endliche Werte der Kopplungskonstanten g immer logarithmische Korrekturen auftreten, verschwinden diese im Limes $g \rightarrow g^* = \infty$. Diese logarithmischen Terme wurden bereits im letzten Kapitel gefunden und haben dort die Bestimmung der Casimir-Amplitude deutlich erschwert. Im nächsten Kapitel werden zunächst die Casimir-Amplitude und später auch die kompletten Skalenfunktionen im Limes $g \rightarrow \infty$ berechnet und dort — aufgrund der Abwesenheit der logarithmischen Anomalien — sehr genaue Ergebnisse erzielt.

3.6 Numerik II: Der Limes $g \rightarrow \infty$

Wie in Kapitel 3.5 beschrieben, können die führenden Korrekturen zum Skalenverhalten unterdrückt werden, wenn die Kopplungskonstante g auf ihren Fixpunktwert g^* gesetzt wird. Dieser ist für die in dieser Arbeit verwendete gemischte Gitterregularisierung und dimensionelle Regularisierung $g^* = \infty$. Um in den in Kapitel 3.4 verwendeten Formeln für

das Potential V_z und die freie Energie den Limes $g \rightarrow g^* = \infty$ zu erhalten, teilt man die Gleichungen (3.65) und (3.74) zunächst durch g . Zusätzlich definiert man eine reskalierte Temperaturvariable

$$t = \frac{\tau}{\xi_+(g)}, \quad (3.134)$$

wobei $\xi_+(g)$ die Amplitude der Korrelationslänge

$$\xi_b^+(\tau, g) = \frac{1}{\sqrt{r_b}} \approx \xi_+(g)\tau^{-\nu} \quad \text{für } T > T_c \quad (3.135)$$

ist. Löst man Gleichung (3.74) für kleine r_b und τ nach r_b , so ergibt sich — wie auch im kontinuierlichen Modell (siehe Gleichung (3.36)) —

$$r_b = \left(\frac{24\pi\tau}{g} \right)^2 + O(\tau^3). \quad (3.136)$$

Aus Gleichung (3.136) kann man nun sofort den kritischen Exponenten der Korrelationslänge in drei Dimensionen ($\nu = 1$) und deren Amplitude

$$\xi_+(g) = \frac{g}{24\pi} \quad (3.137)$$

ablesen. Mit diesen Definitionen gilt für die Skalenvariable

$$x = L \frac{24\pi}{g} \tau = Lt. \quad (3.138)$$

Damit lässt sich der Limes $g \rightarrow \infty$ ausführen: Da das Potential V_z für $a \ll z \ll L$, $|\tau|^{-\nu}$ in das exakte Ergebnis $V_{\infty,c}^{\text{ord}}(z)$ für den kontinuierlichen Halbraum übergeht, muss es im Limes $g \rightarrow \infty$ einen endlichen Wert annehmen. Damit gilt $\lim_{g \rightarrow \infty} V_z(g)/g = 0$ und es ergibt sich für die Selbstkonsistenzgleichung des Potentials V_z des Films

$$t = \langle z | \mathbf{H} | z \rangle. \quad (3.139)$$

Die gleiche Argumentation lässt sich auch auf das *Bulk*-Potential r_b anwenden. Auch hier gilt also $\lim_{g \rightarrow \infty} r_b(g)/g = 0$ und es folgt für die *Bulk*-Bedingung

$$t = \begin{cases} 2 \operatorname{arsinh} \left(\frac{\sqrt{r_b}}{2} \right) & \text{für } t > 0 \\ 0 & \text{für } t \leq 0 \end{cases}, \quad (3.140)$$

was also in diesem Limes analytisch nach

$$r_b = \begin{cases} 4 \sinh^2\left(\frac{t}{2}\right) & \text{für } t > 0 \\ 0 & \text{für } t \leq 0 \end{cases} \quad (3.141)$$

aufgelöst werden kann. An der Selbstkonsistenzgleichung (3.139) des Films erkennt man die bereits erwähnte Unabhängigkeit der Skalenfunktionen von den Oberflächenkopplungen c_j : Wählt man $\hat{c}_j a \neq 1$, so hat dies nach Gleichung (3.51) nur auf die ECKELEMENTE der Ableitungsmatrix Auswirkungen. Die Lösung V_z der Selbstkonsistenzgleichung ändert sich dann nur an den Rändern, sodass \mathbf{H} unverändert bleibt. Diese triviale Änderung des Potentials hat aber keine Auswirkung auf die Skalenfunktionen.

Gleichung (3.139) verdeutlicht, dass die Suche nach dem Potential des Films ein mathematisch sehr interessantes Problem ist: Gesucht wird das Potential, bei dem die Diagonale des Matrixlogarithmus des zugehörigen Hamilton-Operators mit Dirichlet-Randbedingungen konstant ist. Obwohl die Fragestellung sehr kurz formuliert werden kann, ist es fraglich, ob eine analytische Lösung denkbar ist.

Der Limes $g \rightarrow \infty$ der Exzess-Freien-Energie nach Gleichung (3.79) ist endlich, da sich die in diesem Limes divergierenden Beiträge der Form $\propto \tau^2/g$ zu f_L^{ren} und f_b^{ren} gegenseitig aufheben. Damit aber auch f_L^{ren} und f_b^{ren} endliche Limiten $g \rightarrow \infty$ haben, müssen diese divergierenden Anteile subtrahiert werden. Man definiert

$$f_L^{\text{ren}}(t) = \lim_{g \rightarrow \infty} \left[f_L^{\text{ren}}(\tau, g) + L \frac{3}{2g} \tau^2 \right]_{\tau = \frac{gt}{24\pi}} \quad (3.142)$$

und

$$f_b^{\text{ren}}(t) = \lim_{g \rightarrow \infty} \left[f_b^{\text{ren}}(\tau, g) + \frac{3}{2g} \tau^2 \right]_{\tau = \frac{gt}{24\pi}}. \quad (3.143)$$

In diesen Gleichungen kann nun $g \rightarrow \infty$ gesetzt werden und es ergibt sich

$$f_L^{\text{ren}}(t) = \frac{1}{8\pi} \text{Sp} [\mathbf{H} \cdot (1 + t - \mathbf{H})] + L \frac{t}{4\pi} \quad (3.144)$$

sowie

$$f_b^{\text{ren}} = \frac{1}{4\pi} \theta(t) [\sinh(t) - t]. \quad (3.145)$$

Bei der Umformung der freien Energie des Films wurde wieder die Spur-Identität (3.77) genutzt, um den Term $\propto \sum_z t V_z$ zu vereinfachen. Die freie Energie im *Bulk*-Fall wurde mit Hilfe der Gleichung (3.141) umgeformt und dabei das *Bulk*-Potential r_b eliminiert.

Die Abzüge in $f_b^{\text{ren}}(t)$ und $f_L^{\text{ren}}(t)$ haben offensichtlich keinen Einfluss auf die Exzess-Freie-

Energie, da sie sich in der Differenz aufheben

$$f_{\text{ex}}(L, t) \equiv f_{\text{ex}}^{\text{ren}}(L, t) = f_L^{\text{ren}}(t) - Lf_b^{\text{ren}}(t). \quad (3.146)$$

3.6.1 Casimir-Amplitude

Die im letzten Abschnitt hergeleiteten Formeln für das Potential und die Exzess-Freie-Energie erlauben es, die Casimir-Amplitude direkt bei $g = \infty$ zu bestimmen. Da die Kopplungskonstante hier gleich dem Wert an ihrem Fixpunkt g^* ist, verschwinden die führenden Korrekturen zum Skalenverhalten. Dies ermöglicht die Bestimmung der Amplitude mit deutlich erhöhter Genauigkeit gegenüber dem Fall mit endlichen Werten von g .

Wie schon in Kapitel 3.4 bei der numerischen Bestimmung der Casimir-Amplitude für endliche Werte der Kopplungskonstanten muss die Selbstkonsistenzgleichung (3.139) für $t = 0$ numerisch gelöst werden. Dies kann wieder geschehen, indem das Problem als Nullstellensuche formuliert wird. Führt man die Rechnungen mit einfacher Maschinengenauigkeit (16 Stellen Genauigkeit) durch, so erhält man die in Abbildung 3.5 dargestellten Potentiale V_z . Zur geeigneten Darstellung führt man die Variable ζ mit

$$\zeta = \frac{2j - 1 + \delta L}{2L_{\text{eff}}}, \quad j = 1, 2, \dots, L \quad (3.147)$$

ein. Damit ist $\zeta \in [0, 1]$. $L_{\text{eff}} = L + \delta L$ ist die bereits erwähnte effektive Filmdicke. Zieht man zudem die aus [143] bekannte Lösung des halbumendlichen Kontinuumsmodells in symmetrisierter Form

$$v_0(\zeta) = -\frac{1}{4} \left[\frac{1}{\zeta^2} + \frac{1}{(\zeta - 1)^2} - 1 \right] \quad (3.148)$$

ab, so ergeben sich die dargestellten Kurven. Offensichtlich konvergieren die Potentiale in dieser Auftragsung für $L \rightarrow \infty$ gegen eine Grenzkurve. Der Parameter δL ergibt sich aus der Forderung, dass diese Grenzkurve durch den Ursprung verläuft und die Potentiale möglichst schnell gegen sie konvergieren. Auf diese Weise erhält man $\delta L \simeq 0.725$. Im Folgenden wird diese Konstante noch genauer bestimmt. Je größer das System, desto größer das Intervall, in dem die Potentiale dieser Asymptote folgen. Diese kann an die Daten angefitet werden und ist als schwarz strichlierte Linie eingezeichnet. Sie hat die Entwicklung

$$\delta v(\zeta) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k} \left(\zeta - \frac{1}{2} \right)^{2k} \quad (3.149)$$

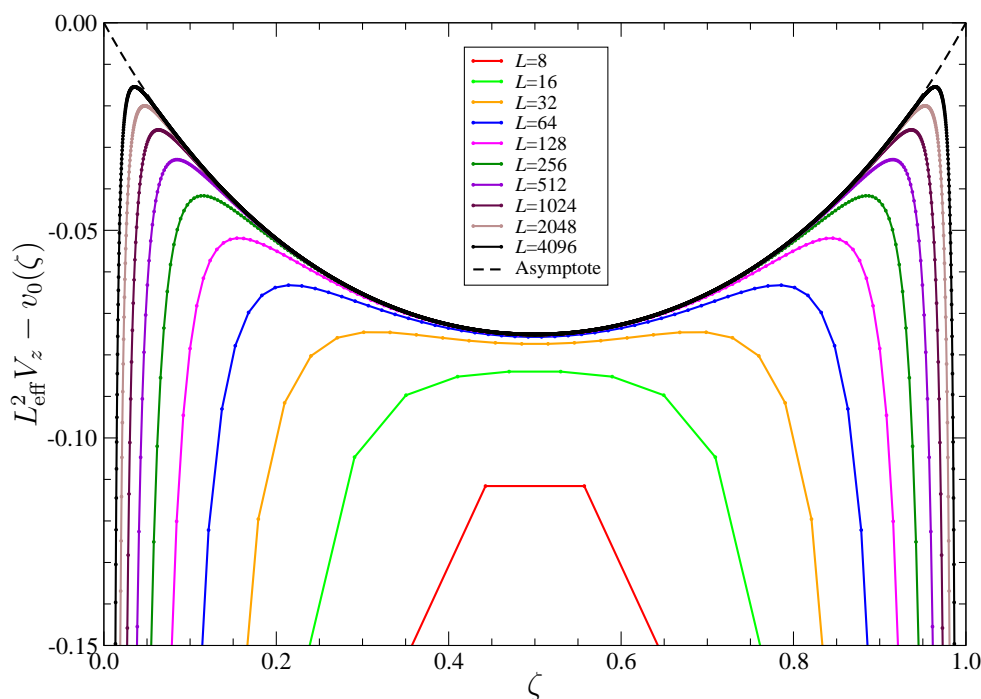


Abbildung 3.5: Die Potentiale V_z für $g = \infty$ am kritischen Punkt. Für Details zur Auftragung siehe Haupttext.

mit den Koeffizienten $a_0 = -0.075075422685740932(1)$, $a_2 = 0.2358287616270474(1)$, $a_4 = 0.213346985127(1)$, $a_6 = 0.15090606(1)$, $a_8 = 0.09356(1)$, $a_{10} = 0.054(1)$ und $a_{12} = 0.03(1)$. In der Mitte des Film ergibt sich der Wert $v_0(1/2) + \delta v(1/2) = -7/4 + a_0 = -1.825075422685740932(1)$. Die Koeffizienten erhält man, indem zunächst an das Potential V_z für ein festes L die Funktion (3.149) angefitet wird und dann der Limes $L \rightarrow \infty$ vollzogen wird. Die Konsistenz der Ergebnisse kann mit der in [154] hergeleiteten Identität zwischen der Casimir-Amplitude Δ_C und der Entwicklung des Potentials an der Oberfläche

$$\delta v(\zeta) = \left(\frac{1}{2} + \frac{256\Delta_C}{\pi} \right) \zeta + O(\zeta^2) \quad (3.150)$$

geprüft werden. Innerhalb der Fehlerbalken ergibt sich eine gute Übereinstimmung. Die Asymptote $\delta v(\zeta)$ ergibt zusammen mit dem Potential $v_0(\zeta)$ aus Gleichung (3.148) die Lösung für das Potential im kontinuierlichen Modell mit endlicher Filmdicke. Aus dieser könnte, vorausgesetzt es wäre auch möglich, die zugehörige Schrödinger-Gleichung zu lösen, durch Berechnung der Zetafunktion der Eigenwerte die Casimir-Amplitude analytisch bestimmt werden. Aus den numerisch bestimmten Potentialen kann nach den Gleichungen (3.144) und (3.145) die Exzess-Freie-Energie berechnet werden. Für die gewünschte hohe Präzision der Casimir-Amplitude muss dies mit doppelter Maschinengenauigkeit (32 Stellen) geschehen. Bei der Lösung der Selbstkonsistenzgleichung kann auf die doppel-

| L | $f_{ex}(L, 0, \infty)$ | Δ_C |
|----------|----------------------------|-------------------------|
| 2^2 | 0.0434426464161452635463 | |
| 2^3 | 0.0437917553127071125807 | |
| 2^4 | 0.0438954577901547944617 | |
| 2^5 | 0.0439239629614105308154 | |
| 2^6 | 0.0439314545835357953778 | |
| 2^7 | 0.0439333762480393760327 | -0.01077336957148 |
| 2^8 | 0.0439338629673000452260 | -0.01077340534297 |
| 2^9 | 0.0439339854485286044466 | -0.01077340679713 |
| 2^{10} | 0.0439340161698739302592 | -0.01077340684854 |
| 2^{11} | 0.0439340238628944026765 | -0.01077340685020 |
| 2^{12} | 0.0439340257877384528963 | -0.01077340685025 |
| ∞ | 0.043934026429656137779(1) | -0.01077340685024782(1) |

Tabelle 3.2: Die Exzess-Freie-Energie $f_{ex}(L, 0)$ am *Bulk*-kritischen Punkt $t = 0$ und daraus ermittelte Abschätzungen für die Casimir-Amplitude Δ_C für $g = \infty$.

te Genauigkeit verzichtet werden, da die Exzess-Freie-Energie am Potential V_z extremal ist und so kleine Abweichungen bei der Bestimmung von V_z nur in quadratischer Ordnung in f_{ex} eingehen. Auf diese Weise kann erheblich Rechenzeit gespart werden und die Untersuchung der großen Systeme wird so erst möglich.

In Tabelle 3.2 sind die Werte für die Exzess-Freie-Energie $f_{ex}(L, 0)$ am *Bulk*-kritischen Punkt $t = 0$ mit $g = \infty$ für die untersuchten Systemgrößen $L = 2^2, 2^3, \dots, 2^{12}$ aufgelistet. Zudem ist eine Abschätzung für den Grenzwert $\lim_{L \rightarrow \infty} f_{ex}(L, 0) = 2f_s(0)$ und eine Folge von Abschätzungen für die Casimir-Amplitude Δ_C sowie deren Extrapolation nach $L = \infty$ angegeben. Diese ergeben sich wie in Kapitel 3.4 aus dem Fitten der Daten für sechs aufeinanderfolgende Werte mit $L = L_{\min}, \dots, L_{\max}$ an die Funktion der Form

$$f_{ex}(L, 0) = 2f_s(0) + \Delta_C L^{-2} + \sum_{k=3}^6 f_k L^{-k}. \quad (3.151)$$

Da die Kopplungskonstante auf ihren Fixpunktwert gesetzt wurde, müssen logarithmische Terme nicht miteinbezogen werden. Daraus erhält man eine Abschätzung für die Amplitude. Diese ist in Tabelle 3.2 in der jeweiligen Zeile L_{\max} eingetragen. Die Extrapolation nach $L = \infty$ der Casimir-Amplitude ergibt sich dann zu

$$\Delta_C = -0.01077340685024782(1). \quad (3.152)$$

Zur Überprüfung der Konsistenz der Fits, kann man zusätzlich eine Fitfunktion der Form

$$f_{\text{ex}}(L, 0) = 2f_s(0) + \Delta_C L_{\text{eff}}^{-2} \quad (3.153)$$

mit

$$L_{\text{eff}} = L + \delta L + \sum_{k=1}^n f_k L^{-k} \quad (3.154)$$

verwenden. Es zeigt sich, dass die so erhaltenen Ergebnisse für die Amplitude identisch mit den oben genannten sind. Zudem ergibt sich die führende Korrektur δL zur effektiven Filmstärke L_{eff} zu

$$\delta L = 0.7255032704723(3). \quad (3.155)$$

Diese wird im nächsten Abschnitt bei der Analyse der Korrekturen zum Skalenverhalten der Skalenfunktionen noch eine wichtige Rolle spielen.

3.6.2 Die Skalenfunktionen $\Theta(x)$ und $\vartheta(x)$

Nachdem im letzten Abschnitt die Casimir-Amplitude, also das Verhalten des *Finite-Size*-Anteils der freien Energie am *Bulk*-kritischen Punkt, bestimmt wurde, soll nun der Einfluss der Temperaturvariablen t untersucht werden. Um den Umgang mit den in der Exzess-Freien-Energie auftretenden Oberflächentermen $f_s(t)$ zu vermeiden, soll direkt die Skalenfunktion $\Theta(x)$ der Casimir-Kraft bestimmt werden. Dies kann geschehen, indem die in dem Zusammenhang zwischen der reduzierten Casimir-Kraft pro Ordnungsparameterdimension und der Exzess-Freien-Energie vorkommende Ableitung nach der Filmstärke diskretisiert wird. Anschließend kann durch numerische Integration die Skalenfunktion des *Finite-Size*-Anteils der freien Energie ermittelt werden.

Es gilt also

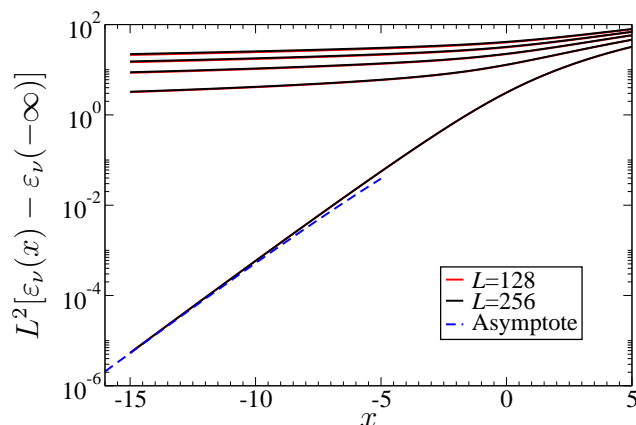
$$\beta \mathcal{F}_C(L, t) = -\frac{\partial f_{\text{ex}}(L, t)}{\partial L} \approx -\frac{f_{\text{ex}}(L+1, t) - f_{\text{ex}}(L-1, t)}{2}, \quad (3.156)$$

woraus gemäß

$$\vartheta(x) \approx L_{\text{eff}}^3 \beta \mathcal{F}_C(L, t) \quad (3.157)$$

die Skalenfunktion der Casimir-Kraft berechnet werden kann. $L_{\text{eff}} = L + \delta L$ ist dabei die in Abschnitt 3.6.1 bestimmte effektive Filmstärke. Der bei der Approximation (3.156) gemachte Fehler ist von der Größenordnung $O(L^{-(d+2)})$, also in drei Dimensionen $O(L^{-5})$. Nach Gleichung (3.156) sind zur Berechnung der Kraft für einen gegebenen Wert der Filmstärke L die Exzess-Freien-Energien für Filmstärken von $L-1$ und $L+1$ nötig. Es

Abbildung 3.6: Die kleinsten fünf Eigenwerte für $L = 128$ und $L = 256$ als Funktion der Skalenvariablen x in einer halblogarithmischen Auftragung: Der kleinste Eigenwert geht exponentiell gegen seinen Grenzwert. Die übrigen konvergieren deutlich langsamer.



muss also wieder die Selbstkonsistenzgleichung

$$\langle z | \log \mathbf{H} | z \rangle = t \quad (3.158)$$

— diesmal für endliche Temperaturen t — gelöst werden. Aus dem so erhaltenen Potential kann dann die freie Energie und somit die Kraft berechnet werden. Die Numerik lässt sich wieder mit MATHEMATICA für verschiedene Werte von L und t durchführen. Eine wichtige Besonderheit tritt hier jedoch für tiefe Temperaturen auf. Bei einfacher Rechengenauigkeit lässt sich die Selbstkonsistenzgleichung nur für $t \gtrsim -20/L$ lösen. Für tiefere Temperaturen wird die Numerik instabil und findet nicht mehr die korrekte Nullstelle. Dies ist, insbesondere weil die Skalenfunktionen $\vartheta(x)$ und $\Theta(x)$ in diesem Bereich noch stark von ihrem Tieftemperaturverhalten abweichen, sehr unbefriedigend. Im Folgenden soll erläutert werden, worin dieses Problem seinen Ursprung hat und wie es gelöst werden kann.

Die Instabilität der Numerik für tiefe Temperaturen ist eng mit dem Verhalten des kleinsten Eigenwertes ε_1 der Hamilton-Matrix \mathbf{H} verknüpft. Drückt man in der Selbstkonsistenzgleichung (3.139) den Matrixlogarithmus durch das Eigensystem der Matrix \mathbf{H} aus, so ergibt sich sofort, dass der kleinste Eigenwert im Spektrum für $t \rightarrow -\infty$ exponentiell gegen Null gehen muss. Eine genauere Analyse zeigt, dass er wie

$$\varepsilon_1 \approx \frac{1}{L^2} \frac{e}{\pi} |x| e^{-|x|} \quad (3.159)$$

für $x \rightarrow -\infty$ verschwinden muss [155]. Die übrigen Eigenwerte konvergieren — mit L^2 reskaliert — gegen endliche Konstanten. Abbildung 3.6 zeigt die kleinsten fünf Eigenwerte für $L = 128$ und $L = 256$ als Funktion der Skalenvariablen x . In der gewählten Auftragung sind die jeweiligen Grenzwerte für $x \rightarrow -\infty$ abgezogen, sodass alle Kurven gegen Null konvergieren. Diese Grenzwerte sind analytisch bekannt (siehe zum Beispiel [144]). Sie

sind die Eigenwerte der Ableitungsmatrix mit Neumann-Randbedingungen und lauten

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \varepsilon_\nu(x) = 4 \sin \left[\frac{\pi(\nu - 1)}{2L} \right]^2, \quad \nu = 1, 2, \dots, L. \quad (3.160)$$

Man erkennt deutlich das unterschiedliche Verhalten der Eigenwerte. Während der kleinste Eigenwert exponentiell auf seinen Grenzwert abfällt, konvergieren die übrigen viel langsamer für $x \rightarrow -\infty$. Gemäß Gleichung (3.144) liefert ε_1 im Tieftemperaturlimit scheinbar nur einen vernachlässigbaren Beitrag zur freien Energie. Da aber bereits kleine Fehler bei der Berechnung des kleinsten Eigenwerts große Auswirkungen auf die Bestimmung des selbstkonsistenten Potentials haben, ist die freie Energie stark abhängig von der genauen Bestimmung von ε_1 . Es werden etwa $|x|$ signifikante Stellen benötigt, um korrekte Ergebnisse zu erhalten, da $\log \varepsilon_1$ mit derselben Genauigkeit wie die Logarithmen der übrigen Eigenwerte bestimmt werden muss. Dies ist jedoch nur für kleine Systeme numerisch in annehmbarer Zeit möglich, sodass die Methode der Nullstellensuche zur Bestimmung des selbstkonsistenten Potentials modifiziert werden muss, um im Tieftemperaturlimit genaue Ergebnisse zu erhalten.

Um diese Modifikation genauer zu verstehen, ist es sinnvoll, das Problem für $L = 4$ genauer zu untersuchen. Dies hat den Vorteil, dass es — unter Ausnutzung der Symmetrie des Potentials — analytisch gelöst werden kann. Abbildung 3.7 zeigt *Contourplots* für die freie Energie dieses Systems als Funktion der unabhängigen Komponenten V_1 und V_2 des Potentials $V = (V_1, V_2, V_2, V_1)$ für zwei verschiedene Temperaturen. Die Konturen sind die schwarz gezeichneten Linien. Der schwarze Punkt markiert das Extremum der freien Energie und definiert somit durch seine Lage das selbstkonsistente Potential. Die rötlich eingefärbte Fläche ist der Bereich, in dem der kleinste Eigenwert negativ und die freie Energie somit komplex ist. Sie ist begrenzt durch die rote Linie, auf der $\varepsilon_1 = 0$ gilt. Die im linken Bild zusätzlich eingezeichneten grünen Kurven sind Linien mit konstantem kleinsten Eigenwert $\varepsilon_1 = 0.0254763828 \dots + \{-1/100, -1/50, 0, 1/50, 1/100\}$. $\varepsilon_1 = 0.0254763828 \dots$ ist der Wert des kleinsten Eigenwertes am Fixpunkt. Daher liegt der Fixpunkt genau auf der zugehörigen grünen Kurve. Auf die Bedeutung der in Abbildung 3.7(a) schwarz und blau strichliert eingezeichneten Konturen wird später noch eingegangen. Vergleicht man die *Contourplots* der freien Energie (3.7) für verschiedene Temperaturen, so erkennt man, dass für stark negative x der Fixpunkt exponentiell nah an dem verbotenen Bereich $\varepsilon_1 \leq 0$ liegt. Wird bei der Nullstellensuche das Potential nur leicht variiert, so wird schnell die $(\varepsilon_1 = 0)$ -Grenzfläche überschritten und $\log \varepsilon_1$ wird komplex.

Zusätzlich verändert sich auch die Form des Extremums. Die Konturlinien in der Um-

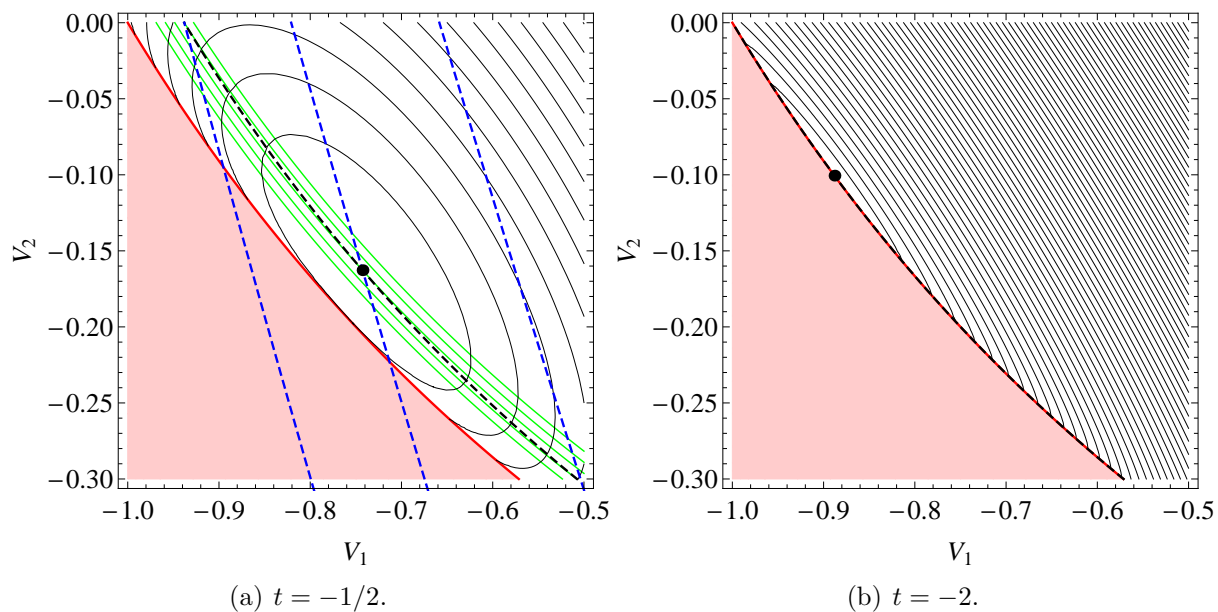


Abbildung 3.7: *Contourplots* der freien Energie als Funktion des Potentials für $L = 4$ bei zwei verschiedenen Temperaturen: Die rote Fläche ist der Bereich, in dem der kleinste Eigenwert negativ ist und die freie Energie komplex wird. Der schwarze Punkt markiert das Maximum und somit den Fixpunkt. Je tiefer die Temperatur, desto näher liegt dieser Punkt an dem verbotenen Bereich und desto stärker ist das Maximum oblat verzerrt. Dies verursacht die Probleme in der Numerik für tiefe Temperaturen. Die Bedeutung der zusätzlich in (a) eingezeichneten Linien wird im Haupttext erläutert.

gebung des Fixpunktes werden stark oblat verzerrt. Dies kann auch anhand der Hesse-Matrix am Extremum gezeigt werden. Die Hesse-Matrix der freien Energie am Extremum ist identisch mit der Jacobi-Matrix des Nullstellenproblems. Daraus folgt die Identität

$$\frac{\partial \langle z | \log \mathbf{H} | z \rangle}{\partial V_{z'}} = \frac{\partial \langle z' | \log \mathbf{H} | z' \rangle}{\partial V_z}. \quad (3.161)$$

Für die Berechnung der Hesse-Matrix wird die Ableitung der Eigenfunktionen nach dem Potential benötigt. Dies ist das Analogon des Hellmann-Feynman-Theorems für die Eigenfunktionen. Es ist einfach zu zeigen, dass für die Ableitung der Eigenfunktionen $|\nu\rangle$ des Operators $\mathbf{H}(\lambda)$ nach dem Parameter λ gilt:

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} |\nu\rangle = \sum_{\nu' \neq \nu} \frac{\langle \nu' | \frac{\partial \mathbf{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | \nu \rangle}{\varepsilon_\nu - \varepsilon_{\nu'}} |\nu'\rangle. \quad (3.162)$$

Zusammen mit $\partial \langle z | \mathbf{H} | z' \rangle / \partial V_{z''} = \delta_{z,z'} \delta_{z,z''}$ kann dies verwendet werden, um die Hesse-Matrix durch die Eigenfunktionen und Eigenwerte der Matrix \mathbf{H} auszudrücken. Man

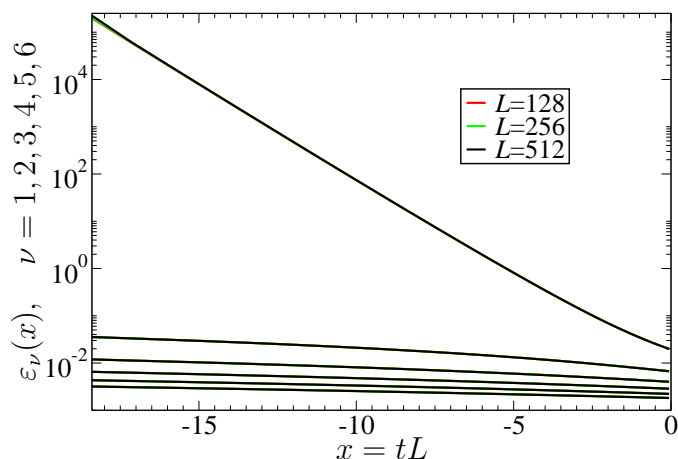


Abbildung 3.8: Die größten sechs Eigenwerte der Hesse-Matrix der freien Energie als Funktion der SkalenvARIABLEN x : Die Kurven für verschiedene Systemgrößen liegen sehr gut aufeinander. Der größte Eigenwert divergiert exponentiell für $x \rightarrow -\infty$. Die übrigen divergieren algebraisch.

erhält¹⁰

$$\langle V_z | H_{f_L}^{\text{ren}} | V_{z'} \rangle = \frac{\partial \langle z | \log \mathbf{H} | z \rangle}{\partial V_{z'}} = \sum_{\nu, \nu'=1}^L \varphi_{\nu, z} \varphi_{\nu', z'} \frac{\log \varepsilon_\nu - \log \varepsilon_{\nu'}}{\varepsilon_\nu - \varepsilon_{\nu'}} \varphi_{\nu, z'} \varphi_{\nu', z}, \quad (3.163)$$

wobei der Fall $\nu = \nu'$ als Grenzwert

$$\lim_{\varepsilon_\nu \rightarrow \varepsilon_{\nu'}} \frac{\log \varepsilon_\nu - \log \varepsilon_{\nu'}}{\varepsilon_\nu - \varepsilon_{\nu'}} = 1/\varepsilon_\nu \quad (3.164)$$

verstanden werden muss. Eine Analyse dieser Matrix zeigt, dass der größte Eigenwert der Hesse-Matrix exponentiell in $|x|$ divergiert, während die übrigen Eigenwerte nur algebraisch anwachsen. Dies ist beispielhaft in Abbildung 3.8 für die größten sechs Eigenwerte der Systeme mit $L = 128, 256, 512$ dargestellt. Zusammen führt dies zu den Problemen bei der numerischen Bestimmung des Extremums der freien Energie bei tiefen Temperaturen. Wie können diese Probleme umgangen werden?

Ausgangsbasis dafür ist die aufsummierte Selbstkonsistenzgleichung

$$\sum_{z=1}^L \langle z | \mathbf{H} | z \rangle = \text{Sp} \log \mathbf{H} = \log \det \mathbf{H} = Lt = x. \quad (3.165)$$

Schreibt man die Determinante als Produkt der Eigenwerte, so lässt sich dies nach dem kleinsten Eigenwert auflösen. Man erhält

$$\log \varepsilon_1 = x - \sum_{\nu=2}^L \log \varepsilon_\nu. \quad (3.166)$$

¹⁰Auch für die numerische Lösung der Selbstkonsistenzgleichung mit Hilfe von MATHEMATICA kann die Kenntnis dieser Matrix hilfreich sein. Bei geschickter Implementation kann die Anzahl der Iterationsschritte bei der Nullstellensuche deutlich reduziert werden.

Gleichung (3.166) muss am Fixpunkt erfüllt sein. Sie ist als schwarz strichlierte Linie in Abbildung 3.7(a) eingezeichnet. Die so definierte Hyperfläche verläuft für stark negative x parallel zu der ($\varepsilon_1 = 0$)-Fläche. Blau strichliert in Abbildung 3.7(a) sind zusätzlich die Linien eingezeichnet, auf denen

$$\log \tilde{\varepsilon}_1 = x - \sum_{\nu=2}^L \log \varepsilon_\nu \quad (3.167)$$

konstant ist. Offensichtlich unterscheidet sich $\log \tilde{\varepsilon}_1$ von $\log \varepsilon_1$ abseits vom Fixpunkt. Ersetzt man in der Formel für die freie Energie

$$f_L(V_z, t) = \frac{1}{8\pi} \sum_{\nu=1}^L \varepsilon_\nu (1 + t - \log \varepsilon_\nu) - \frac{tL}{4\pi} \quad (3.168)$$

den Logarithmus des kleinsten Eigenwertes gemäß Gleichung (3.166), so erhält man

$$\tilde{f}_L(V_z, t) = \frac{1}{8\pi} \sum_{\nu=1}^L \varepsilon_\nu (1 + t - \log \tilde{\varepsilon}_\nu) - \frac{tL}{4\pi}, \quad (3.169)$$

wobei

$$\log \tilde{\varepsilon}_\nu := \begin{cases} x - \sum_{\nu=2}^L \log \varepsilon_\nu & , \quad \nu = 1 \\ \log \varepsilon_\nu & , \quad \nu > 1 \end{cases} \quad (3.170)$$

definiert wurde. Dieser Ausdruck ist nur da identisch mit dem exakten Ausdruck für die freie Energie, wo Gleichung (3.165) gültig ist. Dies gilt somit auch am Fixpunkt. Für andere Werte von V_z weicht er aber ab. Für das Modellsystem mit $L = 4$ sind *Contourplots* dieser Funktion in Abbildung 3.9 für zwei verschiedene Temperaturen dargestellt. Auf der roten Linie gilt wieder $\varepsilon_1 = 0$. Jedoch wird $\tilde{f}_L(V_z, t)$ hier nicht mehr komplex, da $\log \varepsilon_1$ in Gleichung (3.169) nicht mehr auftaucht. Der verbotene Bereich liegt jetzt bei $\varepsilon_2 = 0$ und ist somit in einen Bereich des V_z -Raumes verschoben, der weit weg vom Fixpunkt liegt. Der Preis, den man dafür zahlt, ist aber, dass der als schwarzer Punkt eingezeichnete Fixpunkt nicht mehr an einem Extremum von $\tilde{f}_L(V_z, t)$ liegt. Der Fixpunkt ist aber nach wie vor ein globales Extremum in dem durch Gleichung (3.165) definierten $(L/2 - 1)$ -dimensionalen Unterraum. Dieses Extremum findet man nun durch Extremalisierung unter Nebenbedingungen mit Hilfe eines Lagrange-Multiplikators λ . Definiert man

$$\hat{f}_L(V_z, t, \lambda) = \frac{1}{8\pi} \sum_{\nu=1}^L \varepsilon_\nu (1 + t - \log \tilde{\varepsilon}_\nu) - \frac{tL}{4\pi} + \frac{\lambda}{8\pi} (\tilde{\varepsilon}_1 - \varepsilon_1), \quad (3.171)$$

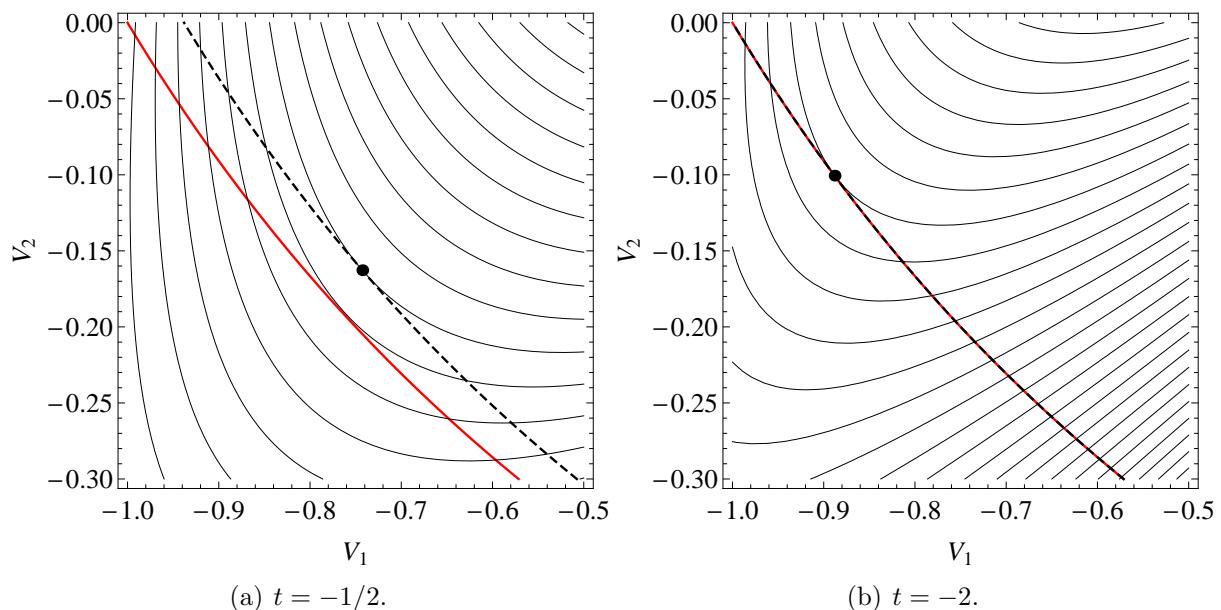


Abbildung 3.9: *Contourplots* der gemäß Gleichung (3.169) modifizierten freien Energie als Funktion des Potentials für $L = 4$ bei zwei verschiedenen Temperaturen: Ersetzt man den Logarithmus des kleinsten Eigenwertes durch die Übrigen, so verschiebt sich der verbotene Bereich zu $\varepsilon_2 \leq 0$ und befindet sich außerhalb des Bildausschnitts. Der schwarze Punkt markiert das Maximum der ursprünglichen freien Energie und liegt jetzt für alle Temperaturen weit abseits des neuen verbotenen Bereichs. Dafür fällt er offenbar nicht mit einem globalen Maximum von $\tilde{f}_{L=4}(V_z, t)$ zusammen. Extremalisiert man $\tilde{f}_{L=4}(V_z, t)$ unter der als schwarz strichliert eingezeichneten Linie der Nebenbedingung (3.165), so erhält man jedoch weiter den Fixpunkt.

so ergeben sich aus den Stationaritätsbedingungen

$$\frac{\partial \hat{f}_L(V_z, t, \lambda)}{\partial V_z} \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.172a)$$

$$\frac{\partial \hat{f}_L(V_z, t, \lambda)}{\partial \lambda} \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.172b)$$

durch Anwendung des Hellmann-Feynman-Theorems die Selbstkonsistenzgleichungen

$$t = \langle z | \left\{ [\log \tilde{\varepsilon}_1 + (\lambda - 1)] |1\rangle\langle 1| + \sum_{\nu=2}^L \left(\log \varepsilon_\nu + \frac{\lambda \tilde{\varepsilon}_1 - \varepsilon_1}{\varepsilon_\nu} \right) |\nu\rangle\langle \nu| \right\} |z\rangle \quad (3.173a)$$

$$0 = \tilde{\varepsilon}_1 - \varepsilon_1. \quad (3.173b)$$

Diese müssen nach λ und V_z gelöst werden. Am Fixpunkt gilt offenbar $\tilde{\varepsilon}_1 = \varepsilon_1$, so dass durch einen Vergleich mit der ursprünglichen Selbstkonsistenzgleichung aus Gleichung (3.173a) folgt

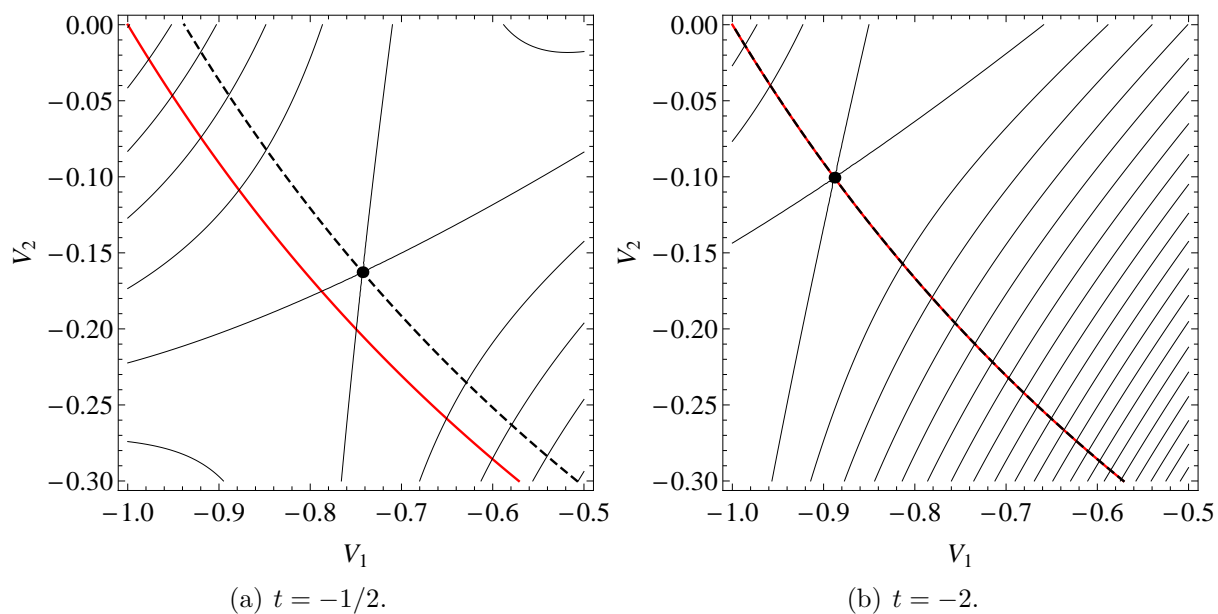


Abbildung 3.10: *Contourplots* der gemäß Gleichung (3.171) modifizierten freien Energie als Funktion des Potentials für $L = 4$ und $\lambda = 1$ bei zwei verschiedenen Temperaturen: Der Fixpunkt liegt an einem Sattelpunkt der freien Energie und kann somit durch eine Nullstellensuche der Ableitungen bestimmt werden.

chung (3.173a) sofort $\lambda = 1$ folgt.

Abbildung 3.10 zeigt *Contourplots* der freien Energie $\hat{f}_L(V_z, t, 1)$. Der Fixpunkt liegt an einem Sattelpunkt der Funktion und kann durch die Selbstkonsistenzgleichung

$$t = \langle z | \left[\sum_{\nu=1}^L \log \tilde{\varepsilon}_\nu |\nu\rangle\langle\nu| + \sum_{\nu=2}^L \frac{\tilde{\varepsilon}_1 - \varepsilon_1}{\tilde{\varepsilon}_\nu} |\nu\rangle\langle\nu| \right] |z\rangle \quad (3.174)$$

berechnet werden. Hierbei treten auch für sehr tiefe Temperaturen keine Probleme mehr auf, da der verbotene Bereich in dem V_z -Raum weit vom Fixpunkt entfernt liegt und die Funktion $\hat{f}_L(V_z, t, 1)$ in der Umgebung der Lösung keine starke Anisotropie aufweist, wie die in Abbildung 3.11 dargestellten Eigenwerte der Hesse-Matrix zeigen. Nachdem die numerischen Probleme für tiefe Temperaturen gelöst sind, kann die Skalenfunktion gemäß Gleichung (3.156) berechnet werden. In Abbildung 3.12 sind die Ergebnisse für $L = 17, 33, 65, 129, 257, 513, 1025$ gegen die Skalenvariable $x = tL_{\text{eff}}$ aufgetragen. Für die großen Systeme beobachtet man einen hervorragenden Datenkollaps über den gesamten Temperaturbereich. Abweichungen zwischen den Kurven sind nur bei den kleinen Systemen zu erkennen. Abbildung 3.13 zeigt zudem eine Ausschnittsvergrößerung in der Umgebung des Extremums der Skalenfunktion. Man erkennt deutlich die Konvergenz für

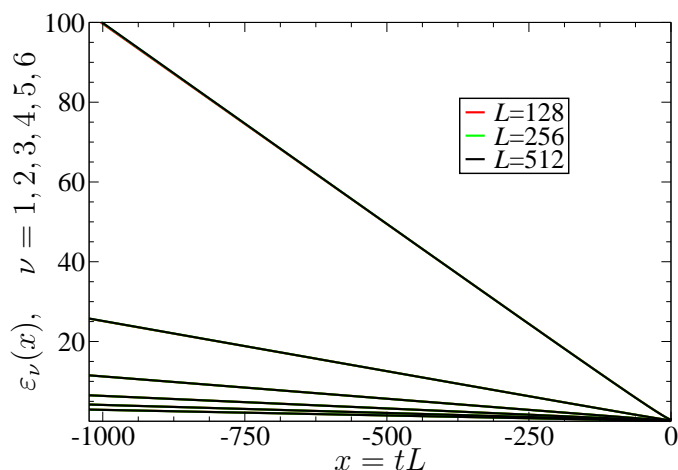


Abbildung 3.11: Die größten sechs Eigenwerte der Hesse-Matrix der modifizierten freien Energie $\hat{f}_L(V_z, t, 1)$ als Funktion der Skalenvariablen x : Die Kurven für verschiedene Systemgrößen liegen wieder sehr gut aufeinander. Die Eigenwerte divergieren hier alle algebraisch.

große Systeme gegen den Grenzwert $L \rightarrow \infty$.

Die Beschreibung der Korrekturen zum Skalenverhalten durch L_{eff} wurde in [169] vorgeschlagen und in [120] mit feldtheoretischen Methoden untermauert. Hier werden damit offenbar sehr gute Ergebnisse erzielt.

Die Skalenfunktion weist — im Gegensatz zu der des periodischen Systems [28] — ein ausgeprägtes Extremum unterhalb der kritischen Temperatur auf. Eine Analyse der Daten liefert die Lage des Minimums bei

$$x_{\min} = -4.55702477008(1) \quad (3.175a)$$

mit dem zugehörigen Funktionswert

$$\vartheta_{\min} \equiv \vartheta(x_{\min}) = -0.1268565841360(1). \quad (3.175b)$$

Oberhalb von T_c fällt die Kurve exponentiell auf Null ab. Das asymptotische Verhalten kann in sehr guter Näherung durch die Funktion

$$\vartheta(x) \simeq \frac{x}{8\pi} e^{-2x} \quad (3.176)$$

beschrieben werden. Die Konvergenz der gezeigten Funktionen für $x \rightarrow -\infty$ gegen den Goldstone-Wert

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \vartheta(x) = -\frac{\zeta(3)}{8\pi} \quad (3.177)$$

ist deutlich langsamer. Offensichtlich weicht die Skalenfunktion selbst bei $x = -30$ noch erheblich von ihrem Grenzwert ab. Das Verhalten für stark negative x ist allein aus der Numerik durch die langsame Konvergenz nur schwer zu erhalten und man ist auf analytische Methoden angewiesen, um das asymptotische Verhalten zu beschreiben. Die Analyse

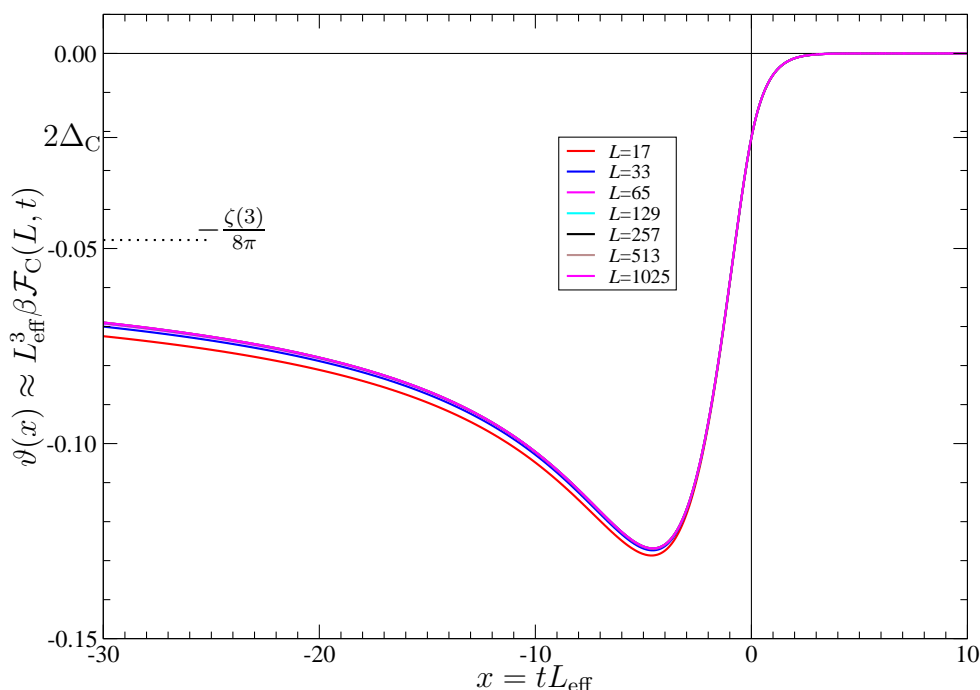


Abbildung 3.12: Die Skalenfunktion $\vartheta(x)$ für verschiedene Werte von L : Für große Werte von L liegen die Kurven sehr gut aufeinander.

des Tieftemperaturverhaltens ist mit dem nichtlinearen σ -Modell möglich. Darauf wird in Abschnitt 3.6.2 eingegangen. Dort ergibt sich, dass sich die Skalenfunktion der freien Energie asymptotisch wie

$$\Theta(x) \approx \frac{\zeta(3)}{16\pi} \left(-1 + \frac{c_1 \log |x| + d_1}{x} \right) \quad (3.178)$$

verhalten muss. Dabei ist $c_1 = 2$. Die Konstante d_1 kann aus den numerischen Ergebnissen bestimmt werden. Abbildung 3.14 zeigt die numerischen Ergebnisse des Tieftemperaturverhaltens der Skalenfunktion $\vartheta(x)$ für Systemgrößen $L = 17, 33, 65, 129, 257, 513, 1025$. Man beachte, dass die negative x -Achse logarithmisch dargestellt ist. Zusätzlich sind die Goldstone-Grenzwerte für $L = 17, 33, \infty$ sowie der kritische Wert $2\Delta_C$ als schwarz strichlierte Linien sowie eine numerisch bestimmte Asymptote eingezeichnet. Motiviert durch die Vorhersage der Theorie über das asymptotische Verhalten der Skalenfunktion ist in Abbildung 3.15 die Größe

$$\Upsilon(x) = x \left(1 - \frac{\vartheta(x)}{\vartheta(-\infty)} \right) \quad (3.179)$$

als Funktion von $-\log(-x)$ dargestellt. Die Auftragung wurde gerade so gewählt, dass die Kurven für $x \rightarrow -\infty$ gegen eine Gerade konvergieren. Die Steigung dieser Geraden entspricht dem Vorfaktor des Logarithmus und der Achsenabschnitt dem Vorfaktor der

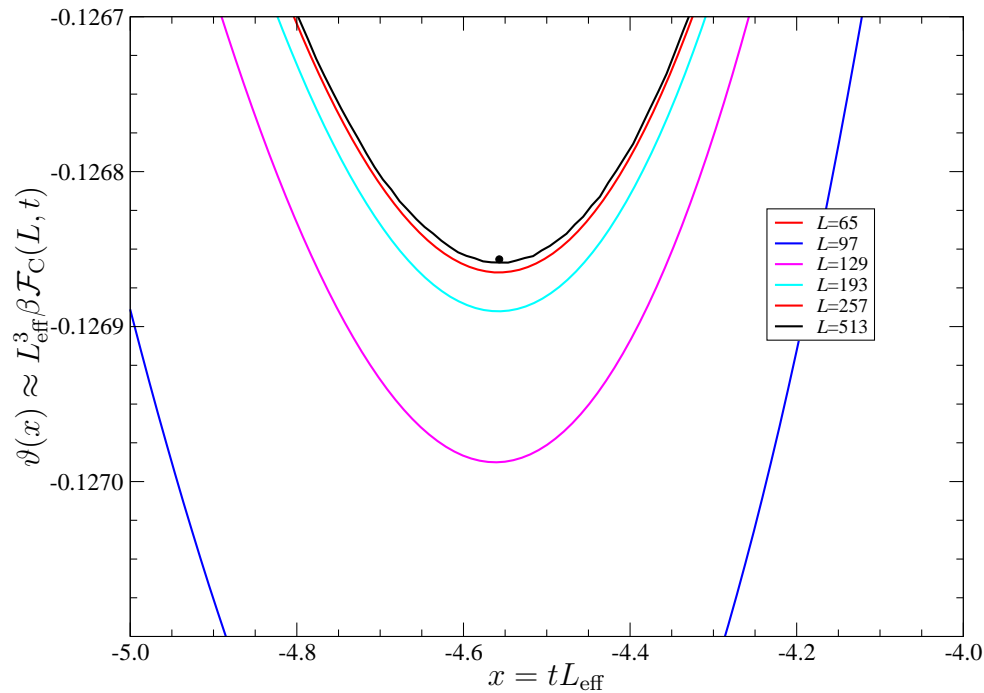


Abbildung 3.13: Ausschnittsvergrößerung von Abbildung 3.12: Dargestellt ist der Bereich in der Nähe des Extremums von $\vartheta(x)$ für verschiedene Werte von L . Der schwarze Punkt zeigt die Lage des Minimums für $L \rightarrow \infty$ nach Gleichung (3.175).

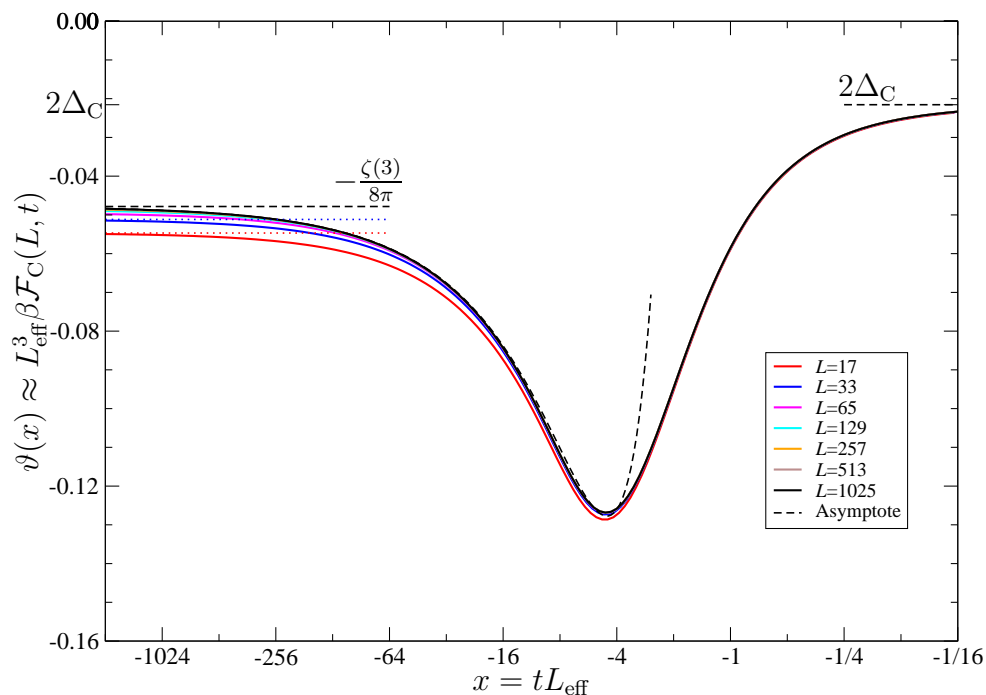


Abbildung 3.14: Tieftemperaturverhalten der Skalenfunktion $\vartheta(x)$: Man beachte, dass die x -Achse logarithmisch dargestellt ist. Die Kurven für endliche L konvergieren nicht gegen den Goldstone-Wert des unendlichen Systems, sondern gegen Werte unterhalb davon.

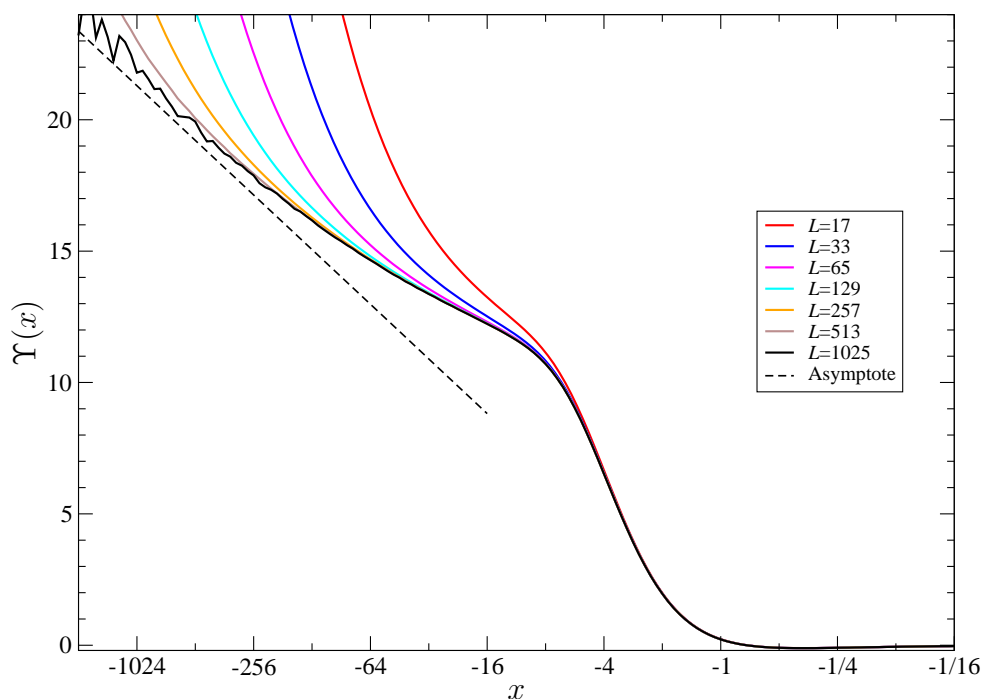


Abbildung 3.15: Analyse des asymptotischen Verhaltens der Skalenfunktion $\vartheta(x)$. Die Schwankungen in der Kurve für $L = 1025$ rühren von der einfachen Rechengenauigkeit her. Die eingezeichnete Asymptote entspricht Gleichung (3.178) mit $c_1 = 2$, $d_1 = 1$ sowie $c_2 = d_2 = 0$.

x^{-1} -Korrektur. Man erkennt, dass die Kurven für endliches L unterhalb von $|x| \simeq L$ vom gemeinsamen Verlauf abweichen und divergieren, da sie gegen den Goldstone-Wert für endliches L statt $\vartheta(-\infty)$ konvergieren und der Fehler durch den Vorfaktor x verstärkt wird. Daher werden Systemgrößen $L \gtrsim |x|$ benötigt, um korrekte Ergebnisse bis x zu erhalten. Es ist aber zu erkennen, dass sich die Kurven der Asymptote mit der Steigung -2 annähern und der von der Theorie vorhergesagte Vorfaktor des Logarithmus somit richtig ist. Dabei ist die Benutzung der korrekten Skalenvariablen $x = tL_{\text{eff}}$ essentiell, da sich in $\Upsilon(x)$ sonst kein Datenkollaps ergeben würde. Für eine genauere Analyse macht man den Ansatz

$$\Theta(x) \approx \frac{\zeta(3)}{16\pi} \left(-1 + \sum_{k=1}^m \frac{c_k \log |x| + d_k}{x^k} \right) \quad (3.180)$$

und fittet diese Funktion an die vorhandenen Daten. Dadurch ergeben sich die Parameter $c_1 = 2.0(1)$ und $d_1 = 1.0(1)$ sowie $c_2 \simeq -15.9$ und $d_2 \simeq 14.3$. Die sich dadurch ergebende Asymptote ist als schwarz strichlierte Kurve in den Abbildungen 3.14 und 3.15 eingezeichnet.

Abbildung 3.16 zeigt die erste und zweite Ableitung der Skalenfunktion $\vartheta(x)$. $\vartheta''(x)$ hat eine vom *Bulk*-Term herrührende *Cusp*-Singularität bei $x = 0$. Der Wert am kritischen

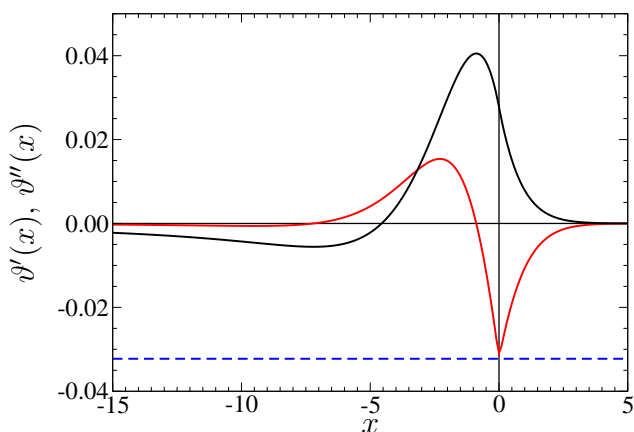


Abbildung 3.16: Die erste und zweite Ableitung der Skalenfunktion $\vartheta(x)$ der Casimir-Kraft: $\vartheta''(x)$ hat einen *Cusp* bei $x = 0$. Es gilt $\vartheta''(x = 0) = -1/\pi^3$ (blau strichlierte Linie).

Punkt lässt sich analytisch berechnen und lautet $\vartheta''(0) = -1/\pi^3$ [154].

Bevor die Skalenfunktion der freien Energie bestimmt wird, soll das Potential für $x < 0$ analysiert werden. Dazu ist es in Abbildung 3.17 als *Crossover-Plot* für $L = 512, 1024$ und verschiedene Werte von $x < 0$ dargestellt. Aufgetragen ist dabei das mit t^{-2} reskalierte Potential V_z gegen die mit t multiplizierte Ortskoordinate z . Für Werte $x \gtrsim -8$ liegen die Kurven fast vollständig auf der Asymptoten $1/(2zt)^2$. Erst für Werte $x \lesssim -512$ ist der *Crossover* zur Tieftemperaturasymptoten $-1/[2(zt)^3]$ vollzogen. Dies ist im Einklang mit der langsamen Konvergenz der Skalenfunktion gegen den Goldstone-Wert für $x \rightarrow -\infty$. Es bleibt noch die Berechnung der Skalenfunktion der freien Energie. Diese kann aus dem Zusammenhang zwischen der Casimir-Kraft $\mathcal{F}_C(L, t)$ und dem *Finite-Size*-Anteil der freien Energie $f_{\text{res}}(L, t)$

$$\beta \mathcal{F}_C(L, t) = -\frac{\partial f_{\text{res}}(L, t)}{\partial L} \quad (3.181)$$

bestimmt werden. Aus (3.181) ergibt sich die Relation

$$\vartheta(x) = (d-1)\Theta(x) - \frac{x}{\nu}\Theta'(x) \quad (3.182)$$

zwischen den Skalenfunktionen $\vartheta(x)$ der Kraft und $\Theta(x)$ der freien Energie. Die Funktion $\Theta(x)$ erhält man aus $\vartheta(x)$ durch Lösen der linearen Differentialgleichung erster Ordnung (3.182). Mit der Methode der Separation der Variablen erhält man mit der Anfangsbedingung $\Theta(\infty) = 0$ die Lösung der Differentialgleichung und es ergibt sich der Zusammenhang

$$\Theta(x) = \int_1^\infty \frac{ds}{s^d} \vartheta(xs^{1/\nu}). \quad (3.183)$$

Für die Berechnung der Skalenfunktion der freien Energie ist also die Kenntnis der gesamten Skalenfunktion der Kraft erforderlich, insbesondere auch des Verhaltens für $x \rightarrow \pm\infty$. Mit dem asymptotischen Verhalten (3.178) kann jetzt das Integral (3.183) in $d = 3$ mit

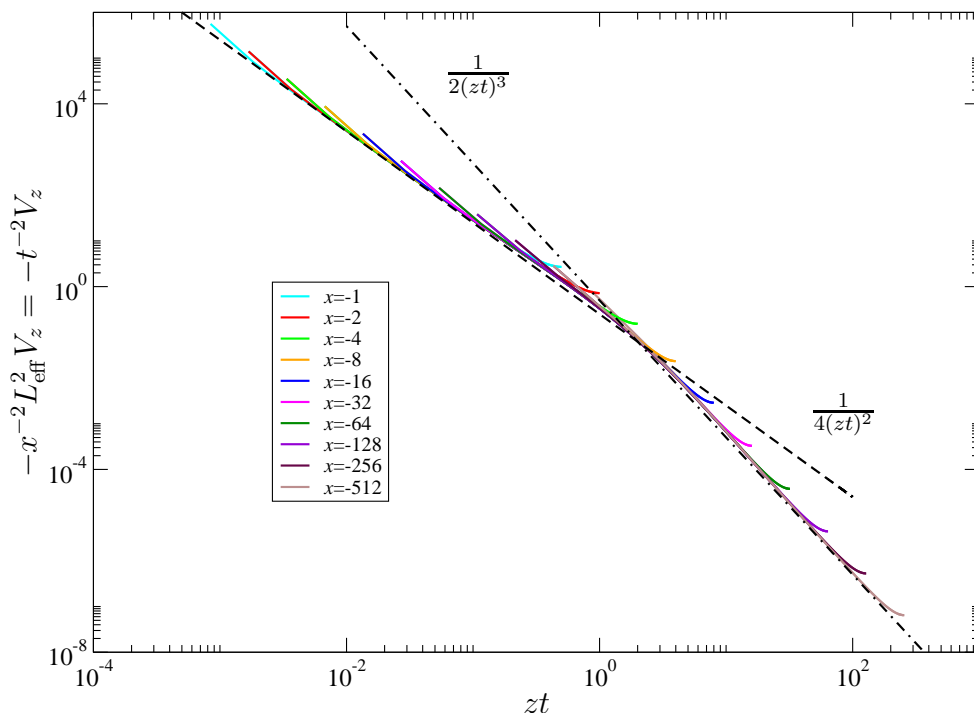


Abbildung 3.17: *Crossover-Plot* des Potentials für verschiedene Werte von $x < 0$. Die Kurven für die Systemgrößen $L = 512, 1024$ liegen sehr gut aufeinander.

$\nu = 1$ numerisch berechnet werden. Die so erhaltenen Approximationen der Skalenfunktion des *Finite-Size*-Anteils der freien Energie sind für Systemgrößen bis $L = 1025$ in Abbildung 3.18 dargestellt. Auch hier liegen die Kurven für große Systeme wieder sehr gut aufeinander. Die Skalenfunktion $\Theta(x)$ zeigt qualitativ das gleiche Verhalten wie $\vartheta(x)$, insbesondere ein ausgeprägtes Minimum unterhalb der kritischen Temperatur und einen endlichen Grenzwert für $x \rightarrow -\infty$.

Tieftemperaturverhalten und nichtlineares σ -Modell

In diesem Kapitel soll das Tieftemperaturverhalten der Skalenfunktionen $\vartheta(x)$ und $\Theta(x)$ mit Hilfe des nichtlinearen σ -Modells untersucht werden. Ziel ist es dabei, das asymptotische Verhalten der Skalenfunktionen für $x \rightarrow -\infty$ analytisch zu beschreiben. Die Vorgehensweise zur Herleitung des Modells orientiert sich dabei an [170, Kapitel 8] sowie [171] und [172] und findet sich in [27, Anhang B]. Die anhand dieses Modells durchgeführte Analyse des asymptotischen Verhaltens der Skalenfunktionen wurde in Anhang C von [27] durchgeführt und soll hier der Vollständigkeit halber nachvollzogen werden.

Zunächst soll aus dem *Hamiltonian* der $O(n)$ -symmetrischen ϕ^4 -Theorie (siehe Gleichung (3.5)) ein effektiver Tieftemperatur-*Hamiltonian* hergeleitet werden. Es stellt sich

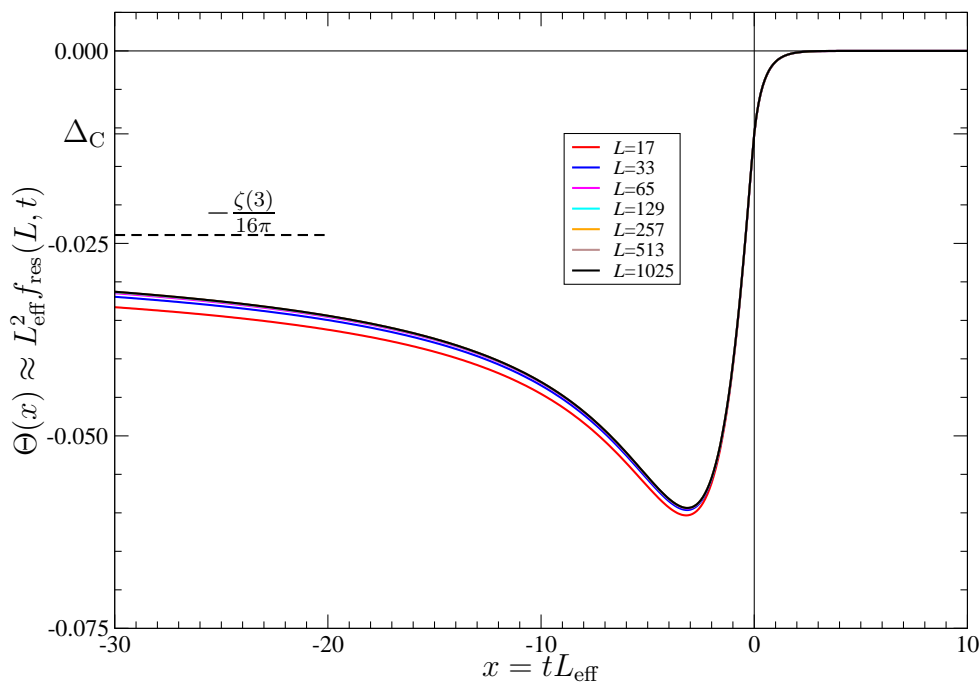


Abbildung 3.18: Die Skalenfunktion $\Theta(x)$ für verschiedene Werte von L . Die Funktion zeigt qualitativ das gleiche Verhalten wie $\vartheta(x)$.

dabei heraus, dass das Tieftemperaturverhalten des Systems durch ein nichtlineares σ -Modell beschrieben werden kann. Anschließend wird aus dieser effektiven Theorie die asymptotische Form der Skalenfunktion $\Theta(x)$ abgeleitet.

Zur Herleitung des Tieftemperaturmodells wird zunächst das Ordnungsparameterfeld $\phi(\mathbf{x})$ in sphärischen Koordinaten geschrieben, also in seinen Betrag $M(\mathbf{x})$ und seine Orientierung $\mathbf{s}(\mathbf{x})$ aufgespalten:

$$\phi(\mathbf{x}) = M(\mathbf{x})\mathbf{s}(\mathbf{x}) \quad \text{mit} \quad |\mathbf{s}(\mathbf{x})|^2 = 1. \quad (3.184)$$

Einsetzen dieser Zerlegung in den üblichen ϕ^4 -Hamiltonian (3.5) liefert die Zustandssumme

$$\mathcal{Z} = \left\{ \prod_{\mathbf{x} \in \mathfrak{Y}} \int_{M(\mathbf{x}) \geq 0} [M(\mathbf{x})]^{n-1} \right\} \int \mathcal{D}[\mathbf{s}(\mathbf{x})] \delta[\mathbf{s}^2(\mathbf{x}) - 1] e^{-\mathcal{H}[M, \mathbf{s}]}. \quad (3.185)$$

Das Funktional $\mathcal{H}[M, \mathbf{s}]$ kann als Summe zweier Beiträge geschrieben werden:

$$\mathcal{H}[M, \mathbf{s}] = \mathcal{H}_1[M] + \mathcal{H}_2[M, \mathbf{s}]. \quad (3.186)$$

Der Beitrag \mathcal{H}_1 ist nur vom Betrag des Ordnungsparameters abhängig und lautet

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1[M] = \int_{\mathfrak{Y}} d^d x \left\{ \frac{1}{2} [\nabla M(\mathbf{x})]^2 + \frac{g}{4!n} \left(M(\mathbf{x})^2 + \frac{6n\hat{\tau}}{g} \right)^2 \right\} \\ + \int_{\mathfrak{Y}} d^{d-1} y \left[\frac{\dot{c}_1}{2} M(0, \mathbf{y})^2 + \frac{\dot{c}_2}{2} M(L, \mathbf{y})^2 \right]. \end{aligned} \quad (3.187)$$

Dabei wurde eine Konstante hinzugefügt. Diese spielt bei der Berechnung von Erwartungswerten jedoch keine Rolle, da sie sich sofort wieder herauskürzt. Bei der Berechnung von freien Energien liefert sie ebenfalls nur triviale Terme, die sich zum Beispiel bei der Berechnung der Exzess-Freien-Energie aufheben.

Der zweite Beitrag zum *Hamiltonian* beschreibt eine Kopplung zwischen Betrag und Orientierung des Ordnungsparameters. Er lautet

$$\mathcal{H}_2[M, \mathbf{s}] = \int_{\mathfrak{Y}} d^d x [M(\mathbf{x})]^2 [\nabla \mathbf{s}(\mathbf{x})]^2. \quad (3.188)$$

Aufgrund der Eigenschaft $2 \sum_{\alpha} s_{\alpha} \nabla s_{\alpha} = \nabla (\sum_{\alpha} s_{\alpha}^2) = \mathbf{0}$ fallen die Kopplungsbeiträge zum Gradiententerm von \mathcal{H} weg.

Durch Ausintegration der M -Freiheitsgrade in Gleichung (3.185) ist es möglich, einen effektiven *Hamiltonian* $\mathcal{H}_{\text{eff}}[\mathbf{s}]$ zu definieren. Dazu schreibt man

$$e^{-\mathcal{H}_{\text{eff}}[\mathbf{s}]} = \left\{ \prod_{\mathbf{x} \in \mathfrak{Y}} \int_{M(\mathbf{x}) \geq 0} [M(\mathbf{x})]^{n-1} dM(\mathbf{x}) \right\} e^{-\mathcal{H}_1[M] - \mathcal{H}_2[M, \mathbf{s}]}, \quad (3.189)$$

womit sich dann die Zustandssumme als

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[\mathbf{s}(\mathbf{x})] \delta[\mathbf{s}^2(\mathbf{x}) - 1] e^{-\mathcal{H}_{\text{eff}}[\mathbf{s}]} \quad (3.190)$$

schreiben lässt. Im Folgenden soll nun die M -Integration ausgeführt und gezeigt werden, dass dies auf ein nichtlineares σ -Modell führt. Davon ausgehend, kann dann die Tieftemperaturasymptotik der Skalenfunktionen $\Theta(x)$ und $\vartheta(x)$ bestimmt werden.

Es ist möglich zu zeigen, dass der Betrag M vom Ordnungsparameter nur schwach um seinen Erwartungswert fluktuiert [170]. Zudem führt die Wechselwirkung zwischen den Fluktuationen des Betrags M und denen der Orientierung \mathbf{s} nicht zu singulären Korrekturen. Bei der Berechnung des Funktionalintegrals über M genügt es daher im Tieftemperaturlimes $\hat{\tau} \rightarrow -\infty$, $g \rightarrow \infty$, mit $g/\hat{\tau} = \text{const}$, die Nullschleifenordnung zu betrachten. In dieser Näherung muss nach Extrema der Integranden gesucht werden. Anwendung der Euler-Lagrange-Gleichungen liefert die notwendige Bedingung für M . Es ergibt sich die

Bewegungsgleichung

$$[-\nabla^2 + \overset{\circ}{\tau} + (\nabla \mathbf{s})^2] M + \frac{g}{6n} M^3 - \frac{n-1}{a^d} M^{-1} = 0 \quad (3.191)$$

mit den Randbedingungen

$$(\partial_z - \overset{\circ}{c}_1)M|_{z=0} = (\partial_z + \overset{\circ}{c}_2)M|_{z=L} = 0. \quad (3.192)$$

Der Term proportional zu M^{-1} in der Bewegungsgleichung hat seinen Ursprung in dem $\prod_{\mathbf{x}} M^{n-1}(\mathbf{x})$ -Term im Maß in Gleichung (3.185). Die Konstante a ist eine bei der Umformung auftretende Diskretisierungslänge beziehungsweise Gitterkonstante. Dieser Beitrag gibt keine führenden Korrekturen im genannten Tieftemperaturlimites und kann daher vernachlässigt werden. Wird auch der Term $(\nabla \mathbf{s})^2$ vernachlässigt, so muss aufgrund der Translationsinvarianz in \mathbf{y} -Richtung nur nach Lösungen $M(z)$ der Bewegungsgleichung gesucht werden. Aus (3.191) wird dann

$$\left[-\frac{1}{|\overset{\circ}{\tau}|} \partial_z^2 - 1 + \frac{g}{6n|\overset{\circ}{\tau}|} M^2(z) \right] M(z) = 0 \quad (3.193)$$

mit den Randbedingungen (3.192). Der Vorfaktor von $-\partial_z^2$ definiert eine Längenskala $\propto |\overset{\circ}{\tau}|^{-1/2}$. Diese geht in dem hier behandelten Tieftemperaturlimites gegen Null und wird somit viel kleiner als die Filmdicke L . Die Lösung $M(z)$ von Gleichung (3.193) muss also außerhalb einer Grenzregion der Dicke $\ell_0 \propto |\overset{\circ}{\tau}|^{-1/2}$ gegen den *Bulk*-Wert M_b gehen. Dieser Wert kann sofort aus Gleichung (3.193) abgelesen werden. Aus der Bedingung $M(z) = M_b = \text{const.}$ ergibt sich

$$M_b = \sqrt{\frac{6|\overset{\circ}{\tau}|n}{g}}. \quad (3.194)$$

Daraus folgt, dass der Exzess-Oberflächenbeitrag sich verhält wie

$$\int_0^{\ell_0} dz (M(z) - M_b) \sim |\overset{\circ}{\tau}|^{-1/2} \quad (3.195)$$

und damit im Tieftemperaturlimites verschwindet. Gleiches gilt für die Terme, welche bei Berücksichtigung des Beitrags $(\nabla \mathbf{s})^2$ zur Bewegungsgleichung (3.193) auftreten. Auch sie verschwinden in diesem Grenzwert.

Somit wird aus Gleichung (3.189) das Hamilton-Funktional eines nichtlinearen σ -Modells.

Es ergibt sich

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}[\mathbf{s}] = \frac{n\rho_{\text{st}}}{2} \int_{\ell_0}^{L-\ell_0} dz \int d^{d-1}y (\nabla \mathbf{s})^2, \quad \text{mit } \mathbf{s}^2(\mathbf{x}) = 1. \quad (3.196)$$

Dabei ist ρ_{st} die reduzierte Spinsteifigkeit mit

$$\rho_{\text{st}} = \frac{M_{\text{b}}^2}{n} = \frac{6\dot{\tau}}{g}. \quad (3.197)$$

Sie kann für $T < T_c$ im Limes $n \rightarrow \infty$ exakt berechnet werden [173, Kapitel 8.2 und 11.2.3], [174] und ergibt sich zu

$$\rho_{\text{st}} = \frac{6}{g}(\dot{\tau}_c - \dot{\tau}) = -\frac{6}{g}\tau \quad (3.198)$$

beziehungsweise — ausgedrückt durch die Temperaturvariable t —

$$\rho_{\text{st}} = -\frac{t}{4\pi}. \quad (3.199)$$

Die Länge ℓ_0 in Gleichung (3.196) dient im Folgenden als *Cutoff* zur Vermeidung von UV-Divergenzen. Aus dem Skalenplot $-t^{-2}V_z$ gegen $y = z|t|$ (siehe Abbildung 3.17) erkennt man, dass bei $z^\times = 2/|t|$ ein *Crossover* vom Verhalten $1/4y^2$ zu $1/2y^3$ erfolgt. Daher wählt man

$$\ell_0 = \frac{1}{c_t|t|} \quad (3.200)$$

mit $c_t \simeq 1/2$ als *Cutoff*-Länge.

Führt man ein zusätzliches *Bulk* Magnetfeld \mathbf{h} ein, so wird aus Gleichung (3.196)

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}[\mathbf{s}] = \int_{\ell_0}^{L-\ell_0} dz \int d^{d-1}y \left[\frac{n\rho_{\text{st}}}{2} (\nabla \mathbf{s})^2 - \mathbf{h} \cdot \mathbf{s} \right] \quad \text{mit } \mathbf{s}^2(\mathbf{x}) = 1. \quad (3.201)$$

Wird das Ordnungsparameterfeld \mathbf{s} in die $(n-1)$ -dimensionale Komponente senkrecht zum Magnetfeld und die Komponente parallel dazu aufgeteilt, $\mathbf{s} = (\boldsymbol{\pi}, \sigma)$, so ergibt sich

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}[\boldsymbol{\pi}, \sigma] = \frac{n\rho_{\text{st}}}{2} \int_{\ell_0}^{L-\ell_0} dz \int d^{d-1}y \left\{ \frac{n\rho_{\text{st}}}{2} [(\nabla \boldsymbol{\pi})^2 + (\nabla \sigma)^2] - h\sigma \right\}. \quad (3.202)$$

Wegen $\mathbf{s}^2 = 1$ gilt

$$\sigma = \sqrt{1 - \boldsymbol{\pi}^2} \quad (3.203)$$

und aus dem effektiven *Hamiltonian* wird

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}[\boldsymbol{\pi}] = \int_{\ell_0}^{L-\ell_0} dz \int d^{d-1}y \left\{ \frac{n\rho_{\text{st}}}{2} \left[(\nabla\boldsymbol{\pi})^2 + \frac{(\nabla\boldsymbol{\pi}^2)^2}{1-\boldsymbol{\pi}^2} \right] - h\sqrt{1-\boldsymbol{\pi}^2} \right\}. \quad (3.204)$$

Bei der Berechnung der Zustandssumme tritt dann die Jacobi-Determinante im Funktionalintegral auf. Es gilt dann

$$\mathcal{Z} = \left(\prod_{\mathbf{x}} \int \frac{d\boldsymbol{\pi}(\mathbf{x})}{\sqrt{1-\boldsymbol{\pi}^2(\mathbf{x})}} \right) e^{-\mathcal{H}_{\text{eff}}[\boldsymbol{\pi}]}. \quad (3.205)$$

Diese Änderung des Maßes verschwindet jedoch in der hier verwendeten dimensionellen Regularisierung: Schreibt man sie nämlich in aufexponentierter Form als zusätzlichen Beitrag von \mathcal{H}_{eff} , so hat dieser Term ein $\delta(0)$ als Vorfaktor, was jedoch in dimensioneller Regularisierung gleich Null ist (siehe Kapitel 13.5.2 in [107]).

Für die Berechnung der Skalenfunktion $\Theta(x)$ im Tieftemperaturlimit wird das Hamilton-Funktional in $\boldsymbol{\pi}^2$ entwickelt. Mit der Reskalierung $\boldsymbol{\pi} \rightarrow (n\rho_{\text{st}})^{-1/2}\boldsymbol{\pi}$ und $h \rightarrow n\rho_{\text{st}}h$ ergibt sich in führender Ordnung in ρ_{st}^{-1}

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}[\boldsymbol{\pi}] = \int_{\ell_0}^{L-\ell_0} dz \int d^{d-1}y \left[\frac{1}{2}(\nabla\boldsymbol{\pi})^2 + \frac{h}{2}\boldsymbol{\pi}^2 + \frac{1}{8n\rho_{\text{st}}}(\nabla\boldsymbol{\pi}^2)^2 - \frac{h}{8} \frac{(\boldsymbol{\pi}^2)^2}{n\rho_{\text{st}}} + \dots \right]. \quad (3.206)$$

Dabei wurde der von $\boldsymbol{\pi}$ unabhängige Term $-h$ vernachlässigt, da er keine relevanten Beiträge liefert. An dem Gaußschen Anteil von (3.206) kann der freie Propagator sofort abgelesen werden. Er erfüllt Neumann-Randbedingungen auf den beiden Oberflächen. Das Magnetfeld tritt hier an der Stelle auf, an der sonst die Temperatur steht, nämlich als Vorfaktor des quadratischen Terms. Daher lässt sich der Propagator mit Hilfe der Spiegelladungsmethode schreiben als

$$G_{\text{N,N}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'|L) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} [G_{\text{b}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}' - 2jL\mathbf{e}_z) + G_{\text{b}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}' + 2z'\mathbf{e}_z - 2jL\mathbf{e}_z)] \quad (3.207)$$

mit dem *Bulk*-Propagator des dreidimensionalen Modells

$$G_{\text{b}}(\mathbf{x}) = \frac{e^{-|\mathbf{x}|\sqrt{h}}}{4\pi|\mathbf{x}|}. \quad (3.208)$$

Hiervon ausgehend, kann bei $h = 0$ die Taylorentwicklung in ρ_{st}^{-1} von $L^2 f_{\text{res}}$ berechnet werden. Die nullte Ordnung ist gegeben durch den Goldstone-Grenzwert. Dieser ist identisch

zur Casimir-Amplitude des Gaußschen Modells mit Neumann-Randbedingungen

$$\Delta_{\text{C,G}}^{(\text{N,N})}(d=3) = -\frac{\zeta(3)}{16\pi}. \quad (3.209)$$

Der Term linear in $1/\rho_{\text{st}}$ hat seinen Ursprung im Beitrag $(\nabla\boldsymbol{\pi}^2)^2$ zum *Hamiltonian* und ist durch das Integral

$$J_{\ell_0} = \frac{1}{8\rho_{\text{st}}} \int_{\ell_0}^{L-\ell_0} dz [\partial_z G_{\text{N,N}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}|L)]^2 \quad (3.210)$$

gegeben. Die Ableitung des Propagators $G_{\text{N,N}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}|L)$ kann einfach berechnet werden. Das Ergebnis kann durch die erste Ableitung der Digamma-Funktion $\psi(x) = \Gamma'(x)/\Gamma(x)$ ausgedrückt werden. Es ergibt sich

$$\partial_z G_{\text{N,N}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}|L) = -\frac{1}{8\pi L^2} \left\{ \frac{1}{\zeta^2} - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(\zeta-j)^2} + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(\zeta+j)^2} \right\} \quad (3.211)$$

$$= -\frac{1}{8\pi L^2} \left[\frac{1}{\zeta^2} - \psi'(1-\zeta) + \psi'(1+\zeta) \right]. \quad (3.212)$$

Mit der Definition

$$f(\zeta) = \frac{1}{\zeta^2} + \psi'(1+\zeta) \quad (3.213)$$

lässt sich dies symmetrisch schreiben als

$$8\pi L^2 \partial_z G_{\text{N,N}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}|L) = f(1-\zeta) - f(\zeta). \quad (3.214)$$

Daraus folgt unter Ausnutzung der Symmetrie

$$J_{\ell_0} = \frac{1}{4\rho_{\text{st}}} \frac{1}{64\pi^2 L^3} \int_{\ell_0/L}^{1/2} d\zeta [f(\zeta) - f(1-\zeta)]^2. \quad (3.215)$$

Dieses Integral kann nicht analytisch geschlossen berechnet werden. Es ist jedoch möglich, das Verhalten des Integrals abhängig von der Filmdicke L zu bestimmen. Dazu werden alle bei $\ell_0 = 0$ divergenten Beiträge zum Integral abgespalten. Dazu schreibt man

$$\begin{aligned} [f(\zeta) - f(1-\zeta)]^2 &= \frac{1}{\zeta^4} - \frac{8\zeta(3)}{\zeta} + 2 \frac{\psi'(1+\zeta) - \psi'(1-\zeta) + 4\zeta(3)\zeta}{\zeta^2} + \\ &+ [\psi'(1-\zeta) - \psi'(1+\zeta)]^2. \end{aligned} \quad (3.216)$$

Die ersten beiden Summanden liefern bei der Integration im Limes $\ell_0 \rightarrow 0$ divergierende Beiträge. Die zwei übrigen Summanden enthalten keine Pole bei $\zeta = 0$. Es ergibt sich damit

$$J_{\ell_0} = \frac{1}{256\rho_{\text{st}}\pi^2 L^3} \left[\frac{L^3}{3\ell_0^3} - \frac{8}{3} - 8\zeta(3) \log\left(\frac{L}{2\ell_0}\right) + 2K_{\ell_0} + R_{\ell_0} \right] \quad (3.217)$$

mit den Integralen

$$K_{\ell_0} = \int_{\ell_0/L}^{1/2} d\zeta \frac{\psi'(1+\zeta) - \psi'(1-\zeta) + 4\zeta(3)\zeta}{\zeta^2} \quad (3.218)$$

sowie

$$R_{\ell_0} = \int_{\ell_0/L}^{1/2} d\zeta [\psi'(1-\zeta) - \psi'(1+\zeta)]^2. \quad (3.219)$$

Eine Analyse der Potenzen in L in Gleichung (3.217) zeigt, dass der erste Term in der eckigen Klammer ein Oberflächenterm ist. Dieser muss zur Berechnung des *Finite-Size*-Anteils subtrahiert werden. Subtrahiert man zudem den logarithmischen Term, so lässt sich der Limes $\ell_0 \rightarrow 0$ berechnen. Es ergibt sich damit

$$L^2 f_{\text{res}} = -\frac{\zeta(3)}{16\pi} - \frac{1}{\rho_{\text{st}}L} \left[\frac{\zeta(3)}{32\pi^2} \log\left(\frac{L}{2\ell_0}\right) - \frac{r_0}{256\pi^2} + o(L^{-1}) \right] + o(\rho_{\text{st}}^{-1}). \quad (3.220)$$

Die Konstante r_0 lautet dabei

$$r_0 = \frac{8}{3} - 2K_0 - R_0. \quad (3.221)$$

Die Integrale K_0 und R_0 können numerisch berechnet werden. Es ergeben sich die Zahlen

$$K_0 = -1.2806128714873440818\dots \quad (3.222)$$

$$R_0 = 1.7854912528131011977\dots, \quad (3.223)$$

woraus der Wert der Konstanten r_0 folgt

$$r_0 = 3.4424011568282536326\dots \quad (3.224)$$

Einsetzen der Spinstufigkeit ρ_{st} und der Regularisierungslänge ℓ_0 liefert das asymptotische Verhalten der Skalenfunktion $\Theta(x)$

$$\Theta(x) \approx -\frac{\zeta(3)}{16\pi} + \frac{\zeta(3) \log|x|}{8\pi x} - \frac{r_0 - 8 \log(c_t/2)\zeta(3)}{64\pi} \frac{1}{x}. \quad (3.225)$$

Gemäß Gleichung (3.182) kann daraus das Verhalten der Skalenfunktion $\vartheta(x)$ bestimmt werden. Man erhält

$$\vartheta(x) \approx -\frac{\zeta(3)}{8\pi} + \frac{3\zeta(3) \log|x|}{8\pi x} - \frac{3r_0 + 8\zeta(3) - 24 \log(c_t/2)\zeta(3)}{64\pi} \frac{1}{x}. \quad (3.226)$$

Der Koeffizient des x^{-1} -Terms ist also explizit von der Wahl der *Cutoff*-Länge ℓ_0 abhängig. Daher kann man nicht erwarten, dass er mit dem in der Numerik gefundenen Koeffizienten übereinstimmt. Im Gegensatz dazu ist der Vorfaktor des $\log|x|/x$ -Terms unabhängig von ℓ_0 . Zudem ist er innerhalb der Fehlertoleranzen identisch mit dem an die numerischen Daten angefitzten Koeffizienten.

Damit ist es gelungen, den Ansatz (3.178) für das Tieftemperaturverhalten der Skalenfunktionen zu motivieren, indem gezeigt wurde, dass das übliche ϕ^4 -Modell im Tieftemperaturlimit auf ein nichtlineares σ -Modell abgebildet werden kann und aus diesem das asymptotische Verhalten folgt. Das vorgestellte Verfahren ist jedoch nicht dafür geeignet, die folgenden Entwicklungskoeffizienten zu bestimmen.

3.7 Einfluss von Magnetfeldern

Die in dieser Arbeit bislang vorgestellten Rechnungen und Ergebnisse beschränken sich auf Systeme, bei welchen die $O(n)$ -Symmetrie nicht gebrochen ist. In Teil 2 der Arbeit war die Analyse auf den *Bulk*-kritischen Punkt und $c_j \geq c_{sp}$ beschränkt. Nach dem in Abbildung 1.5 gezeigten Phasendiagramm ist dadurch gewährleistet, dass im System keine spontane Symmetriebrechung auftritt. Da auch keine externen Felder berücksichtigt wurden, blieb die $O(n)$ -Symmetrie also erhalten. Ursache für diese Einschränkungen war, dass die dort verwendete ϵ -Entwicklung eine Symmetriebrechung — sei diese spontan oder durch externe Magnetfelder induziert — nicht oder nur mit sehr großen technischen Schwierigkeiten handhaben kann. Auch die in diesem Teil der Arbeit bisher vorgestellten Untersuchungen beschränkten sich auf Systeme ohne Symmetriebrechung: Eine spontane Symmetriebrechung für endliche Filmdicken bei tiefen Temperaturen ist im *Large-n*-Limes durch das Mermin-Wagner-Theorem ausgeschlossen und eine Berechnung der Symmetrie durch externe Felder ergibt, will man qualitativ korrekte Ergebnisse für die aus Experimenten an suprafluidem Helium bekannten Skalenfunktionen des $O(2)$ -symmetrischen dreidimensionalen XY-Modells erhalten, wenig Sinn, da in den Experimenten keine symmetriebrechenden Felder existieren.

Für die Beschreibung des thermodynamischen Casimir-Effekts in binären Flüssigkeitsgemischen jedoch ist die Berücksichtigung von externen Feldern unerlässlich, da hier immer

zumindest Oberflächenfelder auftreten. Im Folgenden soll der Einfluss einer solchen von außen in das System gebrachten Symmetriebrechung im *Large-n*-Limes untersucht werden. Die so erhaltenen Skalenfunktionen können jedoch nur bedingt mit experimentellen Ergebnissen für binäre Flüssigkeitsgemische verglichen werden: Insbesondere im Tieftemperaturbereich erwartet man aufgrund der kontinuierlichen Symmetrie des *Large-n*-Limes qualitativ andere Ergebnisse als bei der Ising-Universalitätsklasse. Im Temperaturbereich $T \gtrsim T_{c,\infty}$ sollten die Resultate zumindest qualitativ übereinstimmen.¹¹

Im Folgenden werden zunächst in die bisher verwendete ϕ^4 -Theorie nichtverschwindende *Bulk*- und Oberflächenfelder einbezogen. Dann werden die sich daraus ergebenden Änderungen der Selbstkonsistenzgleichung und der freien Energie hergeleitet. Diese Ergebnisse werden dann verwendet, um zunächst den Einfluss von *Bulk*-Feldern zu untersuchen. Damit werden die analytischen Rechnungen von Danchev [28, 29] für das sphärische Modell mit periodischen Randbedingungen auf experimentell relevante offene Randbedingungen erweitert. Anschließend werden auch die Auswirkungen von Oberflächenfeldern analysiert. Hier tritt ein deutlich reichhaltigeres Verhalten der Skalenfunktionen auf. Insbesondere ergeben sich wieder *Crossover* zwischen attraktiven und repulsiven Casimir-Kräften. Dies wird beispielhaft am *Bulk*-kritischen Punkt demonstriert.

Zu dem bisher in dieser Arbeit verwendeten $O(n)$ -symmetrischen ϕ^4 -*Hamiltonian* wird im Folgenden der nicht- $O(n)$ -symmetrische Magnetfeld-Anteil

$$\mathcal{H}_{\text{MF}}[\phi, \mathbf{h}_b, \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2] = - \int d^d x \mathbf{h}_b \cdot \phi - \int d^{d-1} y [\mathbf{h}_1 \cdot \phi(\mathbf{y}, 0) + \mathbf{h}_2 \cdot \phi(\mathbf{y}, L)] \quad (3.227)$$

addiert. Dieser setzt sich aus zwei Anteilen zusammen: einem, der das ortsunabhängige *Bulk*-Magnetfeld \mathbf{h}_b beschreibt und einem zweiten, der die zwei verschiedenen Oberflächenfelder \mathbf{h}_j modelliert.

Die bisher geltenden Robin-Randbedingungen (Gleichung (3.6)) müssen dann gemäß

$$(\partial_z - \mathring{c}_1)\phi|_{z=0} = -\mathbf{h}_1 \quad (3.228a)$$

beziehungsweise

$$(-\partial_z - \mathring{c}_2)\phi|_{z=0} = -\mathbf{h}_2 \quad (3.228b)$$

modifiziert werden [93].

Statt der Implementation der Oberflächenfelder über diese Randbedingungen ist es auch

¹¹Im Falle von periodischen Randbedingungen weicht die Casimir-Amplitude des Ising-Modells $\Delta_{C,n=1}^{(\text{per})} = -0.1526(10)$ sogar nur um weniger als 1% von der des *Large-n*-Modells $\Delta_{C,n \rightarrow \infty}^{(\text{per})} = -2\zeta(3)/5\pi$ ab [11, 28].

möglich, ein z -abhängiges Magnetfeld zu definieren, welches den Beitrag

$$\mathcal{H}_{\text{MF}}[\boldsymbol{\phi}, \mathbf{h}] = - \int d^d x \mathbf{h}(z) \cdot \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) \quad (3.229)$$

zum *Hamiltonian* liefert. Insbesondere im Hinblick auf die später erfolgende Diskretisierung des Problems ist dies sinnvoll, da auf diese Weise *Bulk*- und Oberflächenfelder gleichzeitig mit dem diskretisierten Feld $\mathbf{h}_z = (\mathbf{h}_1 + \mathbf{h}_b, \mathbf{h}_b, \dots, \mathbf{h}_b, \mathbf{h}_b, \mathbf{h}_2 + \mathbf{h}_b)$ beschrieben werden können. Die Ableitungsmatrix (3.52) muss dann nicht modifiziert werden. Daher wird in diesem Kapitel diese Strategie verfolgt und die freie Energie des durch den *Hamiltonian*

$$\mathcal{H}[\boldsymbol{\phi}, \mathbf{h}] = \mathcal{H}[\boldsymbol{\phi}] + \mathcal{H}_{\text{MF}}[\boldsymbol{\phi}, \mathbf{h}] \quad (3.230)$$

beschriebenen Systems im Limes $n \rightarrow \infty$ berechnet. Dabei ist das Funktional $\mathcal{H}[\boldsymbol{\phi}]$ der in Gleichung (3.5) auftretende *Hamiltonian*. Dazu soll vorerst wieder das Kontinuumsmodell betrachtet werden. Die ermittelten Gleichungen für die freie Energie und das Potential werden anschließend regularisiert und diskretisiert.

Um die Auswirkungen des Magnetfeld-Terms (3.229) auf die freie Energie des Films zu untersuchen, müssen die in Kapitel 3.2 durchgeführten Schritte für $\mathbf{h}(\mathbf{x}) \neq \mathbf{0}$ rekapituliert werden. Im Folgenden sollen kurz die Änderungen beziehungsweise die durch das Magnetfeld zusätzlich auftretenden Terme besprochen werden.

Nach der Hubbard-Stratonovich-Transformation muss das Gaußsche Integral über das Feld $\boldsymbol{\phi}$ berechnet werden. Der jetzt auftauchende in $\boldsymbol{\phi}$ lineare Term im *Hamiltonian* kann durch eine quadratische Ergänzung im Argument der Exponentialfunktion behandelt werden (siehe zum Beispiel Kapitel 5.2 in [107]). Damit ergibt sich der Zusatzterm

$$\dots + \frac{1}{2} \int d^d x \int d^d x' \sum_{\alpha=1}^n h_{\alpha}(\mathbf{x}) G^{(d)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'|L) h_{\alpha}(\mathbf{x}') \quad (3.231)$$

im Exponenten in Gleichung (3.9). Ist das Magnetfeld nur von der senkrechten Koordinate z abhängig, so bleibt das System in der parallelen y -Richtung translationsinvariant und der Propagator lautet in der Spektraldarstellung

$$G^{(d)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'|L) = \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \sum_{\nu} \frac{\langle z|\nu\rangle\langle\nu|z'\rangle}{\mathbf{p}^2 + \varepsilon_{\nu}} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{y}-\mathbf{y}')}. \quad (3.232)$$

Dabei ist $\{\varepsilon_{\nu}, \varphi_{\nu}(z) \equiv \langle z|\nu\rangle\}$ wieder das Eigensystem der Schrödinger-Gleichung mit dem Potential $\hat{\tau} + i\psi(\mathbf{x})$. Der Propagator ist offenbar ein Funktional der Funktion $\psi(\mathbf{x})$.

Der Propagator ist das Operatorinverse des Integralkerns

$$\hat{K}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'|L) = (-\nabla^2 + \dot{\tau} + i\psi) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (3.233)$$

was sich durch Nachrechnen der Identität

$$\int d^d x'' G^{(d)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}''|L) \hat{K}(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'|L) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (3.234)$$

zeigen lässt. Setzt man den Propagator nach Gleichung (3.232) in Gleichung (3.231) ein, so lässt sich sofort die \mathbf{y}' -Integration ausführen. Diese liefert eine Delta-Funktion $\delta(\mathbf{p})$, was auch die Berechnung des \mathbf{p} -Integrals erlaubt. Der so erhaltene Ausdruck ist unabhängig von \mathbf{y} , sodass die verbleibende \mathbf{y} -Integration nur einen Faktor A liefert. Aus dem Term (3.231) wird also

$$\begin{aligned} (3.231) &= \frac{A}{2} \int dz \int dz' \sum_n h_n(z) \frac{\langle z|\nu\rangle\langle\nu|z'\rangle}{\varepsilon_\nu} h_n(z') \\ &= \frac{A}{2} \int dz \int dz' \sum_n h_n(z) G^{(1)}(z, z'|L) h_n(z'). \end{aligned} \quad (3.235)$$

An dieser Stelle muss nun entschieden werden, wie das Magnetfeld $\mathbf{h}(z)$ orientiert sein soll. Die Orientierung wird so gewählt, dass

$$\mathbf{h}(z) = h(z) \frac{1}{\sqrt{n}} (1, 1, 1, \dots, 1) \quad (3.236)$$

gilt. Das Magnetfeld zeigt also im gesamten System in dieselbe Richtung im Raum der Spins. Nur der Betrag des Feldes kann variiert werden. Es ist also auf diese Weise nicht möglich, verdrehte Randbedingungen, bei denen die Magnetfelder auf den Oberflächen um einen beliebigen Winkel α gegeneinander rotiert sind, zu untersuchen. Der Spezialfall von $\alpha = \pi$ ist aber durch die Wahl unterschiedlicher Vorzeichen von h_1 und h_2 trotzdem möglich. Im Limes $h_j \rightarrow \infty$ werden daraus $(+, -)$ -Randbedingungen. Diese werden in Abschnitt 3.7.2 untersucht. Die hier gewählte Orientierung hat den Vorteil, dass der Limes $n \rightarrow \infty$ leicht bestimmt werden kann. Dazu muss jedoch die Reskalierung $h \rightarrow nh$ durchgeführt werden, um die Existenz eines sinnvollen *Large-n*-Limes zu gewährleisten. Nur so kann ein gemeinsamer Faktor n im Exponenten des Arguments des ψ -Integrals ausgeklammert und das Integral in der Sattelpunktsnäherung berechnet werden.

Der Wert des Integrals am Sattelpunkt ψ_0 liefert wieder die freie Energie im Limes $n \rightarrow \infty$. Aufgrund der Tatsache, dass das Magnetfeld als unabhängig von der parallelen Koordi-

nate angenommen wurde, ist $\psi_0(z)$ wieder nur von z abhängig und es ergibt sich für die reduzierte freie Energie pro Komponente des Ordnungsparameters und Fläche

$$f_L = f_L^{(0)} + \frac{1}{2} \text{Sp} \log (-\nabla^2 + \hat{\tau} + i\psi_0(z)) + \frac{3}{2g} \int_0^L dz \psi_0^2(z) - \frac{1}{2} \int_0^L dz \int_0^L dz' h(z)G^{(1)}(z, z'|L)h(z') + O(1/n). \quad (3.237)$$

Dabei muss bei der Berechnung von $G^{(1)}(z, z'|L)$ die Funktion $\psi(z)$ auf den Sattelpunkt $\psi_0(z)$ gesetzt werden. Dieser ist wieder durch die Bedingung

$$\left. \frac{\delta f_L}{\delta \psi} \right|_{\psi=\psi_0(z)} \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.238)$$

definiert. Die Funktionalableitungen des ersten und zweiten Terms in (3.237) wurden schon in Kapitel 3.2 berechnet. Es bleibt also noch die Auswertung des dritten Terms in (3.237). Hier muss der Propagator nach dem Potential abgeleitet werden. Dies lässt sich mit einem einfachen Trick bewerkstelligen. Dazu schreibt man unter Anwendung von Gleichung (3.233)

$$0 = \frac{\delta}{\delta \psi(z'')} \int_0^L dz_1 G^{(1)}(z, z_1|L) \hat{K}(z_1, z_2|L) = \int_0^L dz_1 \left[\frac{\delta G^{(1)}(z, z_1|L)}{\delta \psi(z'')} \hat{K}(z_1, z_2|L) + G^{(1)}(z, z_1|L) \frac{\delta \hat{K}(z_1, z_2|L)}{\delta \psi(z'')} \right]. \quad (3.239)$$

Multipliziert man diese Gleichung von rechts mit $G^{(1)}(z_2, z'|L)$ und integriert über z_2 , so erhält man für die Funktionalableitung von $G^{(1)}(z, z'|L)$

$$\frac{\delta G^{(1)}(z, z'|L)}{\delta \psi(z'')} = - \int_0^L dz_1 \int_0^L dz_2 G^{(1)}(z, z_1|L) \frac{\delta \hat{K}(z_1, z_2|L)}{\delta \psi(z'')} G^{(1)}(z_2, z'|L). \quad (3.240)$$

Damit kann die Ableitung in Gleichung (3.238) ausgewertet werden. Mit

$$\frac{\delta}{\delta \psi(z'')} \hat{K}(z_1, z_2|L) = i \delta(z_1 - z_2) \delta(z_1 - z'') \quad (3.241)$$

ergibt sich die Gleichung der Bedingung für die Lage des Maximums $\psi_0(z)$ der freien

Energie zu

$$0 = \frac{i}{2} \langle z | \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \frac{1}{-\partial_z^2 + \mathbf{p}^2 + \dot{\tau} + i\psi_0} |z\rangle + \frac{3}{g} \psi_0(z) + \frac{i}{2} \left[\int_0^L dz' h(z') G^{(1)}(z', z|L) \right]^2. \quad (3.242)$$

Mit $V(z) = \dot{\tau} + i\psi_0(z)$ und dem Eigensystem $\{\varepsilon_\nu, \varphi_\nu(z)\}$ des Schrödinger-Operators $\hat{H} = -\partial_z^2 + V(z)$ lässt sich dies schreiben als

$$\dot{\tau} - V(z) = -\frac{g}{6} \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \sum_{\nu} \frac{|\varphi_\nu(z)|^2}{\mathbf{p}^2 + \varepsilon_\nu} - \frac{g}{6} \left[\int_0^L dz' h(z') \sum_{\nu} \frac{\varphi_\nu^*(z') \varphi_\nu(z)}{\varepsilon_\nu} \right]^2. \quad (3.243)$$

Entwickelt man formal das Magnetfeld $h(z)$ nach den Eigenfunktionen $\varphi_\nu(z)$

$$h(z) = \sum_{\nu} h_{\nu} \varphi_{\nu}(z) = \sum_{\nu} h_{\nu}^* \varphi_{\nu}^*(z) \quad (3.244a)$$

mit den Entwicklungskoeffizienten

$$h_{\nu} = \int_0^L dz \varphi_{\nu}(z) h(z) \quad \text{und} \quad h_{\nu}^* = \int_0^L dz \varphi_{\nu}^*(z) h(z), \quad (3.244b)$$

so lässt sich das Ergebnis nochmals umformulieren. Man erhält dann

$$\dot{\tau} - V(z) = -\frac{g}{6} \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \sum_{\nu} \frac{|\varphi_{\nu}(z)|^2}{\mathbf{p}^2 + \varepsilon_{\nu}} - \frac{g}{6} \left| \sum_{\nu} h_{\nu} \frac{\varphi_{\nu}(z)}{\varepsilon_{\nu}} \right|^2. \quad (3.245)$$

Das Impuls-Integral auf der rechten Seite von Gleichung (3.245) ist noch UV-divergent in drei Dimensionen. Diese Divergenzen können abermals beseitigt werden, indem $\dot{\tau}_c$ auf beiden Seiten von (3.245) subtrahiert wird.

An dieser Stelle wird wieder die Diskretisierung in der z -Richtung eingeführt. Das System wird in L Schichten diskretisiert und aus dem Magnetfeld $h(z)$ wird das L -Tupel

$$h_z = (h_1 + h_b, h_b, h_b, \dots, h_b, h_2 + h_b). \quad (3.246)$$

Die diskrete Version der Entwicklung (3.244) ist offensichtlich. Setzt man die Kopplungskonstante auf ihren Fixpunktwert $g = g^* = \infty$, so ergibt sich das Analogon zu Gleichung (3.139). Unter der Annahme, dass die Eigenvektoren $\varphi_{\nu,z}$ und somit auch die Ent-

wicklungskoeffizienten h_ν reell sind, erhält man die Selbstkonsistenzgleichung

$$t = \langle z | \mathbf{H} | z \rangle - 4\pi \left[\sum_{\nu=1}^L h_\nu \frac{\varphi_{\nu,z}}{\varepsilon_\nu} \right]^2. \quad (3.247)$$

Für die freie Energie des Films (siehe Gleichung (3.144)) gilt nun

$$f_L^{\text{ren}}(t, h_b, h_1, h_2) = \frac{1}{8\pi} \text{Sp} [\mathbf{H} \cdot (1 + t - \mathbf{H})] + L \frac{t}{4\pi} - \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^L \frac{h_\nu^2}{\varepsilon_\nu}. \quad (3.248)$$

Will man die Exzess-Freie-Energie ausschließlich bei Anwesenheit von Oberflächenfeldern — also ohne *Bulk*-Felder — berechnen, so genügen diese Gleichungen zusammen mit dem *Bulk*-Anteil der freien Energie aus Gleichung (3.145), da besagte Oberflächenfelder keinen Beitrag zur freien Energie des *Bulk*-Systems liefern.

Ist man jedoch an der Exzess-Freien-Energie mit *Bulk*-Magnetfeldern interessiert, wird der zugehörige *Bulk*-Anteil der freien Energie benötigt. Diese erhält man aus folgenden Überlegungen: Gemäß Gleichung (3.242) kann der in der Selbstkonsistenzgleichung auftretende, vom Magnetfeld abhängige Term im thermodynamischen Limes bestimmt werden. Unter der Annahme, dass das Magnetfeld $h(z) = h_b$ unabhängig von z ist, vereinfacht sich der Zusatzterm nach der Ersetzung $\tau + i\psi_0 \rightarrow r_b$ zu der Form $\propto (h_b/r_b)^2$ und aus Gleichung (3.140) wird damit

$$t = 2 \operatorname{arsinh} \left(\frac{\sqrt{r_b}}{2} \right) - 4\pi \frac{h_b^2}{r_b^2}. \quad (3.249)$$

Diese transzendente Gleichung kann nun trotz des Limes $g \rightarrow \infty$ nicht mehr analytisch nach r_b aufgelöst werden. Der in der freien Energie auftretende, vom Magnetfeld verursachte Zusatzterm kann auf die gleiche Art aus Gleichung (3.237) gewonnen werden. Er ist von der Form $-h_b^2/(2r_b)$. Aus Gleichung (3.145) wird dann unter Ausnutzung der *Bulk*-Selbstkonsistenzgleichung (3.249)

$$f_b^{\text{ren}}(t, h_b) = \frac{1}{4\pi} \sinh \left(4\pi \frac{h_b^2}{r_b^2} + t \right) - \frac{t}{4\pi} - \frac{h_b^2}{r_b^2} (1 + r_b), \quad (3.250)$$

was wiederum nur numerisch berechnet werden kann und die Skalenform

$$f_b^{\text{ren}}(t, h_b) \approx |t|^{2-\alpha} f_\pm(h_b |t|^{-\Delta}) \quad (3.251)$$

mit den kritischen Exponenten des *Large-n*-Limes [149]

$$\Delta = \frac{1}{2} \frac{d+2}{d-2} \stackrel{d \rightarrow 3}{=} \frac{5}{2} \quad \text{und} \quad \alpha = \frac{d-4}{d-2} \stackrel{d \rightarrow 3}{=} -1, \quad (3.252)$$

erfüllt.

Aus den Gleichungen (3.248) und (3.250) für die renormierte freie Energie des Films und des *Bulk*-Systems kann die Exzess-Freie-Energie gemäß

$$f_{\text{ex}}(L, t, h_b, h_1, h_2) \equiv f_{\text{ex}}^{\text{ren}}(L, t, h_b, h_1, h_2) = f_L^{\text{ren}}(t, h_b, h_1, h_2) - L f_b^{\text{ren}}(t, h_b) \quad (3.253)$$

berechnet werden. Die mit dem *Bulk*-Feld assoziierte Skalenvariable lautet [175] $\tilde{h}_b = \text{sign}(h_b)L/\xi_{h_b}$, wobei die Korrelationslänge $\xi_{h_b} = \xi(t=0, h_b)$ aus Gleichung (3.249) gewonnen werden kann und eine dimensionslose Länge ist. Man erhält

$$\xi_{h_b} = \frac{1}{(4\pi)^{1/5}} |h_b|^{-2/5} = \xi_{h_b}^0 |h_b|^{-2/5} \quad (3.254)$$

mit der nicht-universellen Konstanten $\xi_{h_b}^0 = (4\pi)^{-1/5}$. Somit ergibt sich der Zusammenhang $\tilde{h}_b = \text{sign}(h_b)\xi_{h_b}^0 L|h_b|^{2/5}$. Im Folgenden soll jedoch, analog zur Definition der Skalenvariablen x der Temperatur, die Skalenvariable $\mathbf{h}_b = \text{sign}(h_b)\{\tilde{h}_b/[\text{sign}(h_b)\xi_{h_b}^0]\}^{5/2} = h_b L^{5/2} \equiv h_b L^{\Delta/\nu}$ verwendet werden. Das heißt, dass die Skalenvariable \mathbf{h}_b den nicht-universellen Faktor $\xi_{h_b}^0$ enthält. Definiert man die Skalenvariablen \mathbf{h}_j , $j = 1, 2$ der Oberflächenfelder h_1 und h_2 auf die gleiche Weise¹², also als $\mathbf{h}_j = h_j L^{\Delta_1^{\text{ord}}/\nu}$, so erhält man die Skalenform des *Finite-Size*-Anteils der freien Energie (siehe zum Beispiel [10])

$$f_{\text{res}}(L, t, h_b, h_1, h_2) \approx L^{-(d-1)} \Theta(tL^{1/\nu}, h_b L^{\Delta/\nu}, h_1 L^{\Delta_1^{\text{ord}}/\nu}, h_2 L^{\Delta_1^{\text{ord}}/\nu}). \quad (3.255)$$

Die Skalenfunktion Θ ist jetzt also eine Funktion von vier Variablen. Die Skalenfunktion der Kraft ergibt sich aus (3.255) durch Ableiten nach der Filmdicke

$$\beta \mathcal{F}_C(L, t, h_b, h_1, h_2) = - \frac{\partial f_{\text{res}}(L, t, h_b, h_1, h_2)}{\partial L}. \quad (3.256)$$

¹²Damit enthalten die Skalenvariablen \mathbf{h}_1 und \mathbf{h}_2 einen unbekanntem, nicht-universellen Faktor. Siehe auch die Diskussion zur Länge ℓ_1 in [90].

Daraus erhält man den Zusammenhang

$$\begin{aligned} \vartheta(x, \mathbf{h}_b, \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2) &= (d-1)\Theta(x, \mathbf{h}_b, \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2) - \frac{x}{\nu} \frac{\partial \Theta(x, \mathbf{h}_b, \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2)}{\partial x} \\ &- \frac{\Delta}{\nu} \mathbf{h}_b \frac{\partial \Theta(x, \mathbf{h}_b, \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2)}{\partial \mathbf{h}_b} - \frac{\Delta_1^{\text{ord}}}{\nu} \sum_{j=1}^2 \mathbf{h}_j \frac{\partial \Theta(x, \mathbf{h}_b, \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2)}{\partial \mathbf{h}_j}. \end{aligned} \quad (3.257)$$

Da in der Numerik wieder die Kraft durch Diskretisierung der Ableitung nach L bestimmt wird, erhält man zunächst nur die Skalenfunktion ϑ der Kraft. Um daraus die Skalenfunktion Θ der freien Energie zu bestimmen, muss Gleichung (3.257) invertiert werden. Dies kann geschehen, indem die partielle Differentialgleichung erster Ordnung mit der Methode der Charakteristiken gelöst wird. Mit der Randbedingung $\Theta(\infty, \mathbf{h}_b, \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2) = 0$ ergibt sich für die Skalenfunktion $\Theta(x, \mathbf{h}_b, \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2)$ der freien Energie der Ausdruck

$$\Theta(x, \mathbf{h}_b, \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2) = \int_1^\infty \frac{ds}{s^d} \vartheta(xs^{1/\nu}, \mathbf{h}_b s^{\Delta/\nu}, \mathbf{h}_1 s^{\Delta_1^{\text{ord}}/\nu}, \mathbf{h}_2 s^{\Delta_1^{\text{ord}}/\nu}). \quad (3.258)$$

Für $\mathbf{h}_b = \mathbf{h}_1 = \mathbf{h}_2 = 0$ ergibt sich wieder Gleichung (3.183). Der Limes $n \rightarrow \infty$ des kritischen Exponenten Δ_1^{ord} ist für beliebige Dimensionen analytisch bekannt. Er lautet [59, 75, 143]

$$\Delta_1^{\text{ord}} = \frac{1}{d-2} \underset{d \rightarrow 3}{=} 1, \quad (3.259)$$

sodass in drei Dimensionen aus (3.255)

$$\beta \mathcal{F}_C(L, t, h_b, h_1, h_2) \approx L^{-3} \vartheta(tL, h_b L^{5/2}, h_1 L, h_2 L) \quad (3.260)$$

wird. Das Ziel der folgenden Abschnitte ist es, diese Skalenfunktion $\vartheta(x, \mathbf{h}_b, \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2)$ als Funktion der vier Argumente numerisch zu bestimmen und zu diskutieren.

3.7.1 Bulk-Felder

Ein erster Schritt zum Verständnis des Einflusses von Magnetfeldern auf die Skalenfunktionen Θ und ϑ kann durch die Analyse von homogenen *Bulk*-Feldern unternommen werden. Für periodische Randbedingungen wurden diese Skalenfunktionen in [28, 29] für das *Mean*-Sphärische Modell analytisch berechnet.¹³ Für antiperiodische Randbedingungen ist dies aufgrund der erhaltenen Translationsinvarianz prinzipiell auch möglich, jedoch noch nicht geschehen.

¹³Aufgrund von abweichenden Definitionen der Skalenvariable ist in [29] der Tieftemperaturbereich bei $x_1 > 0$.

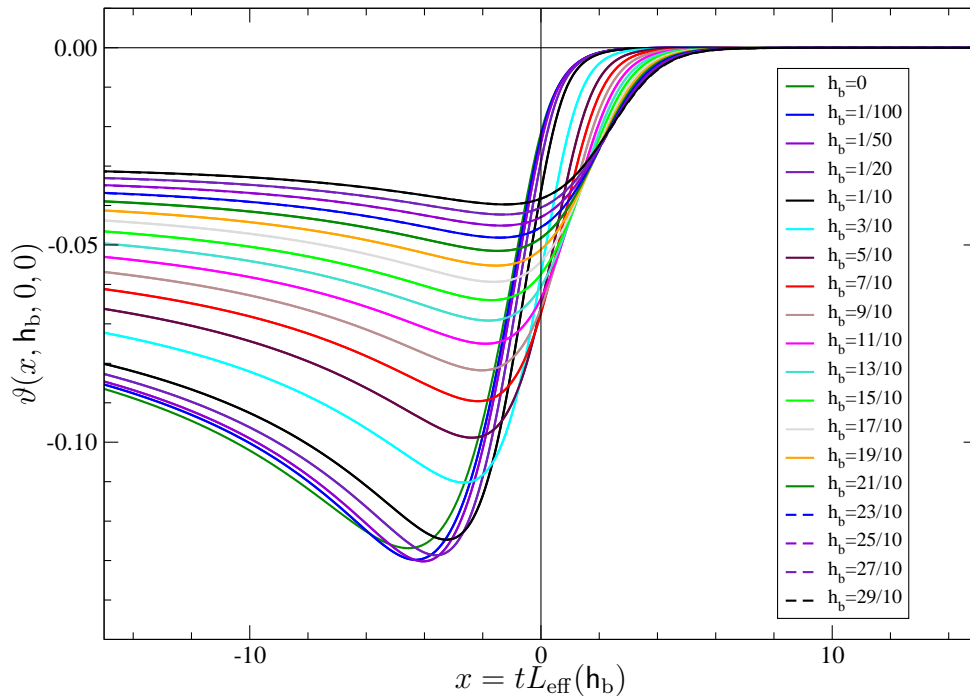


Abbildung 3.19: Skalenfunktion der Kraft in Anwesenheit eines *Bulk*-Magnetfeldes. Die führenden Korrekturen wurden mit einer effektiven Filmdicke $L_{\text{eff}}(\mathbf{h}_b) = L + \delta L(\mathbf{h}_b)$ beschrieben, welche explizit vom Magnetfeld abhängt. Die numerischen Daten der Systeme mit $L = 129$ und $L = 257$ liegen so sehr genau aufeinander.

Eine Reihe von Arbeiten untersucht den Einfluss von *Bulk*-Feldern auf die Skalenfunktionen des zwei- und dreidimensionalen Ising-Modells. In [176] wurde die Skalenfunktion der Casimir-Kraft des dreidimensionalen Ising-Modells am kritischen Punkt für verschiedene Randbedingungen als Funktion des *Bulk*-Feldes mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen ermittelt. Die Ergebnisse werden mit ebenfalls durchgeführten *Mean-Field*-Rechnungen verglichen. Für einen Überblick über Arbeiten, die mit verschiedenen Methoden den Einfluss von *Bulk*-Feldern auf die Skalenfunktion des zweidimensionalen Ising-Modells untersuchen, sei zum Beispiel auf [175] und die dort angegebenen Referenzen verwiesen.

In diesem Abschnitt soll der Einfluss von *Bulk*-Magnetfeldern auf die Skalenfunktion ϑ im *Large-n*-Limes für offene Randbedingungen untersucht werden. Dafür wird zunächst $h_1 = h_2 = 0$ gesetzt. Die Selbstkonsistenzgleichung (3.247) vereinfacht sich zu

$$t = \langle z | \mathbf{H} | z \rangle - 4\pi h_b^2 \left[\sum_{z'=1}^L \langle z | \mathbf{H}^{-1} | z' \rangle \right]^2 \quad (3.261)$$

und kann für gegebene Werte von L , t und h_b numerisch gelöst werden. Aus dem so erhaltenen Potential V_z kann dann gemäß Gleichung (3.248) die freie Energie des Films

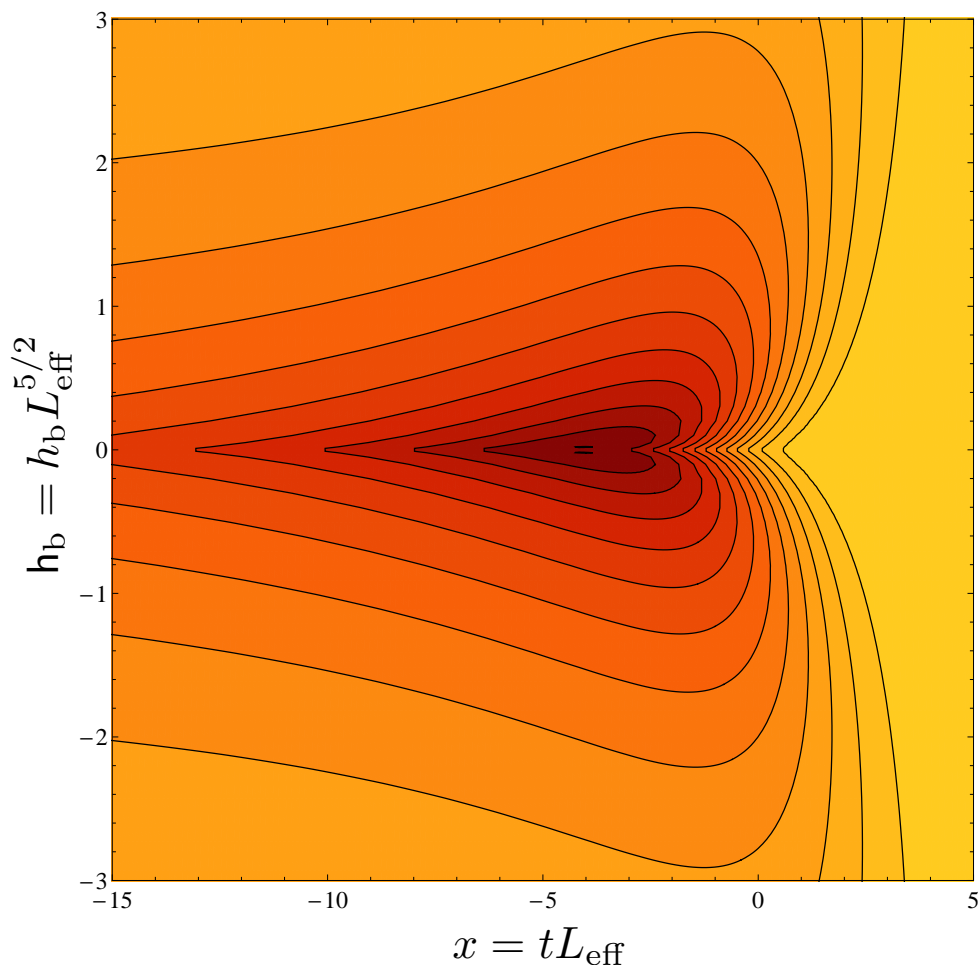


Abbildung 3.20: *Contourplot* der Skalenfunktion $\vartheta(x, h_b, 0, 0)$ mit $x = tL_{\text{eff}}$ und $h_b = h_b L_{\text{eff}}^{5/2}$, gewonnen aus Rechnungen für $L = 257$.

berechnet werden. Subtraktion des *Bulk*-Anteils nach Gleichungen (3.250) und (3.249) liefert die Exzess-Freie-Energie, aus welcher sich die Kraft durch numerisches Ableiten nach der Filmdicke ergibt. Nach

$$\vartheta(x, h_b, 0, 0) \approx -[L + \delta L(h_b)]^3 \frac{f_{\text{ex}}\left(L + 1, \frac{x}{L}, \frac{h_b}{L^{5/2}}, 0, 0\right) - f_{\text{ex}}\left(L - 1, \frac{x}{L}, \frac{h_b}{L^{5/2}}, 0, 0\right)}{2} \quad (3.262)$$

erhält man eine Approximation für die zugehörige Skalenfunktion, welche für große L gegen die gesuchte Funktion $\vartheta(x, h_b, 0, 0)$ konvergiert. Dabei wurde wieder eine effektive Filmdicke $L_{\text{eff}} = L + \delta L(h_b)$ eingeführt, mit welcher die führenden Korrekturen beschrieben werden. In Abbildung 3.19 sind die Ergebnisse für $L = 129$ und $L = 257$ gegen die Skalenvariable $x = tL_{\text{eff}}$ für verschiedene Werte von $h_b = h_b L_{\text{eff}}^{5/2}$ aufgetragen. Die Kurven der verschiedenen Systemgrößen liegen sehr gut aufeinander, was bedeutet, dass die effektive Filmdicke die führenden Korrekturen wieder gut beschreibt.

Die Lage des Minimums wandert für steigende Werte von h_b zu größeren x . Dabei nimmt die Tiefe des Minimums ab und die Kurven werden breiter. Eine Besonderheit beobachtet man für kleine h_b . In Abbildung 3.19 erkennt man, dass das Minimum der Skalenfunktion für $h_b = 1/10$ kleiner als das für $h_b = 1/100$ ist. Dies ist sehr deutlich in dem in Abbildung 3.20 gezeigten *Contourplot* von $\vartheta(x, h_b, 0, 0)$ zu erkennen. Durch diesen Effekt ergibt sich die herzförmige Struktur der Isolinien der Casimir-Kraft. Zudem führt dies dazu, dass die Casimir-Kraft am kritischen Punkt $\vartheta(0, h_b, 0, 0)$ eine nicht-monotone Funktion in $|h_b|$ ist. Ausgehend von $h_b = 0$ steigt die Kraft mit wachsendem $|h_b|$ zunächst (betraglich) an, erreicht ein Maximum bei $|h_b| \simeq 0.7$ und fällt dann erst wieder ab. Dieses Verhalten wurde auch in [176] für das dreidimensionale Ising-Modell und in [177] für das zweidimensionale Ising-Modell gefunden.

3.7.2 Oberflächenfelder

Nachdem im letzten Abschnitt der Einfluss von *Bulk*-Magnetfeldern untersucht wurde, soll nun auf Oberflächenfelder eingegangen werden. Dabei sei ab hier $h_b = 0$ angenommen. Zunächst sollen die Spezialfälle untersucht werden, bei denen die Felder ihre Fixpunktwerte $h_j^* \in \{-\infty, 0, \infty\}$ annehmen. Daraus ergeben sich drei verschiedene Randbedingungen, $(+, +)$, $(+, -)$ sowie $(+, o)$:

$$\vartheta^{(+,+)}(x) = \vartheta(x, 0, \infty, \infty) \quad (3.263a)$$

$$\vartheta^{(+,-)}(x) = \vartheta(x, 0, \infty, -\infty) \quad (3.263b)$$

$$\vartheta^{(+,o)}(x) = \vartheta(x, 0, \infty, 0). \quad (3.263c)$$

Die übrigen Kombinationen der genannten Fixpunktwerte h_j^* der Oberflächenfelder ergeben aufgrund von Symmetrien keine anderen Skalenfunktionen.

Die in den Gleichungen (3.263) definierten Skalenfunktionen wurden in einer Reihe von Arbeiten in verschiedenen Modellen untersucht. In [11] wurden die Skalenfunktionen (3.263) für das $O(n)$ -symmetrische ϕ^4 Modell in *Mean-Field*-Näherung als Approximation für den Ising-Fall mit $n = 1$ berechnet. Dies sind die einzigen bekannten Ergebnisse für die Skalenfunktionen (3.263), die sich auch auf Systeme mit kontinuierlichen $O(n)$ -Symmetrien übertragen lassen. Aufgrund der Relevanz von Oberflächenfeldern für Experimente an binären Flüssigkeitsgemischen existieren deutlich mehr Resultate für das Ising-Modell. In derselben Arbeit wurden auch Monte-Carlo-Ergebnisse für die Casimir-Amplituden des dreidimensionalen Ising-Modells präsentiert. In [80] wurden mit exakten Transfermatrix-Rechnungen die Skalenfunktionen $\vartheta^{(+,+)}(x)$ und $\vartheta^{(+,-)}(x)$ des zweidimensionalen Ising-

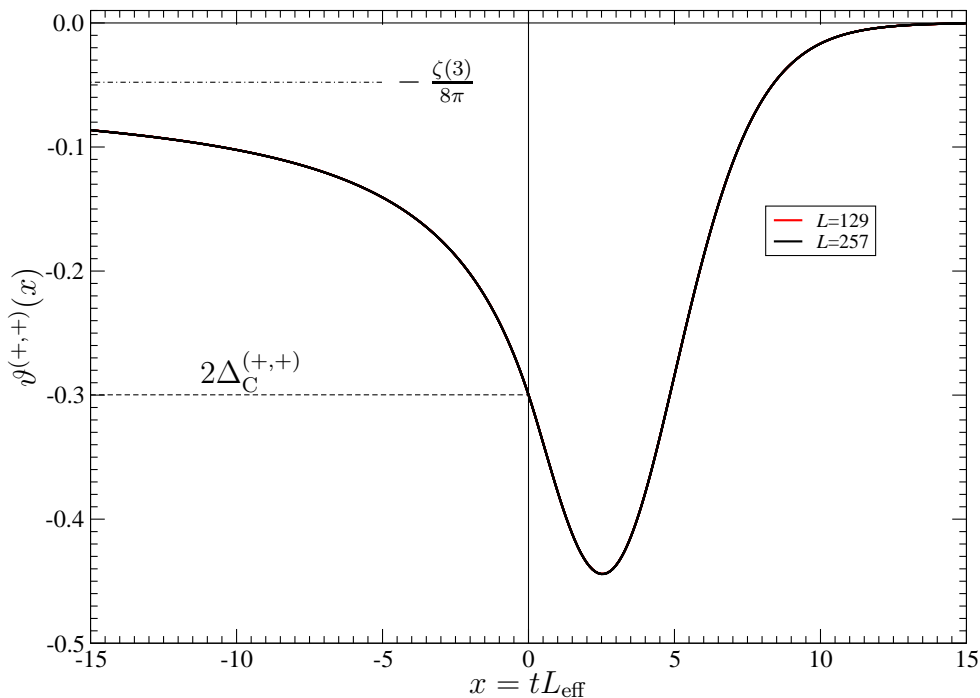


Abbildung 3.21: Skalenfunktion für $(+, +)$ -Randbedingungen. Dargestellt sind die Kurven für $L = 129$ und $L = 257$ jeweils mit $h_1 = h_2 = 1, 2, 50, 100, 200$. Für den Datenkollaps wurde $L_{\text{eff}} = L + \delta L(h_1)$ mit $\delta L(1) = 0.273$, $\delta L(2) = -0.226$, $\delta L(50) = -1.14$, $\delta L(100) = -1.23$ sowie $\delta L(200) = -1.31$ verwendet.

Modells bestimmt. In [81] findet sich die verbleibende Funktion $\vartheta^{(+,0)}(x)$. Die Funktionen $\vartheta^{(+,+)}(x)$ und $\vartheta^{(+,-)}(x)$ des dreidimensionalen Ising-Modells wurden in [22, 83, 87, 89] mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen untersucht. In [88] findet sich die Skalenfunktion $\vartheta^{(+,0)}(x)$ für dieses System.

Für dreidimensionale Ising-Modelle existieren zudem mit einer Erweiterung der de Gennes-Fisher *Local-Functional* Methode [178, 179] erhaltene Ergebnisse: In [77] wurde die Skalenfunktion $\vartheta^{(+,+)}(x)$ bestimmt. In [78] wurde zudem die Amplitude für $(+, -)$ -Randbedingungen ermittelt.

In den folgenden Abschnitten sollen nun die Skalenfunktionen (3.263) im *Large-n*-Limes berechnet werden. Die ermittelten Ergebnisse werden diskutiert und mit den aus der Literatur bekannten Resultaten verglichen.

$(+, +)$ -Randbedingungen

Zur Bestimmung der Skalenfunktion für $(+, +)$ -Randbedingungen löst man die Selbstkonsistenzgleichung (3.247) für verschiedene Werte der Oberflächenfelder $h_1 = h_2$ und Filmdicken L in Abhängigkeit der Temperatur t . Daraus lässt sich nach Gleichung (3.253)

die Exzess-Freie-Energie bestimmen. Gemäß

$$\vartheta^{(+,+)}(x) \approx -L_{\text{eff}}^3 \frac{f_{\text{ex}}(L+1, \frac{x}{L}, 0, h_1, h_1) - f_{\text{ex}}(L-1, \frac{x}{L}, 0, h_1, h_1)}{2} \quad (3.264)$$

können dann aus f_{ex} Näherungen für die Skalenfunktion erhalten werden. $L_{\text{eff}} = L + \delta L(h_1)$ ist dabei wieder eine effektive Filmdicke. Die Ergebnisse sind in Abbildung 3.21 für die beiden größten untersuchten Systeme $L = 129$ und $L = 257$ gegen die Skalenvariable $x = tL_{\text{eff}}$ aufgetragen. Die Parameter δL werden so angepasst, dass die Kurven verschiedener Filmdicken für einen gegebenen Wert von h_1 aufeinander liegen und sind in der Bildunterschrift angegeben. So können auch hier die führenden Korrekturen beschrieben werden. Die Kurven liegen sehr gut aufeinander. Dies gilt bereits für die Systeme mit den kleinen Oberflächenfeldern $h_1 = 1$. Sobald $h_1 > 0$ ist, befindet man sich im Bereich des attraktiven Fixpunktes $h_j^* = \infty$ und man erhält die $(+, +)$ -Skalenfunktion. Auch für kleinere Systeme (ab $L = 32$) liegen die Daten bereits gut auf den gezeigten Kurven.

Die so erhaltene Skalenfunktion stimmt bis auf das Tieftemperaturverhalten qualitativ mit den für das zwei- und dreidimensionale Ising-Modell bekannten Skalenfunktionen sowie den *Mean-Field*-Rechnungen für $(+, +)$ -Randbedingungen überein (siehe die in der Einleitung von Abschnitt 3.7.2) angegebenen Referenzen). Auch hier tritt ein ausgeprägtes Minimum oberhalb der kritischen Temperatur auf. Es liegt bei $x = 2.53(2)$ und hat den Funktionswert $\vartheta_{\text{min}}^{(+,+)} = -0.4443(3)$. Die Skalenfunktion ist im gesamten Temperaturbereich negativ, was einer attraktiven Wechselwirkung entspricht. Dies kann durch die Symmetrie der Randbedingungen erklärt werden.

Die Casimir-Amplitude kann durch Anfitzen von Polynomen in L^{-1} an die Werte der Exzess-Freien-Energie am kritischen Punkt bestimmt werden. Man findet den Wert

$$\Delta_{\text{C}}^{(+,+)} = -0.149893(2). \quad (3.265)$$

Wie schon bei den Systemen mit offenen Randbedingungen kann die Genauigkeit erheblich erhöht werden, wenn auch größere Systeme betrachtet werden. Ein wesentlicher Unterschied zu offenen Randbedingungen tritt aber für tiefe Temperaturen auf. Während dort der kleinste Eigenwert exponentiell gegen Null abfiel, taucht hier keine Nullmode auf. Der kleinste Eigenwert fällt, mit L^2 reskaliert, auf einen konstanten Wert ab. Daher bleibt die Numerik für beliebig kleine Skalenvariablen stabil und die Skalenfunktion kann ohne Modifikation durch Implementierung eines Lagrange-Multiplikators weit in den Tieftemperaturbereich hinein berechnet werden. Rechnungen bis $x = -100$ verifizieren, dass das Potential für $x \rightarrow -\infty$ gegen den Grenzwert $V_z = h_1(\delta_{z,1} + \delta_{z,L})$ konvergiert.

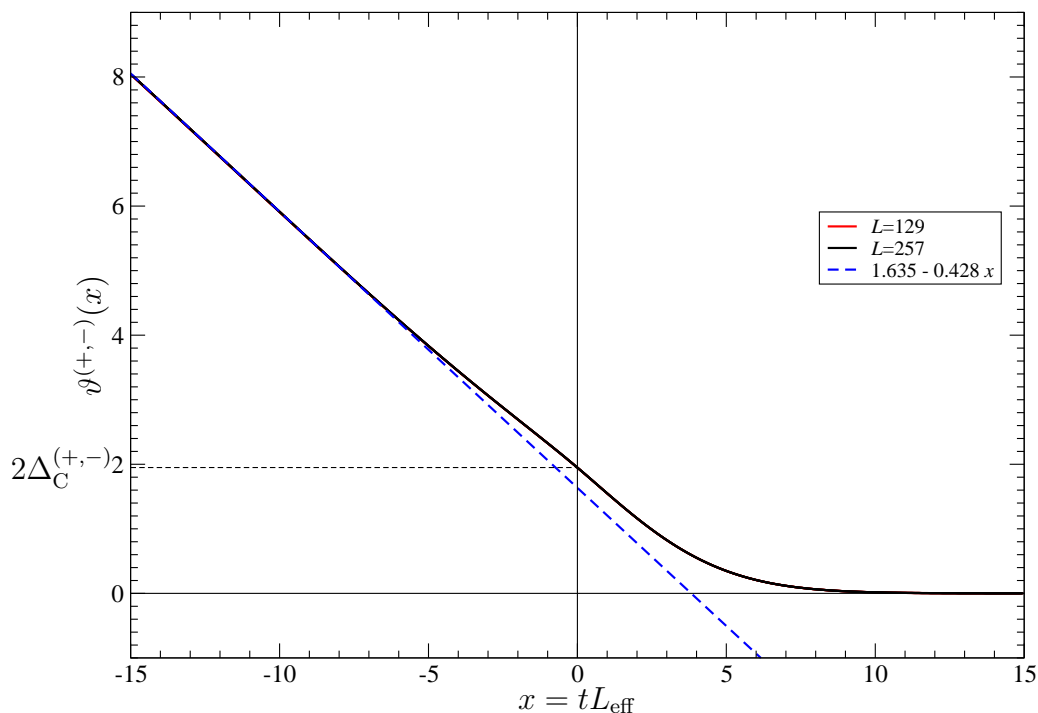


Abbildung 3.22: Skalenfunktion für $(+, -)$ -Randbedingungen. Dargestellt sind die Kurven für $L = 129$ und $L = 257$ jeweils mit $h_1 = -h_2 = 2, 10, 100$. Die führenden Korrekturen werden durch $L_{\text{eff}} = L + \delta L(h_1)$ mit $\delta L(2) = -0.3$, $\delta L(10) = -0.85$ sowie $\delta L(100) = -1.25$ beschrieben. Die eingezeichnete Gerade wird durch die Funktion $1.635 - x \cdot 0.428$ beschrieben.

Mit der zugehörigen Matrix $\mathbf{H} = -\mathbf{D}^2 + \text{diag}(V_z)$ lässt sich damit der Grenzwert der Skalenfunktion für $x \rightarrow -\infty$ bestimmen. Im Limes $h_1 \rightarrow \infty$ ist die Kraft identisch mit der, die man aus der $(L - 2) \times (L - 2)$ -Ableitungsmatrix $-\mathbf{D}^2$ gewinnen würde. Diese ist aber gerade der Goldstone-Wert für offene Randbedingungen. Die Skalenfunktion mit $(+, +)$ -Randbedingungen konvergiert also für $x \rightarrow -\infty$ gegen den bekannten Goldstone-Wert $\vartheta(-\infty) = -\zeta(3)/8\pi$. Im Gegensatz dazu fallen die Skalenfunktionen für das zwei- und dreidimensionale Ising-Modell exponentiell auf Null ab. Dies ist mit der Tatsache im Einklang, dass bei Ising-Modellen durch die fehlende kontinuierliche Symmetrie keine Goldstone-Moden auftreten. Exponentielles Abfallen der Kraft ergibt sich auch für die *Mean-Field*-Näherung des $O(n)$ -Modells für alle n , was im Widerspruch zu den hier erhaltenen Ergebnissen steht. Diese Näherung ist jedoch nicht in der Lage, die bei tiefen Temperaturen auftretenden Goldstone-Moden zu beschreiben, und liefert im Tieftemperaturlimit daher qualitativ falsche Ergebnisse.

(+, -)-Randbedingungen

Analog zur Berechnung der Skalenfunktion für (+, +)-Randbedingungen im letzten Abschnitt kann auch die für (+, -)-Randbedingungen bestimmt werden. Die Näherungen für die Skalenfunktion $\vartheta^{(+,-)}(x) = \lim_{h_1 \rightarrow \infty} \vartheta(x, 0, h_1, -h_1)$ der Kraft sind für $L = 129$ und $L = 257$ mit verschiedenen Werten von $h_1 = -h_2 = 2, 10, 100$ in Abbildung 3.22 dargestellt. Die Kurven für verschieden Systemgrößen und Oberflächenfelder liegen gut aufeinander. Um diesen Datenkollaps im Skalenplot zu erreichen, genügt abermals die Definition einer effektiven Filmdicke, welche von der Größe der Magnetfelder abhängt. Die verwendeten Werte von $\delta L(h_1)$ sind in der Bildunterschrift angegeben.

Die so ermittelte Skalenfunktion hat einen vollständig anderen Verlauf als die der bisher in dieser Arbeit untersuchten Randbedingungen. Sie stimmt qualitativ mit dem Verhalten der Skalenfunktion mit antiperiodischen Randbedingungen im Limes $n \rightarrow \infty$ (siehe Appendix A.2 sowie [144, 180]) überein. Zum einen ist sie im gesamten Temperaturbereich positiv, was einer repulsiven Wechselwirkung zwischen den Platten entspricht und durch die stark symmetriebrechenden Randbedingungen erklärt werden kann. Zum anderen konvergiert sie für $x \rightarrow -\infty$ nicht gegen einen konstanten Wert, sondern divergiert linear. Die Asymptote ist allein aus der Numerik nur schwierig zu bestimmen, da, wie eine Analyse der Ableitung der Skalenfunktion ergibt, die Steigung auch bei $x = -15$ noch nicht ihren Grenzwert erreicht hat. Die in Abbildung 3.22 eingezeichnete Gerade dient zur Orientierung und wird durch die Funktion

$$\vartheta^{(+,-)}(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{\approx} 1.635 - x 0.428 \quad (3.266)$$

beschrieben. Das Verhalten der Skalenfunktion zwischen $x = -12$ und $x = -15$ legt aber die Vermutung nahe, dass die Steigung der Asymptoten betraglich etwas kleiner ist.¹⁴

Im Tieftemperaturbereich linear divergierende Skalenfunktionen findet man auch in anderen Systemen. Verantwortlich dafür ist die kontinuierliche $O(n)$ -Symmetrie und die Randbedingungen, die eine Phasenverschiebung des Ordnungsparameters über den Film erzwingen [173, Kapitel 8.2]. Während beim Ising-Modell der Übergang von der Domäne an der einen Oberfläche zur entgegengesetzt orientierten Domäne an der anderen nur durch eine scharfe Domänenwand möglich ist, kann dieser Übergang bei Systemen mit kontinuierlichen Symmetrien im Ordnungsparameter durch eine allmähliche Umorientierung der Spins stattfinden. Der Zustand mit der kleinsten freien Energie muss die kleinstmöglich-

¹⁴Das Auftreten einer exponentiell verschwindenden Mode im Spektrum für $x \rightarrow -\infty$ verhindert, dass hier eindeutige Aussagen über die Asymptote anhand der numerischen Daten gemacht werden können. Dieses Problem könnte erneut mit Hilfe eines Lagrange-Multiplikators gelöst werden. Darauf wird hier aber verzichtet.

che lokale Winkeländerung aufweisen. Um über den Abstand L die Orientierung um den Winkel π zu drehen, ist damit eine lokale Winkeländerung (Gradient) von π/L nötig. Der daraus folgende Beitrag zu der freien Energiedichte ist proportional zu $(\pi/L)^2$. Die Differenz der freien Energien der Systeme mit $(+, -)$ - und $(+, +)$ -Randbedingungen lautet dann

$$\Delta f = f^{(+,-)} - f^{(+,+)} \approx \frac{\rho_{\text{st}}}{2} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 L, \quad (3.267)$$

wobei der Vorfaktor ρ_{st} die reduzierte Spinsteifigkeit (siehe Gleichung (3.197)) bezeichnet. Diese ist durch (3.199) gegeben. Einsetzen in (3.267) liefert das asymptotische Verhalten der Skalenfunktion der freien Energie und somit auch der Kraft

$$\vartheta(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{\approx} -\frac{\pi}{8}x. \quad (3.268)$$

Die Steigung der in Abbildung 3.22 eingezeichneten Geraden zeigt eine brauchbare Übereinstimmung mit diesem analytischen Ergebnis.

In [181] wurde das dreidimensionale XY-Modell mit verdrehten Randbedingungen in *Mean-Field*-Näherung untersucht. Dabei schließen die beiden Oberflächenmagnetfelder einen Winkel α ein. Für $\alpha = \pi$ wurde auch dort ein lineares Ansteigen der Skalenfunktion bei tiefen Temperaturen gefunden. Diese Randbedingungen wurden zuvor schon in [182] mit verschiedenen Methoden und Geometrien untersucht. Hier ergibt sich ebenfalls das lineare Verhalten der Kraft. Analog zu der Skalenfunktion für $(+, +)$ -Randbedingungen erhält man mit *Mean-Field*-Rechnungen ein exponentielles Abfallen und somit ein qualitativ falsches Verhalten der Skalenfunktion im Tieftemperaturlimes.

Die Casimir-Amplitude für diese Randbedingungen kann wieder durch Anfitzen von Polynomen in L^{-1} an die Exzess-Freie-Energie bestimmt werden. Man erhält den Wert

$$\Delta_{\text{C}}^{(+,-)} = 0.974929(2). \quad (3.269)$$

$(+, o)$ -Randbedingungen

Abbildung 3.23 zeigt Approximationen für die Skalenfunktion $\vartheta^{(+,o)}(x)$ für Systeme der Größe $L = 129$ und $L = 257$ und Werte $h_1 = 10, 50, 100, 200$ und $h_2 = 0$. Die Kurven liegen wieder gut aufeinander.

Die Skalenfunktion ist im gesamten Temperaturbereich positiv, was bedeutet, dass die Casimir-Kräfte repulsiv sind. Dies ist im Einklang mit den aus der Literatur bekannten Ergebnissen für die Skalenfunktion von zwei- und dreidimensionalen Ising-Systemen sowie mit den *Mean-Field*-Ergebnissen für dreidimensionale $O(n)$ -symmetrische Systeme mit den gleichen Randbedingungen. Gleiches gilt für das ausgeprägte Maximum oberhalb

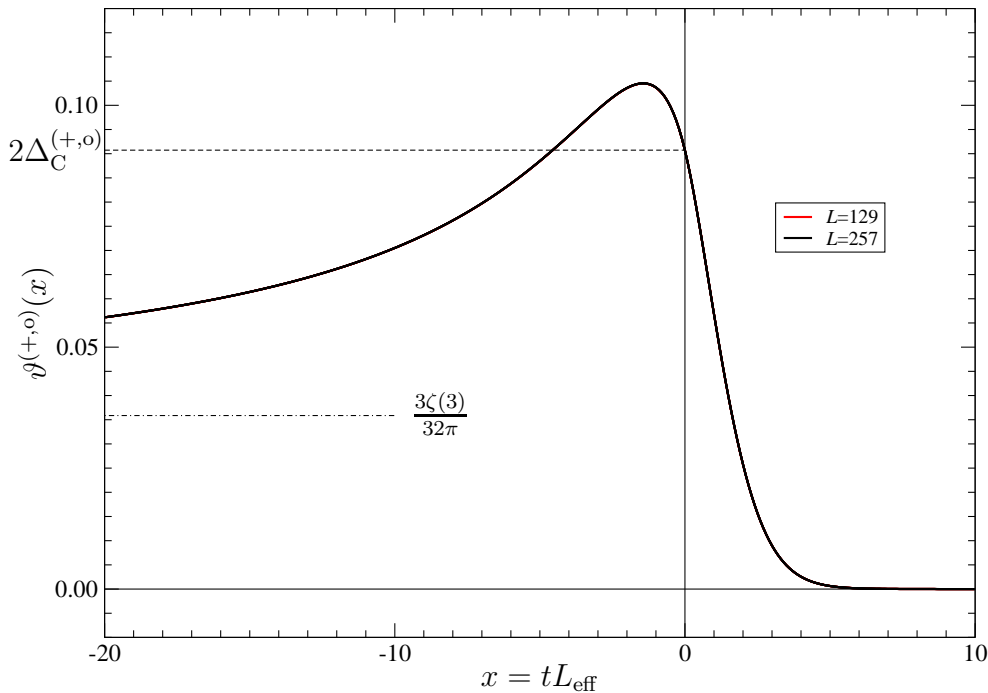


Abbildung 3.23: Skalenfunktion für $(+, o)$ -Randbedingungen. Dargestellt sind die Kurven für $L = 129$ und $L = 257$ jeweils mit $h_1 = 10, 50, 100, 200$ und $h_2 = 0$. Die Kurven liegen sehr gut aufeinander. Auch für die untersuchten kleineren Systeme (ab $L = 32$) lagen die Daten auf den gezeigten Kurven. Um die führenden Korrekturen zu beschreiben, wurde $L_{\text{eff}} = L + \delta L(h_1)$ mit $\delta L(10) = -0.08$, $\delta L(50) = -0.23$, $\delta L(100) = -0.28$ sowie $\delta L(200) = -0.32$ verwendet.

der kritischen Temperatur. Es liegt hier bei $x = -1.44(3)$ und hat den Funktionswert $\vartheta_{\text{max}}^{(+,o)} = 0.10458(3)$.

Durch Anfitzen an die Werte der Exzess-Freien-Energie erhält man den Wert der Casimir-Amplitude von

$$\Delta_C^{(+,o)} = 0.045364(1). \quad (3.270)$$

Für diese Randbedingungen wird der kleinste Eigenwert mit $x \rightarrow -\infty$ nicht exponentiell klein, sondern fällt auf einen konstanten Wert ab. Daher ist es, wie auch bei $(+, +)$ -Randbedingungen, problemlos möglich, die Skalenfunktion auch im Tieftemperaturbereich zu bestimmen. Aufgrund der Goldstone-Moden im Tieftemperaturbereich fällt die Skalenfunktion wieder auf einen konstanten, hier positiven Wert ab. Dieser kann leicht bestimmt werden: Aus der Numerik bis $x = -1000$ erkennt man, dass das Potential gegen den Grenzwert $V_z = h_1 \delta_{1,z} - \delta_{L,z}$ konvergiert. Im Limes $h_1 \rightarrow \infty$ kann die Kraft also mit

der $(L - 1) \times (L - 1)$ -Matrix

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & -1 & \\ & & & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.271)$$

berechnet werden. Die Eigenwerte dieser Matrix sind analytisch bekannt (siehe zum Beispiel [144]) und lauten

$$\varepsilon_\nu = 4 \sin^2 \left[\frac{\pi(\nu - 1/2)}{2L - 1} \right]. \quad (3.272)$$

Für große L gilt also

$$\varepsilon_\nu \approx \left(\frac{\pi}{2L} \right)^2 (2\nu - 1)^2. \quad (3.273)$$

Die freie Energie lässt sich dann mit Hilfe der Zetafunktionsregularisierung berechnen. Definiert man

$$Z(s) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \varepsilon_\nu^{-s}, \quad (3.274)$$

so gilt für die freie Energie

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} f_{\text{ex}}^{\text{ren}}(L, t) = \frac{1}{8\pi} [Z(-1) + Z'(-1)]. \quad (3.275)$$

Die Berechnung der Summe liefert

$$Z(s) = \left(\frac{L}{\pi} \right)^{2s} (4^s - 1) \zeta(2s), \quad (3.276)$$

was schließlich

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} f_{\text{ex}}^{\text{ren}}(L, t) = \frac{3\zeta(3)}{64\pi} L^{-2} \quad (3.277)$$

liefert. Somit erhält man für den Tieftemperaturlimites der Skalenfunktion der Casimir-Kraft

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \vartheta^{(+,+)}(x) = \frac{3\zeta(3)}{32\pi}. \quad (3.278)$$

Die Eigenwerte (3.273) sind die Eigenwerte des Gaußschen Kontinuumsmodells mit Neumann-Randbedingungen auf der einen und Dirichlet-Randbedingungen auf der anderen Oberfläche. Dementsprechend ist der Tieftemperaturlimites (3.278) der Skalenfunktion $\Theta^{(+,0)}(x)$ gleich der Amplitude des besagten Gaußschen Modells.

Crossover-Skalenfunktionen

Nachdem in den letzten Abschnitten die vier Skalenfunktionen an den Fixpunkten der Oberflächenmagnetfelder $h_j^* = \{-\infty, 0, \infty\}$ berechnet wurden, soll nun untersucht werden, wie sich der *Crossover* der Skalenfunktion $\vartheta(x, 0, \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2)$ zwischen den Fixpunkten verhält. Dafür wurden bereits die beiden Skalenvariablen $\mathbf{h}_j = h_j L$ eingeführt. Damit ist es möglich, die Skalenfunktion für einen beliebigen Punkt in der $(\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2)$ -Ebene zu berechnen. Die verschiedenen Möglichkeiten sind in Abbildung 3.24 dargestellt. Ist $h_b = 0$, so gilt zusätzlich zu der Spiegelsymmetrie im Ortsraum

$$\vartheta(x, \mathbf{h}_b, \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2) = \vartheta(x, \mathbf{h}_b, \mathbf{h}_2, \mathbf{h}_1) \quad (3.279)$$

die Symmetrie im Ordnungsparameterraum

$$\vartheta(x, 0, -\mathbf{h}_1, -\mathbf{h}_2) = \vartheta(x, 0, \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2). \quad (3.280)$$

Damit genügt es, den in Abbildung 3.24 rot markierten Bereich

$$G = \{(\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2) \in \mathbb{R}^2 | \mathbf{h}_1 \geq 0, \mathbf{h}_1^2 \geq \mathbf{h}_2^2\} \quad (3.281)$$

zu untersuchen. Die Skalenfunktionen für Kombinationen $(\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2)$, die nicht in diesem Bereich liegen, können immer darauf zurückgeführt werden. Im Folgenden sollen nun einige Spezialfälle untersucht werden, die ausgesucht wurden, da sie zwischen den bereits untersuchten Fixpunkten linear interpolieren. Diese Fälle sind in Abbildung 3.24 als Pfeile markiert. Zudem steht an den Pfeilen eine Beschriftung, welche angibt, in welcher Abbildung die entsprechenden Skalenfunktionen dargestellt sind.

Auch für diese Skalenfunktionen existieren in der Literatur bereits einige Resultate für andere Systeme. In [81] finden sich exakte Ergebnisse für das zweidimensionale Ising-Modell. Dabei wurde der Übergang von $(+, o)$ - nach (o, o) - und $(+, +)$ -Randbedingungen untersucht. Ebenfalls für das zweidimensionale Ising-Modell wurde in [79] der Wert der Skalenfunktion ϑ am kritischen Punkt als Funktion von \mathbf{h}_1 und \mathbf{h}_2 im ersten Quadranten von Abbildung 3.24 mit dem Variationsverfahren nach Mikheev und Fisher [183, 184] bestimmt.

Für das dreidimensionale Ising Modell wurde in [88] mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen der Übergang zwischen $(+, o)$ - und $(+, +)$ -Randbedingungen und in [90] alle in Abbildung 3.24 eingezeichneten Übergänge untersucht. Zudem gibt es *Mean-Field*-Rechnungen für $O(n)$ -symmetrische ϕ^4 -Theorien, welche die Rechnungen von [11] auf Systeme mit

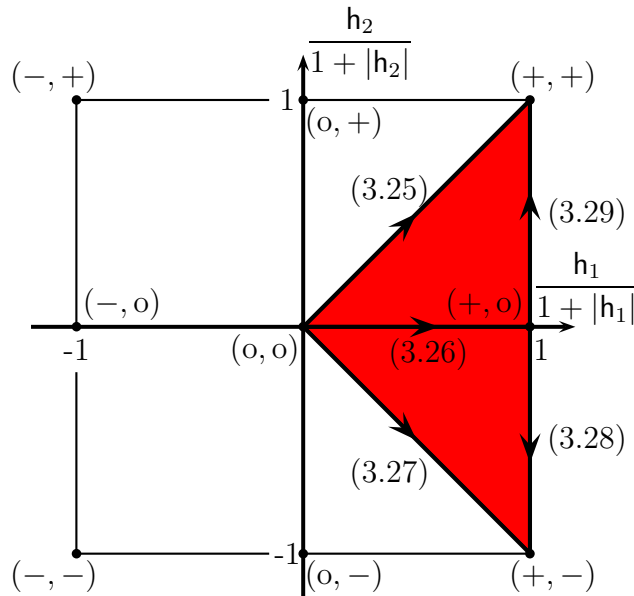


Abbildung 3.24: Struktur in der (h_1, h_2) -Ebene (nach [90]). Für $h_b = 0$ genügt es aufgrund der Symmetrie, den rot markierten Bereich zu betrachten. Es wird die Skalenfunktion der Kraft als Funktion von x für verschiedene Werte von h_j entlang der eingezeichneten Richtungen berechnet. Diese zeichnen sich dadurch aus, dass sie von einem Fixpunkt der Oberflächenfelder zu einem anderen linear interpolieren. Die Beschriftungen an den Pfeilen geben die Nummer der entsprechenden Abbildung in dieser Arbeit an.

Oberflächenfeldern h_j und endlichen Oberflächenkopplungen c_j erweitern [25].

Abbildung 3.25 zeigt die Skalenfunktionen entlang der ersten Winkelhalbierenden $h_1 = h_2$ in der (h_1, h_2) -Ebene aus Abbildung 3.24. Dargestellt sind Ergebnisse für $L = 129$ und $L = 257$. Der Datenkollaps kann durch die Definition einer effektiven Filmdicke $L_{\text{eff}} = L + \delta L(h_1)$ erzielt werden. Für gute Ergebnisse muss dabei der Parameter δL abhängig von der Skalenvariable h_1 des Oberflächenfeldes gewählt werden. $\delta L(h_1)$ wird so gewählt, dass die Minima der beiden Systemgrößen aufeinanderfallen. Für kleine x sind dann aber, bei starker Vergrößerung dieses Bereichs, noch Abweichungen zwischen den Kurven für $L = 129$ und $L = 257$ zu erkennen. Für bessere Ergebnisse müssten hier also noch größere Systeme gerechnet werden. Für $h_1 = 0$ ergibt sich die Skalenfunktion des Systems mit offenen Rändern. Das Extremum der Funktion liegt unterhalb der kritischen Temperatur. Für steigende Werte von h_1 wird das Extremum weniger tief. Zudem bildet sich ein zweites Minimum oberhalb von T_c aus. Dies ist im Bereich um $h_1 = 1/4$ bereits deutlich zu erkennen. Wird die Skalenvariable h_1 weiter erhöht, so verschwindet das erste Minimum bei $x < 0$ und das zweite Minimum wird deutlich tiefer. Für $h_1 \rightarrow \infty$ erhält man die Skalenfunktion für $(+, +)$ -Randbedingungen. Das Minimum der Skalenfunktion mit

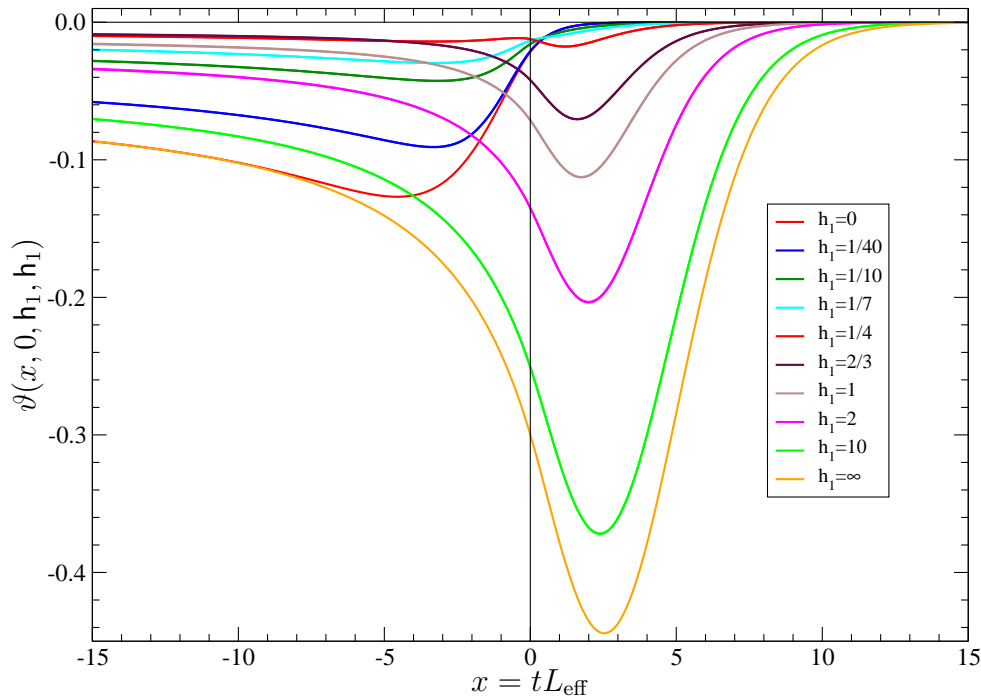


Abbildung 3.25: Übergang der Skalenfunktion mit offenen Randbedingungen in die Skalenfunktion mit $(+, +)$ -Randbedingungen. Für den Datenkollaps wurde $\delta L(1/40) = \delta L(2) = 0.5$, $\delta L(1/10) = \delta L(1/7) = \delta L(1/4) = \delta L(2/3) = \delta L(10) = 0.3$ sowie $\delta L(1) = 0.4$ verwendet.

offenen Rändern bei $x < 0$ wandert also nicht einfach zu positiven Werten von x und wird somit zu dem Minimum der Skalenfunktion mit $(+, +)$ -Randbedingungen. Vielmehr verschwindet das Extremum bei $x < 0$ und es entsteht ein neues bei $x > 0$, wenn die Skalenvariable h_1 erhöht wird.

In Abbildung 3.26 ist der Übergang der Skalenfunktion mit offenen Rändern in die Skalenfunktion mit $(o, +)$ -Randbedingungen dargestellt. Dies entspricht der positiven Abszisse $h_2 = 0$ in der (h_1, h_2) -Ebene aus Abbildung 3.24. Es sind wieder die Ergebnisse für zwei Systemgrößen $L = 129$ und $L = 257$ dargestellt. Auch hier kann der Datenkollaps durch ein h_1 -abhängiges $\delta L(h_1)$ erreicht werden. Die genutzten Werte von δL sind in der Bildunterschrift angegeben und wurden so bestimmt, dass die Minima der zu verschiedenen Systemgrößen gehörenden Kurven aufeinanderliegen. Dabei treten dann erneut unter Vergrößerung deutlich erkennbare Abweichungen zwischen den Kurven verschiedener L für negative x auf. Für $h_1 = 0$ ergibt sich die bekannte Skalenfunktion des Systems mit offenen Rändern. Das hier vorhandene Minimum verliert für steigende h_1 an Tiefe und ist damit deutlich weniger ausgeprägt. Ab einem bestimmten Wert von h_1 entsteht ein zweites Extremum, ein Maximum, in der Nähe von $x = 0$. Dies ist bei $h_1 = 3/8$ schon deutlich erkennbar. Zudem wird die Skalenfunktion hier in einem Temperaturintervall $x \gtrsim -1.2$

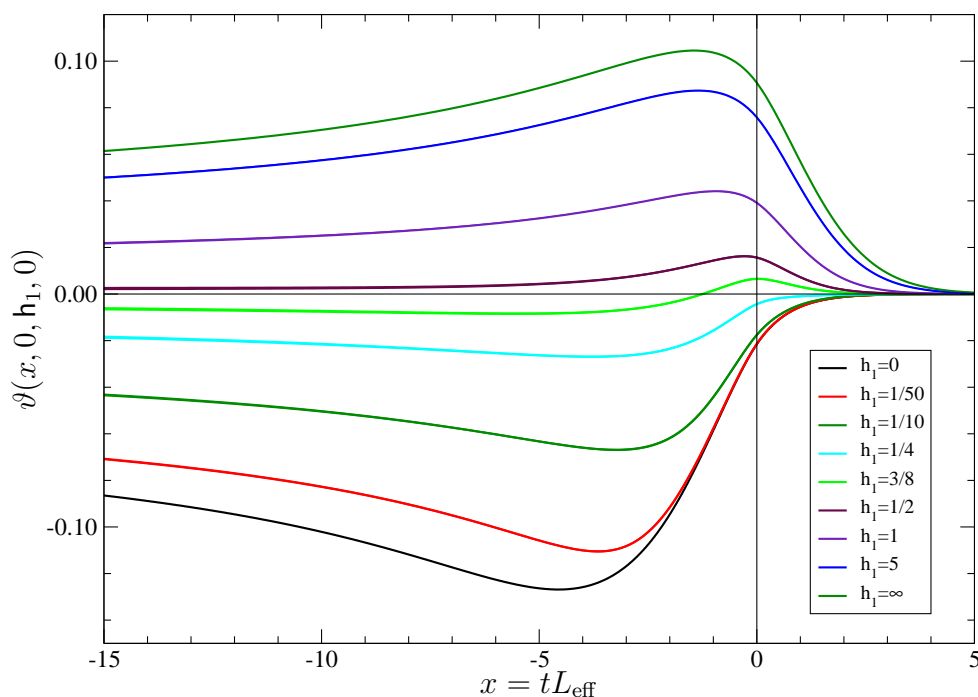


Abbildung 3.26: Übergang der Skalenfunktion mit offenen Randbedingungen in die Skalenfunktion mit $(+, o)$ -Randbedingungen. Für den Datenkollaps wurden die Werte $\delta L(1/50) = 0.69$, $\delta L(1/10) = \delta L(1/4) = \delta L(5) = 0.5$, $\delta L(3/8) = \delta L(1/2) = 0.6$ sowie $\delta L(1) = 0.8$ verwendet.

positiv. Wird die Skalenvariable h_1 weiter erhöht, so verschwindet das Minimum bei $x < 0$ und die Skalenfunktion wird im gesamten Temperaturbereich positiv. Für $h_1 \rightarrow \infty$ ergibt sich die bereits bestimmte Skalenfunktion des Systems mit einem offenen und einem $(+)$ -Rand.

Die Skalenfunktionen entlang der zweiten Winkelhalbierenden $h_2 = -h_1$ in der (h_1, h_2) -Ebene aus Abbildung 3.24 sind für $L = 129$ und $L = 257$ in Abbildung 3.27 dargestellt. Sie gehen bei steigendem h_1 von der Skalenfunktion für offene Ränder bei $h_1 = 0$ in die Skalenfunktion für $(+, -)$ -Randbedingungen bei $h_1 = \infty$ über. Dabei wird das für kleine Werte von h_1 noch vorhandene Minimum im Verlauf deutlich flacher und es verschwindet schnell ganz. Die Skalenfunktionen sind dann im gesamten Temperaturbereich positive und monoton fallende Funktionen. Die Abweichungen zwischen den beiden dargestellten Systemgrößen können wieder mit einer effektiven Filmdicke L_{eff} beschrieben werden und sind so klein, dass sie nur bei starker Vergrößerung sichtbar werden.

Es verbleibt noch die Analyse der Übergänge entlang der in Abbildung 3.24 am rechten Bildrand senkrecht eingezeichneten Linie $h_1 = \infty$. Aufgrund der unterschiedlichen Größenordnungen der Kraft für $h_2 > 0$ und $h_2 < 0$ wird dies in zwei Bereiche geteilt. Abbildung 3.28 zeigt diesen Fall für $h_2 \leq 0$ und Abbildung 3.29 für $h_2 \geq 0$.

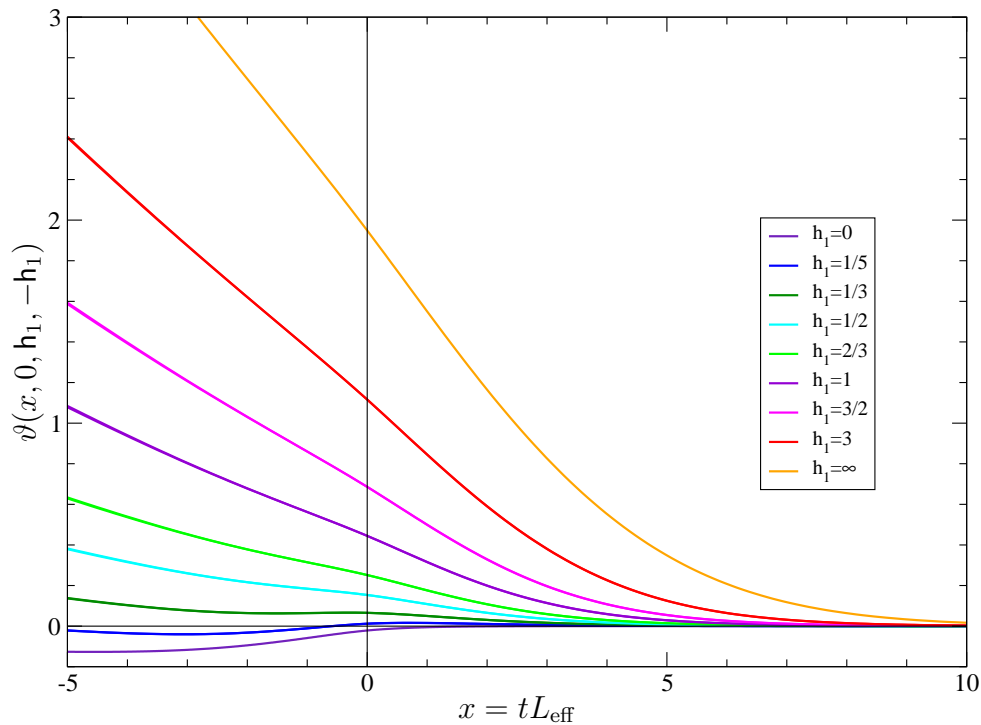


Abbildung 3.27: Übergang der Skalenfunktion mit (o, o) -Randbedingungen in die Skalenfunktion mit $(+, -)$ -Randbedingungen. Für den Datenkollaps wurde für alle h_1 der Werte $\delta L = 0.5$ verwendet.

Die strichlierten Kurven in Abbildung 3.28 sind die Daten für $L = 129$, die durchgezogenen Linien für $L = 257$. Man erkennt deutliche Korrekturen zum Skalenverhalten, die für endliche Werte von h_2 nicht vollständig durch die eingeführte effektive Filmdicke beschrieben werden können. Warum die Korrekturen in diesem Fall so stark im Vergleich zu den anderen Fällen sind, ist unklar. Offensichtlich müssen hier noch deutlich größere Systeme untersucht werden, um einen guten Datenkollaps zu erzielen. Die hier untersuchten Systeme sind jedoch groß genug, um einen Eindruck vom Verlauf der Skalenfunktionen zu bekommen.

Der Übergang von der Skalenfunktion mit $(+, +)$ -Randbedingungen zu der mit $(+, -)$ -Randbedingungen verläuft ähnlich zu dem in Abbildung 3.27 dargestellten Übergang von offenen zu $(+, -)$ -Randbedingungen. Das Extremum unterhalb der kritischen Temperatur wird für größere $-h_2$ breiter und weniger ausgeprägt, bis es ganz verschwindet. Gleichzeitig wächst die Skalenfunktion im Tieftemperaturbereich stark an, was dazu führt, dass sie zu einer monoton fallenden Funktion wird.

Der Bereich für $h_2 \geq 0$ ist in Abbildung 3.29 für $L = 129$ und $L = 257$ dargestellt. Bei steigendem h_2 wird das Maximum der Skalenfunktion mit $(+, o)$ -Randbedingungen flacher. Gleichzeitig bildet sich oberhalb der kritischen Temperatur ein Minimum der Ska-

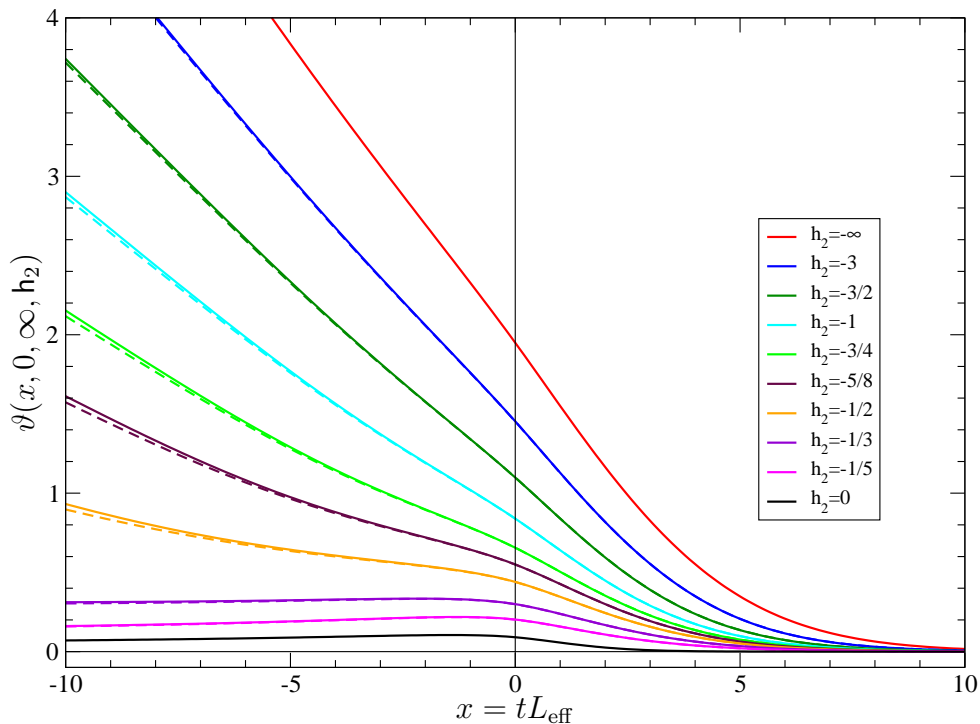


Abbildung 3.28: Übergang der Skalenfunktion mit $(+, o)$ -Randbedingungen in die Skalenfunktion mit $(+, -)$ -Randbedingungen. Für den Datenkollaps wurden die Werte $\delta L(-3) = \delta L(-1) = \delta L(-3/4) = 0.3$, $\delta L(-3/2) = 0.35$, $\delta L(-5/8) = 0.25$, $\delta L(-1/2) = \delta L(-1/3) = 0.2$ sowie $\delta L(-1/5) = 0.1$ verwendet.

lenfunktion aus, welches zunehmend ausgeprägter wird. In dem Übergangsbereich ist die Skalenfunktion für kleine x positiv und für große x bereits negativ. Steigt h_1 weiter an, so wird sie im gesamten Temperaturbereich negativ.

Die in diesem Abschnitt berechneten *Crossover*-Skalenfunktionen stimmen also mit den aus der Literatur bekannten Ergebnissen für zwei- und dreidimensionale Ising-Modelle sowie mit den *Mean-Field*-Rechnungen weitgehend qualitativ überein. Abweichungen treten vor allem bei tiefen Temperaturen auf. Sie können dadurch erklärt werden, dass das Ising-Modell keine kontinuierliche Symmetrie aufweist und somit keine Goldstone-Moden auftreten. Die Skalenfunktionen müssen daher für $x \rightarrow -\infty$ gegen Null konvergieren. Gleiches gilt für die *Mean-Field*-Theorie, von der bekannt ist, dass sie das Tieftemperaturverhalten für $n > 1$ nicht korrekt beschreibt.

Skalenfunktion der Kraft am kritischen Punkt

Analog zu der in Teil 2 dieser Arbeit berechneten Skalenfunktion $\mathcal{D}(c_1, c_2)$ der Casimir-Kraft am *Bulk*-kritischen Punkt in Abhängigkeit der mit den Oberflächenkopplungen c_j assoziierten Skalenvariablen $c_j \geq 0$ kann im Limes $n \rightarrow \infty$ die Skalenfunktion $\Delta(h_1, h_2) =$

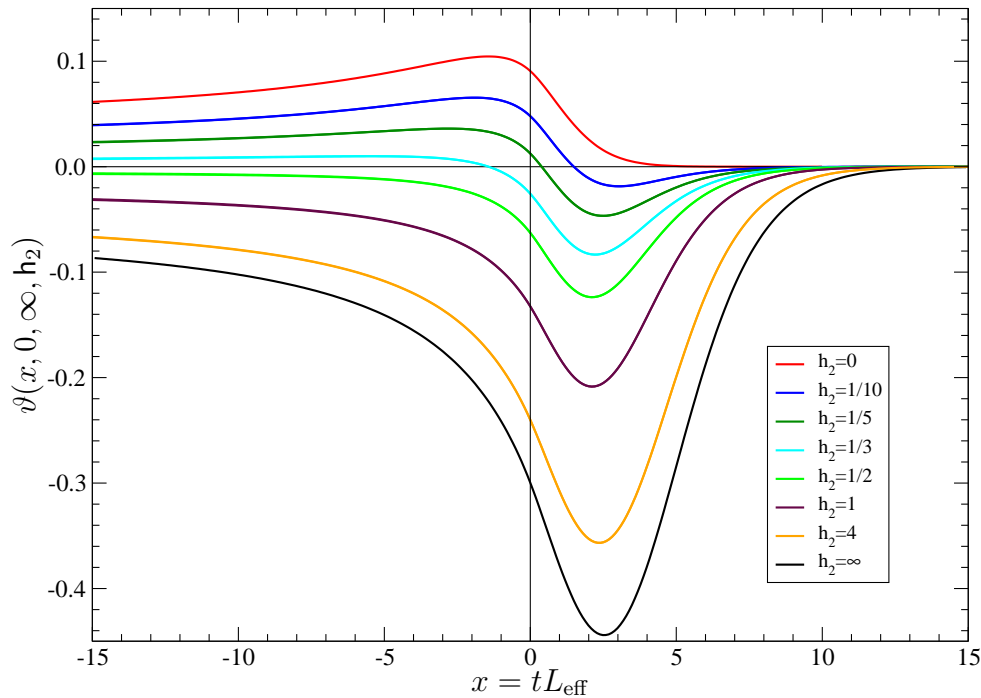


Abbildung 3.29: Übergang der Skalenfunktion mit $(+, o)$ -Randbedingungen in die Skalenfunktion mit $(+, +)$ -Randbedingungen. Für den Datenkollaps wurden die Werte $\delta L(4) = 0.26$, $\delta L(1) = 0.18$, $\delta L(1/2) = 0.11$, $\delta L(1/3) = 0.05$, $\delta L(1/5) = 0.2$ sowie $\delta L(1/10) = 0.4$ verwendet.

$\mathcal{D}(x = 0, \mathbf{h}_b = 0, \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2)$ in drei Dimensionen bestimmt werden. Die Skalenvariablen sind dabei nicht auf positive Werte beschränkt. Aufgrund der Symmetrie des Problems gilt

$$\Delta(\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2) = \Delta(\mathbf{h}_2, \mathbf{h}_1) \quad (3.282a)$$

sowie

$$\Delta(-\mathbf{h}_1, -\mathbf{h}_2) = \Delta(\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2). \quad (3.282b)$$

Um also die Skalenfunktion $\Delta(\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2)$ für alle Wertepaare der Argumente zu bestimmen, genügt es aufgrund der Symmetrie (3.282), sich auf das Gebiet

$$G = \{(\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2) \in \mathbb{R}^2 | \mathbf{h}_1 \geq 0, \mathbf{h}_1^2 \geq \mathbf{h}_2^2\} \quad (3.283)$$

zu beschränken.

Statt wie in Teil 2 dieser Arbeit die Skalenfunktion D des *Finite-Size*-Anteils der freien Energie zu bestimmen, wird hier direkt die Skalenfunktion \mathcal{D} der Kraft berechnet. Prinzipiell kann aus dieser die Funktion D nach Gleichung (3.258) durch numerische Integration erhalten werden. Darauf soll hier aber verzichtet werden.

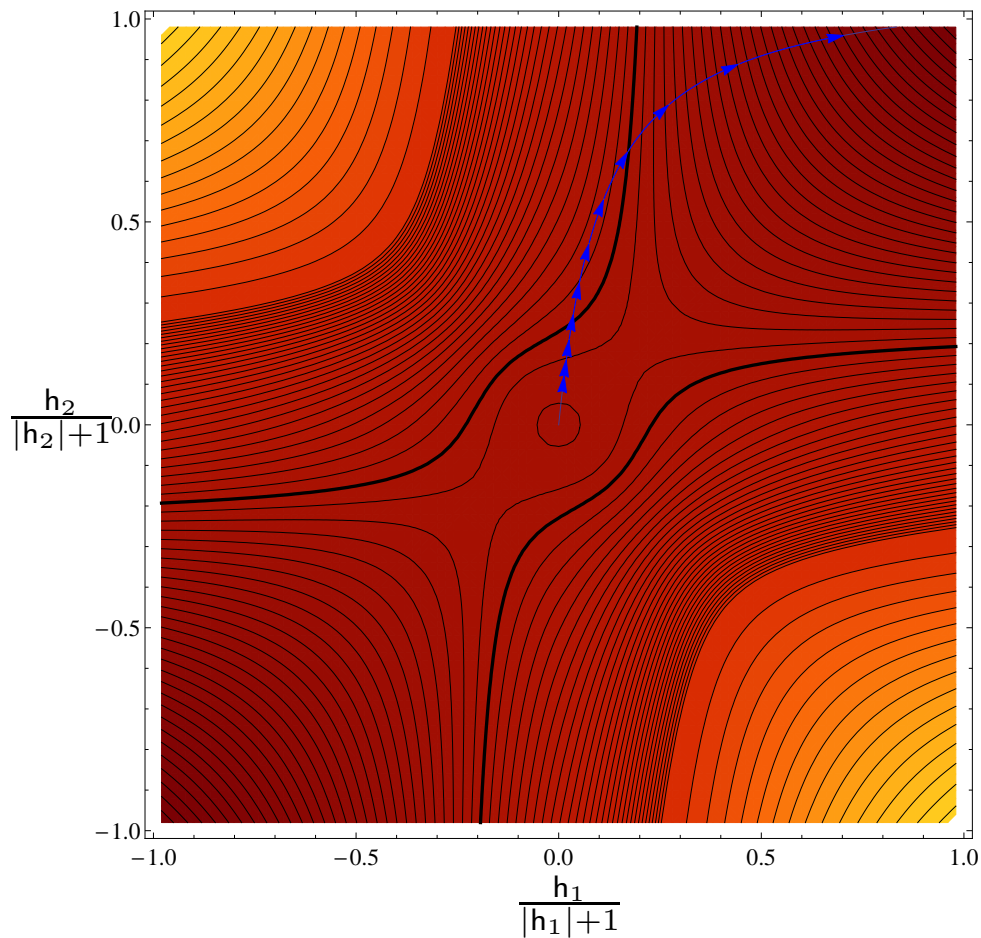


Abbildung 3.30: *Contourplot* der Skalenfunktion $\vartheta(0, 0, \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2)$ der Casimir-Kraft am *Bulk*-kritischen Punkt als Funktion der beiden Oberflächenfelder $\mathbf{h}_1 = h_1 L_{\text{eff}}$ und $\mathbf{h}_2 = h_2 L_{\text{eff}}$, gewonnen aus Rechnungen für $L = 257$. Die fett gezeichnete Isolinie gibt die Nullstellen der Kraft an. Eingezeichnet als blaue Linie ist zudem der durch eine Änderung der Filmdicke bei festem $h_1 = 0.01$ und $h_2 = 0.1$ beschriebene Trajektorie. Es sind wieder *Crossover* zwischen attraktiven und repulsiven Wechselwirkungen möglich.

Abbildung 3.30 zeigt einen *Contourplot* der Skalenfunktion der Casimir-Kraft als Funktion der Variablen $\mathbf{h}_j/(|\mathbf{h}_j| + 1)$. Dargestellt sind die Isolinien der Kraft für $L = 257$. Im Bereich $-0.3 \leq \vartheta \leq 0.1$ wurden für diese Abstände von 0.01 gewählt, im übrigen Bereich Abstände von 0.1. Für die ebenso gerechneten Systeme mit $L = 129$ ergaben sich nahezu identische Konturlinien. Die Nullstellen der Funktion sind fett hervorgehoben. Es ergibt sich eine qualitativ ähnliche Funktion wie bei der Untersuchung der Robin-Randbedingungen in Teil 2 dieser Arbeit. Ist die Symmetrie des Systems nur leicht gebrochen ($\mathbf{h}_1 \simeq \mathbf{h}_2$), so ist die Wechselwirkung immer attraktiv. Um repulsive Kräfte zu beobachten, darf die Symmetrie nicht nur leicht gebrochen sein. Ebenso sind für bestimmte Wahlen der Oberflächenfelder h_1 und h_2 wieder *Crossover* zwischen attraktivem und repulsivem

Verhalten möglich. Bedingung dafür ist $|h_1/h_2| \gtrsim 4.4$ oder $|h_2/h_1| \gtrsim 4.4$. Wählt man zum Beispiel $h_1 = 1/100$ und $h_2 = 1/10$, so ergibt sich für kleine Plattenabstände eine attraktive Wechselwirkung. Im Intervall $3.4 \lesssim L \lesssim 20.5$ wird die Wechselwirkung repulsiv, bevor sie für noch größere Werte des Plattenabstands wieder attraktiv wird. Die bei der Variation der Filmdicke für feste Werte $(h_1, h_2) = (1/100, 1/10)$ durchlaufene Trajektorie ist in Abbildung 3.30 als blaue Flusslinie dargestellt. Sie überquert zweimal die Isolinie der verschwindenden Casimir-Kraft.

In [79] wurde diese Skalenfunktion für das zweidimensionale Ising-Modell für $h_j > 0$, also im ersten Quadranten von Abbildung 3.30, berechnet. Die Form der Funktion stimmt qualitativ mit den hier vorgestellten Ergebnissen überein.

In [90] wurde diese Funktion für die drei Spezialfälle $h_1 = \infty$, $h_2 = |h_1|$ sowie $h_1 = 0$ durch Monte-Carlo-Simulationen des dreidimensionalen Ising-Modells ermittelt. Auch hier stimmt der Verlauf der Kurven mit denen im *Large-n*-Limes qualitativ überein.

3.8 Ausblick: Erweiterungsmöglichkeiten

Zu dem in diesem Teil der Arbeit untersuchten *Large-n*-Limes des n -Vektor-Modells bieten sich einige naheliegende Erweiterungsmöglichkeiten an. Diese sollen in diesem Kapitel kurz vorgestellt werden. Dabei wird zunächst auf die Möglichkeit eingegangen, für die bisher auf $d = 3$ beschränkte Dimensionalität des Systems andere Werte $2 < d < 4$ zuzulassen. Diese Ergebnisse können dann auch dazu genutzt werden, Casimir-Amplituden in stark anisotropen Systemen zu berechnen. Darauf soll im zweiten Abschnitt dieses Kapitels eingegangen werden. Zuletzt wird noch skizziert, wie über den Limes $n \rightarrow \infty$ hinausgegangen und eine systematische Entwicklung in $1/n$ formuliert werden kann.

3.8.1 Erweiterung auf andere Dimensionen $2 < d < 4$

Die im *Large-n*-Limes vorgenommenen Rechnungen wurden zunächst in beliebigen Dimensionen durchgeführt, bevor sie auf den dreidimensionalen Fall spezialisiert wurden. Sie können daher direkt dazu verwendet werden, die erlangten Ergebnisse auf das Intervall mit nicht-trivialem kritischem Verhalten $2 < d < 4$ zu erweitern. Dies ist vor allem im Zusammenhang mit Teil 2 dieser Arbeit von Bedeutung, da es für $d > 3$ auch im *Large-n*-Limes möglich ist — analog zu den störungstheoretischen Rechnungen für Robin-Randbedingungen — den Übergang zwischen der gewöhnlichen Oberflächenuniversalitätsklasse mit dem Fixpunkt $c_j^* = \infty$ und dem speziellen Punkt $c_j^* = c_{\text{sp}}$ zu untersuchen. Zudem ist es hier auch möglich, die Analyse auf das Intervall $-\infty < c \leq c_{\text{sp}}$ auszudehnen und somit

die außergewöhnlichen Klasse $c_j^* = -\infty$ zu analysieren. Da für drei Dimensionen der spezielle Punkt nicht existiert und ab vier Dimensionen bereits *Mean-Field*-artiges Verhalten vorliegt, muss man dazu jedoch auch nicht-ganzzahlige Dimensionen $3 < d < 4$ zulassen. Da die Skalenfunktionen analytisch von der Dimension d abhängen, sind hier Ergebnisse zu erwarten, die qualitativ mit realen physikalischen Systemen übereinstimmen. So kann die Skalenfunktion ϑ der Kraft als Funktion von sechs Skalenvariablen bestimmt werden. Sie hat dann die Skalenform [10]

$$\beta\mathcal{F}_C \approx L^{-d}\vartheta(x, h_b L^{\Delta/\nu}, c_1 L^{\Phi/\nu}, c_2 L^{\Phi/\nu}, h_1 L^{\Delta_1^{\text{sp}}/\nu}, h_2 L^{\Delta_1^{\text{sp}}/\nu}). \quad (3.284)$$

Die kritischen Exponenten sind im *Large-n*-Limes exakt für beliebige Dimensionen bekannt [59, 75, 143]. Der Oberflächen-*Crossover*-Exponent lautet

$$\Phi = \frac{d-3}{d-2} \quad (3.285)$$

und das Oberflächenanalogon Δ_1 zum *Gap*-Exponenten Δ ist hier gegeben durch

$$\Delta_1^{\text{sp}} = \frac{2}{d-2}. \quad (3.286)$$

Die übrigen Exponenten sind für beliebige Dimensionen in den Kapiteln 3.5 und 3.7 dieser Arbeit angegeben. Obwohl also die nötigen Gleichungen für die freie Energie des *Bulk*-Systems, des Films und die zugehörigen Selbstkonsistenzgleichungen schon hergeleitet und berechnet sind, ist noch mit vielfältigen neuen Problemen und Herausforderungen zu rechnen.

Zur Demonstration der Möglichkeiten soll im Folgenden die Casimir-Amplitude des *Large-n*-Modells mit offenen Randbedingungen als Funktion der Dimension für $2 < d < 4$ bestimmt werden.

Im Limes $g \rightarrow \infty$ vereinfacht sich die Selbstkonsistenzgleichung am kritischen Punkt zu

$$\frac{2^{d-3}\Gamma\left(\frac{d-2}{2}\right)}{\sqrt{\pi}\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} = \langle z | \mathbf{H}^{\frac{d-3}{2}} | z \rangle \quad \text{mit} \quad 2 < d < 4 \quad \text{und} \quad d \neq 3. \quad (3.287)$$

Für die Exzess-Freie-Energie gilt im selben Limes

$$f_{\text{ex}}(L, t = 0) = \pi^{1-\frac{d}{2}} \frac{\sec\left(\frac{\pi d}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{d+1}{2}\right)} \left\{ \frac{\Gamma\left(\frac{d}{2} - 1\right)}{32\Gamma\left(\frac{d+1}{2}\right)} \left[8(d-2)L + (d-1)^2 \sum_{z=1}^L V_z \right] + \right. \\ \left. - \sqrt{\pi} 2^{-d} \sum_{\nu=1}^L \varepsilon_{\nu}^{\frac{d-1}{2}} \right\}. \quad (3.288)$$

Diese Gleichungen bilden den Ausgangspunkt für die folgende Analyse. Dabei ist zu beachten, dass die führenden Korrekturen zum Skalenverhalten nur in drei Dimensionen bei $g^* = \infty$ verschwinden. Für $d > 3$ ist $g^* < \infty$. Damit enthalten die Ergebnisse für die Exzess-Freie-Energie im Limes $g \rightarrow \infty$ noch die führenden Korrekturen. Für eine genauere Analyse müsste g wieder auf seinen von der Dimension abhängigen Fixpunktwert gesetzt werden. Darauf wurde hier jedoch verzichtet, da dies die Gleichungen und Auswertung deutlich verkomplizieren würde. Für $2 < d < 3$ ist es nach der Diskussion in Kapitel 3.5 zudem unmöglich, die führenden Korrekturen zu unterdrücken. Diese Korrekturen zum Skalenverhalten sind proportional zu $L^{-\omega}$ für $3 < d < 4$ und proportional zu L^{-1} für $2 < d < 3$. Dabei ist $\omega = 4 - d$ wieder der Wegner-Exponent. In $d = 3$ sind die beiden Exponenten entartet und es treten logarithmische Anomalien auf (siehe Kapitel 3.5).

In Abbildung 3.31 sind die aus Rechnungen für Systemgrößen bis $L = 1024$ gewonnenen Abschätzungen für $\Delta_{\text{C}}(d)$, normiert auf die entsprechende Gaußsche Amplitude [12]

$$\Delta_{\text{C,G}}^{(o,o)}(d) = -\frac{1}{(4\pi)^{d/2}} \Gamma\left(\frac{d}{2}\right) \zeta(d), \quad (3.289)$$

dargestellt. Diese Ergebnisse erhält man, wenn man die Gleichungen (3.287) und (3.288) numerisch löst. Fittet man an die Daten der Exzess-Freien-Energie Funktionen der Form

$$f_{\text{ex}}(L, 0) = \begin{cases} f_s + L^{-(d-1)} (\Delta_{\text{C}}(d) + g_1^> L^{-\omega} + \dots) & \text{für } 3 < d < 4 \\ f_s + L^{-(d-1)} (\Delta_{\text{C}}(d) + g_1^< L^{-1} + \dots) & \text{für } 2 < d < 3, \end{cases} \quad (3.290)$$

so lässt sich die Casimir-Amplitude aus den Fit-Ergebnissen ablesen. Ein Problem tritt dabei in der Nähe von $d = 4$ auf. Hier geht der Wegner-Exponent gegen Null, was bedeutet, dass beliebig starke Korrekturen auftreten, die sich von der führenden Ordnung kaum noch unterscheiden lassen. Daher werden die Ergebnisse für Δ_{C} hier sehr ungenau. Für genauere Ergebnisse müsste man hier Werte von $g < \infty$ zulassen. Es ist jedoch bekannt, dass die Casimir-Amplitude für $d \rightarrow 4$ gegen ihren Gaußschen Wert konvergiert. Ebenso ist die Entwicklung um vier Dimensionen bekannt [12]. Sie ist in Gleichung (2.128) für

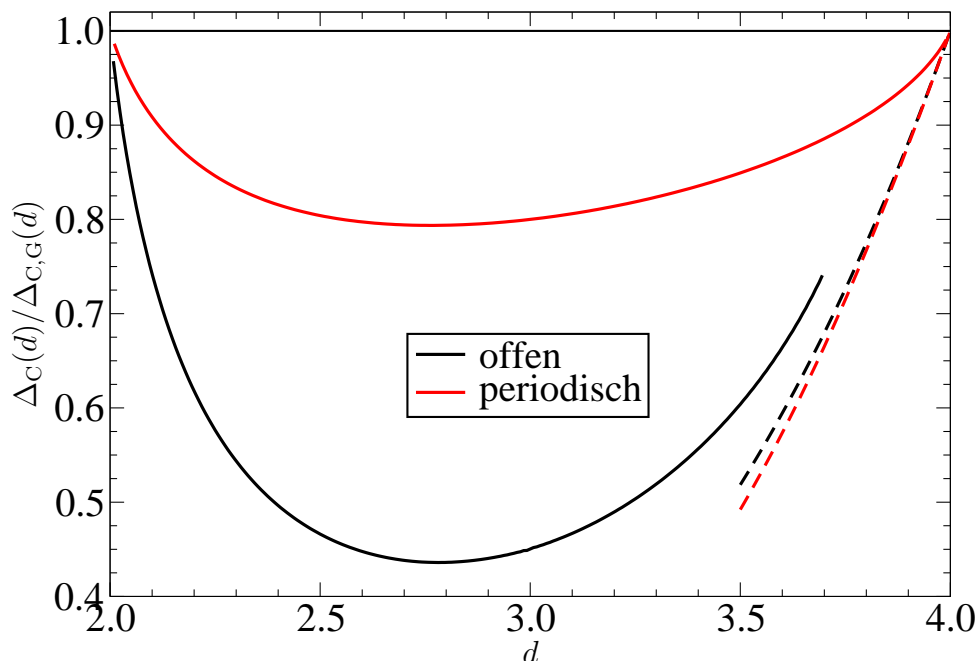


Abbildung 3.31: Die Casimir-Amplitude als Funktion der Dimension für offene und periodische Randbedingungen. Die Ergebnisse sind auf die Amplitude des entsprechenden Gauß-Modells normiert. Die strichlierten Linien zeigen die Entwicklung um die obere kritische Dimension.

endliche n angeben und lautet im Limes $n \rightarrow \infty$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\Delta_C^{(o,o)}}{n} = -\frac{\pi^2}{1440} \left\{ 1 + \epsilon \left[\log(2\sqrt{\pi}) + \frac{\gamma_E - 1}{2} - \frac{\zeta'(4)}{\zeta(4)} - \frac{5}{4} \right] + O(\epsilon^2) \right\}. \quad (3.291)$$

Diese Entwicklung ist in Abbildung 3.31 als strichlierte Linie eingezeichnet. Zudem sind hier die analogen Ergebnisse für periodische Randbedingungen abgebildet. Die Amplitude des Gaußschen Modells findet sich in [12], die des sphärischen Modells kann aus [76] abgelesen werden. Die Entwicklung um $d = 4$ enthält hier aufgrund der Nullmode im Spektrum für periodische Randbedingungen auch nicht-ganzzahlige Exponenten. Sie kann der Referenz [18] entnommen werden.

3.8.2 Anwendung auf Lifschitz-Punkte

Eine weitere Möglichkeit zur Anwendung der in dieser Arbeit vorgestellten Methode zur Untersuchung des Casimir-Effekts im *Large- n* -Limes ist die Analyse von Casimir-Kräften in stark anisotropen Systemen. Diese weisen zwei oder mehr verschiedene Korrelationslängen ξ_α und ξ_β auf, die sich wie $\xi_\alpha = \xi_\beta^\theta$ verhalten. Dabei ist θ der sogenannte Anisotropieexponent. Ein prominentes Beispiel dafür sind Systeme mit Lifschitz-Punkten.

Sie können mit der *Bulk*-Lagrangedichte

$$\mathcal{L}_b(\mathbf{x}) = \frac{\mathring{\sigma}}{2} \left(\sum_{\alpha=1}^m \partial_\alpha^2 \phi \right)^2 + \frac{\mathring{\rho}}{2} \sum_{\alpha=1}^m (\partial_\alpha \phi)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\beta=m+1}^d (\partial_\beta \phi)^2 + \frac{\mathring{\tau}}{2} \phi^2 + \frac{\mathring{u}}{4!} |\phi|^4 \quad (3.292)$$

beschrieben werden. In der Landau-Näherung befindet sich der Lifschitz-Punkt bei $\mathring{\tau} = \mathring{\rho} = 0$, der Anisotropieexponent hat in dieser Näherung den Wert $\theta = 1/2$. Die untere kritische Dimension ist $d_*(m) = 2 + m/2$, die obere kritische Dimension $d^*(m) = 4 + m/2$. Zur Untersuchung des Casimir-Effektes in diesem Modell ist es nötig, Oberflächenbeiträge zur Lagrangedichte hinzuzufügen. Diese sind abhängig davon, ob die Richtung, in der das System beschränkt wird, eine α - oder eine β -Richtung ist, \mathcal{L}_j^\perp oder \mathcal{L}_j^\parallel . Im Falle einer β -Richtung spricht man vom parallelen Fall. Ist die endliche Richtung eine α -Richtung, so wird vom senkrechten Fall gesprochen. Die Oberflächenterme der Lagrangedichte sind aus der Literatur bekannt.¹⁵ Sie führen zu den mesoskopischen Randbedingungen

$$\phi(\mathbf{x}) = 0 \quad (3.293)$$

im parallelen Fall sowie

$$\phi(\mathbf{x}) = \partial_n \phi(\mathbf{x}) = 0 \quad (3.294)$$

im senkrechten Fall.

In der Diplomarbeit [185] und der daraus entstandenen Publikation [74] wurden Casimir-Kräfte an solchen Lifschitz-Punkten untersucht. Sie fallen, wie auch die Kräfte an kritischen Punkten, algebraisch in der Filmdicke ab. Dabei sind jedoch die Amplituden $\Delta_\zeta^{(\varphi)}(d, m)$ sowie die den algebraischen Abfall beschreibenden Exponenten ζ_ζ explizit von der Orientierung $\zeta = \parallel, \perp$ abhängig. Es gilt $\zeta_\parallel = d - m + \theta m - 1$ sowie $\zeta_\perp = (d - m)/\theta + m - 1$. Im Rahmen einer ϵ -Entwicklung um die obere kritische Dimension für Dirichlet- sowie periodische Randbedingungen wurden in [74,185] die Casimir-Amplituden berechnet. Zudem wurde die Casimir-Amplitude im Limes $n \rightarrow \infty$ im translationsinvarianten periodischen Fall in drei Dimensionen für die parallele Orientierung berechnet.

Ein weiteres wesentliches Ergebnis von [74,185] ist ein Zusammenhang zwischen der Amplitude des parallelen Falls am Lifschitz-Punkt $\Delta_\parallel^{(\varphi)}(d, m)$ und der am kritischen Punkt des $(d - m/2)$ -dimensionalen isotropen Systems $\Delta_C^{(\varphi)}(d - m/2)$. Dieser lautet

$$\Delta_\parallel^{(\varphi)}(d, m) = C_m \Delta_C^{(\varphi)}(d - m/2) \quad (3.295)$$

¹⁵Für weiterführende Literatur sei auf die in [74] angegebenen Referenzen verwiesen.

mit

$$C_m = \frac{\pi^{(2-m)/4}}{2^m \Gamma\left(\frac{m+2}{4}\right)} \quad (3.296)$$

und kann nun zusammen mit den Ergebnissen für die Abhängigkeit der Casimir-Amplitude von der Dimensionalität aus Abschnitt 3.8.1 dazu genutzt werden, die Amplituden

$$\Delta_{\parallel,\infty}^{(o,o)}(4,1) = \frac{\pi^{1/4}}{2\Gamma(3/4)} \Delta_C(7/2) = -0.0402(5) \quad (3.297)$$

$$\Delta_{\parallel,\infty}^{(o,o)}(4,2) = \frac{1}{4} \Delta_C(3) = -0.002693351712561955(3) \quad (3.298)$$

$$\Delta_{\parallel,\infty}^{(o,o)}(3,1) = \frac{\pi^{1/4}}{2\Gamma(3/4)} \Delta_C(5/2) = -0.013010(3) \quad (3.299)$$

zu bestimmen.

Die Selbstkonsistenzgleichung für den parallelen Fall ist für offene und periodische Ränder in Appendix B von [74] hergeleitet. Die Diskretisierung ist offensichtlich und die Impulsintegrale können direkt berechnet werden. Auf diese Art ist es also möglich, zusätzlich zu den Amplituden die gesamten Skalenfunktionen zu bestimmen.

Der Fall der senkrechten Orientierung ist aufgrund des fehlenden Zusammenhangs der Form (3.295) komplexer. Aber auch hier können mit den in dieser Arbeit vorgestellten Methoden Ergebnisse erzielt werden. Im physikalisch relevanten uniaxialen Fall ($m = 1$) wird die diskrete vierte Ableitung mit den Randbedingungen (3.294) benötigt. Sie kann durch die Matrix $\mathbf{D}^4 = -6\delta_{z,z'} + 4\delta_{|z-z'|,1} - \delta_{|z-z'|,2}$ dargestellt werden. Für periodische Randbedingungen gilt $\mathbf{D}^4 = -6\delta_{z,z'} + 4\delta_{|z-z'|,1} + 4\delta_{|z-z'|,L} - \delta_{|z-z'|,2} - \delta_{|z-z'|,L-1}$. Für die *Bulk*-Terme wird zusätzlich die Gitterdispersion der diskreten negativen vierten Ableitung $-\mathbf{D}^4$ benötigt. Sie kann gewonnen werden, indem man einen Ansatz ebener Wellen macht. So erhält man

$$\varepsilon(k) = 16 \sin^4\left(\frac{k}{2}\right). \quad (3.300)$$

Die Integration darüber ist wieder analytisch möglich und erlaubt somit die Berechnung von $\hat{\tau}_{\text{LP}}$ und des *Bulk*-Terms der freien Energie. Auch hier bereitet das Einführen einer Temperatur keine zusätzlichen Probleme, sodass wieder die Skalenfunktionen im gesamten Temperaturbereich berechnet werden können.

3.8.3 Systematische Entwicklung in $1/n$

Das in dieser Arbeit untersuchte *Large-n*-Modell ist nur der niedrigste Term in einer systematischen Entwicklung in $1/n$ [149, 186]. Möglichkeiten der Anwendung der $1/n$ -Entwicklung in Bereichen auch außerhalb der statistischen Physik finden sich zum Bei-

spiel in [153] sowie in der Sammlung [187]. Im Folgenden soll erläutert werden, wie über die niedrigste Ordnung hinausgegangen und die höheren Ordnungen berechnet werden können. Dafür geht man von der Entwicklung des Exponenten nach Gleichung (3.10) aus. Während dort nur die unterste Ordnung in der Funktionalentwicklung berücksichtigt und bereits der quadratische Term vernachlässigt wurde, soll nun angedeutet werden, wie die höheren Terme bestimmt werden können. Dafür soll der Vorgehensweise von [188–190] gefolgt werden, wo der erste Korrekturterm $O(1/n)$ für *Bulk*-Systeme analysiert wurde. Die Anwendung dieser Methode auf das halbbunendliche Modell mit verschiedenen Randbedingungen findet sich in [191–194].

Ausgangsbasis für die Entwicklung der freien Energie ist erneut Gleichung (3.9) für die Zustandssumme

$$\mathcal{Z} \propto \int \mathcal{D}[\psi] \exp \left\{ -\frac{n}{2} \left[\text{Sp} \log (-\nabla^2 + \dot{\tau} + i\psi) + \frac{3}{g} \int d^d x \psi^2 \right] \right\}. \quad (3.9)$$

Die Entwicklung des Exponenten um das Extremum $\psi_0(\mathbf{x}) \equiv \psi_0(z)$ in der Variablen $\eta(\mathbf{x}) \equiv \psi(\mathbf{x}) - \psi_0(\mathbf{x})$ kann systematisch bestimmt werden. Dies soll im Folgenden gezeigt werden. Dazu schreibt man

$$\begin{aligned} \text{Sp} \log (-\nabla^2 + \dot{\tau} + i\psi) &= \text{Sp} \log (-\nabla^2 + \dot{\tau} + i\psi_0) + \\ &+ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \int dx_1 \cdots dx_m \eta(\mathbf{x}_1) \cdots \eta(\mathbf{x}_m) \mathbf{K}_m(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m|L), \end{aligned} \quad (3.301)$$

wobei die Operatoren

$$\mathbf{K}_m(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m|L) = \frac{\delta}{\delta\psi(\mathbf{x}_1)} \cdots \frac{\delta}{\delta\psi(\mathbf{x}_m)} \text{Sp} \log (-\nabla^2 + \dot{\tau} + i\psi) \Big|_{\psi(\mathbf{x}_j)=\psi_0(\mathbf{x}_j), j=1, \dots, m} \quad (3.302)$$

definiert wurden. Diese können nun rekursiv berechnet werden.

Die erste Ordnung dieser Entwicklung wurde schon in Abschnitt 3.2 bestimmt. Definiert man — wie in Abschnitt 3.7 — den Propagator

$$G^{(d)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2|L) = \langle \mathbf{x}_1 | (-\nabla^2 + \dot{\tau} + i\psi)^{-1} | \mathbf{x}_2 \rangle \quad (3.303)$$

so lässt sie sich schreiben als

$$\mathbf{K}_1(\mathbf{x}_1|L) = i G^{(d)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1|L), \quad (3.304)$$

Der Operator \mathbf{K}_2 kann daraus nun durch Ableiten nach $\psi(\mathbf{x}_2)$ gewonnen werden. Mit der Ableitungsregel aus Abschnitt 3.7 (siehe Gleichung (3.240))

$$\frac{\delta G^{(d)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2|L)}{\delta \psi(\mathbf{x}_3)} = -i G^{(d)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3|L) G^{(d)}(\mathbf{x}_3, \mathbf{x}_1|L) \quad (3.305)$$

erhält man

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2|L) &= \left. \frac{\delta}{\delta \psi(\mathbf{x}_2)} i G^{(d)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1|L) \right|_{\psi(\mathbf{x}_2)=\psi_0(\mathbf{x}_2)} \\ &= -(-i)^2 G^{(d)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2|L) G^{(d)}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1|L). \end{aligned} \quad (3.306)$$

Dies kann weiter fortgeführt werden. Unter Anwendung der Ableitungsregel (3.305) und der Produktregel ergibt sich für den m -ten Term

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_m(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m|L) &= \\ &= -(-i)^m (m-1)! G^{(d)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2|L) G^{(d)}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3|L) \cdots G^{(d)}(\mathbf{x}_m, \mathbf{x}_1|L). \end{aligned} \quad (3.307)$$

In der diagrammatischen Schreibweise ergibt sich also

$$\begin{aligned} \text{Sp log}(-\nabla^2 + \hat{\tau} + i\psi) &= \\ &= \text{Sp log}(-\nabla^2 + \hat{\tau} + i\psi_0) + i \text{ (Diagramm 1) } + \frac{1}{2} \text{ (Diagramm 2) } - \frac{i}{3} \text{ (Diagramm 3) } - \frac{1}{4} \text{ (Diagramm 4) } + \dots \end{aligned} \quad (3.308)$$

Die Punkte stehen für eine Ortskoordinate \mathbf{x}_j , die äußeren Beinchen an diesem Punkt für $\eta(\mathbf{x}_j) \equiv \psi(\mathbf{x}_j) - \psi_0(\mathbf{x}_j)$ und die Linien zwischen zwei Orten \mathbf{x}_i und \mathbf{x}_j für einen Propagator $G_L^{(d)}(\psi, \hat{\tau}|\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$. Es wird über alle Orte \mathbf{x}_j integriert. Der Vorfaktor eines Diagramms m -ter Ordnung ist $-(-i)^m/m$. Bei dieser Schreibweise sind in den Diagrammen keine weiteren Symmetriefaktoren enthalten.

Die Entwicklung des verbleibenden Terms des Exponenten von Gleichung (3.9) ist trivial und ergibt

$$\begin{aligned} \frac{3}{g} \int d^d x \psi^2 &= \frac{3}{g} \int d^d x \psi_0^2(\mathbf{x}) + \frac{6}{g} \int d^d x_1 \psi_0(\mathbf{x}_1) \eta(\mathbf{x}_1) \\ &\quad + \frac{3}{g} \int d^d x_1 \int d^d x_2 \eta(\mathbf{x}_1) \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \eta(\mathbf{x}_2) \end{aligned} \quad (3.309)$$

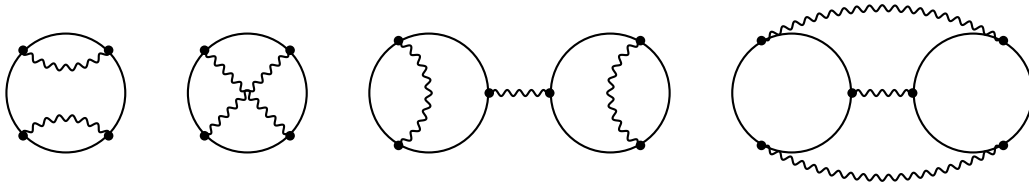


Abbildung 3.32: Alle vier Diagramme, welche zu der Ordnung $1/n^2$ beitragen.

Die Kombination der Terme linear in $\eta(\mathbf{x})$ aus Gleichungen (3.308) und (3.309) verschwindet am Extremum ψ_0 . Mit der Substitution $\eta(\mathbf{x}) = \tilde{\eta}(\mathbf{x})/\sqrt{n}$ ergibt sich insgesamt

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} \propto & \exp \left\{ -\frac{n}{2} \left[\text{Sp} \log (-\nabla^2 + \hat{\tau} + i\psi_0) + \frac{3}{g} \int d^d x \psi_0(\mathbf{x}) \right] \right\} \\ & \times \int \mathcal{D}[\tilde{\eta}] \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d^d x_1 \int d^d x_2 \tilde{\eta}(\mathbf{x}_1) \left[\mathbf{K}_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) + \frac{3}{g} \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \right] \tilde{\eta}(\mathbf{x}_2) \right\} \\ & \times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[-\frac{i}{3\sqrt{n}} \text{diagram} - \frac{1}{4n} \text{diagram} + \dots \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.310)$$

Ausgehend von dieser Gleichung für die Zustandssumme kann die diagrammatische Entwicklung der freien Energie gewonnen werden. Dazu wird die Exponentialfunktion in der dritten Zeile von Gleichung (3.310) in eine Potenzreihe entwickelt und die auftretenden Terme nach dem Wickschen Theorem mit dem in der zweiten Zeile auftretenden Integralkern

$$\mathbf{K}_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) + \frac{3}{g} \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \quad (3.311)$$

kontrahiert. Der erste Korrekturterm zum Fall $n = \infty$ — also der Term der Ordnung $1/n$ — ergibt sich bereits aus der Nullten Ordnung der Entwicklung der Exponentialfunktion. Das Funktionalintegral über ψ zerfällt dann in Gauß-Integrale und kann sofort berechnet werden.

Die zu den quadratischen Termen $\propto 1/n^2$ beitragenden Diagramme sind in Abbildung 3.32 dargestellt. Diese Diagramme finden sich auch in [195]. Die gewellten Linien stehen dabei für das Operatorinverse des Integralkerns des quadratischen Terms (3.311). Die ersten beiden Diagramme erhält man durch Entwicklung der Exponentialfunktion bis zur ersten Ordnung. Sie sind die möglichen Kontraktionen des Terms vierter Ordnung in $\tilde{\eta}$. Für die letzten beiden Diagramme muss die Exponentialfunktion bereits bis zur quadratischen Ordnung entwickelt werden. Diese Diagramme stellen alle Möglichkeiten der Kontraktionen zweier kubischer Terme in $\tilde{\eta}$ dar. Auf diese Weise lässt sich eine systematische Entwicklung in $1/n$ formulieren.

4 Zusammenfassung und Diskussion

Gegenstand dieser Arbeit war die Untersuchung der Auswirkung verschiedener Randbedingungen auf den thermodynamischen Casimir-Effekt in n -Vektor-Modellen mit Filmgeometrien. Ausgangspunkt für die Analysen waren dabei stets $O(n)$ -symmetrische ϕ^4 -Kontinuumsmodelle mit und ohne symmetriebrechende externe Magnetfelder. Dabei wurde die Gültigkeit von Randbedingungen der Form

$$\partial_n \phi - \mathring{c}_j \phi = -\mathbf{h}_j, \quad j = 1, 2 \quad (4.1)$$

auf den beiden Oberflächen \mathfrak{B}_j des Films angenommen. Die Parameter \mathring{c}_j sind Oberflächenkopplungen und h_j Oberflächenfelder. Gleichung (4.1) definiert die generischen Randbedingungen für Modelle dieser Art. Im Gegensatz zu periodischen und antiperiodischen Randbedingungen sind sie experimentell relevant, dafür aber häufig deutlich schwieriger theoretisch zu behandeln. Untersuchungen zum thermodynamischen Casimir-Effekt mit diesen Randbedingungen beschränkten sich bislang fast ausschließlich auf Kombinationen der Renormierungsgruppen-Fixpunkte $c_j^* \in \{-\infty, c_{\text{sp}}, \infty\}$ und $h_j^* \in \{-\infty, 0, \infty\}$. In der vorliegenden Arbeit wurden diese Ergebnisse auf den *Crossover*-Bereich mit beliebigen Werten von $c_j \geq c_{\text{sp}}$ und $h_j \in \mathbb{R}$ erweitert. Dazu wurden verschiedene Methoden verwendet: Zur Untersuchung des Einflusses der Oberflächenkopplungen c_j auf die Casimir-Kraft am *Bulk*-kritischen Punkt bei verschwindenden Magnetfeldern in Teil 2 dieser Arbeit wurden störungstheoretische Verfahren verwendet. In Teil 3 der Arbeit wurden dann die Auswirkungen von Temperaturen abseits von $T_{c,\infty}$ und von Oberflächen-Magnetfeldern $h_j \neq 0$ im exakt handhabbaren Grenzfall $n \rightarrow \infty$ untersucht.

Die störungstheoretischen Rechnungen aus Teil 2 der Arbeit waren auf den Parameterbereich beschränkt, in welchem weder eine durch externe Felder induzierte noch eine spontane Brechung der $O(n)$ -Symmetrie auftritt. Daher wurde angenommen, dass *Bulk*- und Oberflächenfelder verschwinden, die Oberflächenkopplungen auf das Intervall $c_j \geq c_{\text{sp}}$ beschränkt sind und die Temperatur den *Bulk*-kritischen Wert $T_{c,\infty}$ hat. Die Berücksichtigung von Temperaturen oberhalb von $T_{c,\infty}$ wäre dabei problemlos möglich. Darauf wurde jedoch verzichtet, da die Ausdrücke hier deutlich unübersichtlicher wären und physikalisch keine neuen Phänomene zu erwarten sind. Ursächlich für die übrigen Einschränkungen wa-

ren die verwendeten Methoden: Die Rechnungen wurden im Rahmen der renormierungsgruppenverbesserten Störungstheorie in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen in Zweischleifennäherung durchgeführt. Von der ϵ -Entwicklung ist jedoch bekannt, dass sie nicht dazu in der Lage ist, den in der Filmgeometrie auftretenden dimensionellen *Crossover* von d -dimensionalem kritischem Verhalten in der Hochtemperaturphase zu $(d - 1)$ -dimensionalem Verhalten in der Tieftemperaturphase zu beschreiben. Die Berücksichtigung von nichtverschwindenden Magnetfeldern wäre zwar prinzipiell möglich, aber technisch äußerst aufwendig. Grund dafür ist, dass die dann auch im Bereich $T \geq T_{c,\infty}$ endlichen Ordnungsparameterprofile $\langle \phi(\mathbf{x}) \rangle > 0$ bereits in Landau-Theorie zu Kräften führen würden.

Es wurde gezeigt, dass die Casimir-Amplitude — welche bei $T_{c,\infty}$ an den Fixpunkten c_j^* den algebraischen Abfall der Casimir-Kraft auf langen Skalen beschreibt — im *Crossover*-Bereich durch eine Skalenfunktion $D(c_1, c_2)$ ersetzt werden muss. Dabei wurden die Skalenvariablen $c_j = c_j L^{\Phi/\nu}$ eingeführt. Das einfache Potenzgesetz gilt dann abseits der Fixpunkte auch am *Bulk*-kritischen Punkt nicht mehr.

In den Grenzfällen $(c_1, c_2) = (\infty, \infty)$, $(0, \infty)$ und $(\infty, 0)$ ergaben sich aus D die bekannten Casimir-Amplituden. Für kleine Werte der Skalenvariablen $c_1 = c_2 \rightarrow 0$ wiesen die erhaltenen Ergebnisse für D jedoch unphysikalische Nichtanalytizitäten auf. Diese Singularitäten konnten darauf zurückgeführt werden, dass die gewöhnliche Schleifenentwicklung am *Bulk*-kritischen Punkt immer dann zusammenbricht, wenn eine Nullmode im Spektrum auftritt. Dies ist jedoch für $c_1 = c_2 = 0$ — also für Neumann-Neumann-Randbedingungen — der Fall. Das hat zur Folge, dass die ϵ -Entwicklung der Casimir-Amplitude nicht-ganzzahlige Potenzen in ϵ aufweist. Diese Eigenschaft konnte von der gefundenen Skalenfunktion D zunächst nicht reproduziert werden. Um die Qualität der Ergebnisse für kleine c_j zu verbessern, konnte das aus der Literatur bekannte Konzept der Umordnung der Störungstheorie verwendet werden. Dabei wurde durch Ausintegration aller höheren Moden eine effektive Theorie für die niedrigste Mode k_1 konstruiert. So wurden Ergebnisse erhalten, welche für kleine c_j analytisch waren und die gewünschte Entwicklung mit halbzahligen Potenzen von ϵ aufwiesen.

Anhand dieser Ergebnisse für die Skalenfunktion D wurde explizit gezeigt, dass für bestimmte Wahlen der Oberflächenkopplungen c_1 und c_2 bei der Variation der Filmdicke L *Crossover* zwischen attraktivem und repulsivem Verhalten auftreten können.

Die in Teil 2 dieser Arbeit verwendeten Methoden bleiben leider auf die ungeordnete Phase beschränkt. Eine Erweiterung der Rechnungen auf tiefe Temperaturen scheint zum jetzigen Zeitpunkt unwahrscheinlich. Zudem ist die renormierungsgruppenverbesserte Störungstheorie technisch äußerst aufwendig, sodass auch fraglich ist, ob die Erweiterung auf höhere Ordnungen der Entwicklung in ϵ möglich ist. Die Ergebnisse für

die Skalenfunktion D haben also in mancher Hinsicht nur einen qualitativen Charakter. Sie bestätigen jedoch explizit die von der Renormierungsgruppentheorie vorhergesagte Skalenform der freien Energie. Zudem liefern sie Informationen, die zur Auswertung von Monte-Carlo-Simulationen äußerst hilfreich sein können, da sie die bei einer Abweichung der Oberflächenkopplungen von ihren Fixpunktwerten $c_j \neq c_j^*$ auftretenden Korrekturen beschreiben können.

Die physikalisch interessanten Effekte — wie das Auftreten eines Extremums der Casimir-Kraft in suprafluidem Helium — kommen in einem Temperaturbereich zum Vorschein, welcher den störungstheoretischen Methoden verschlossen bleibt. Um einen Einblick in den Bereich unterhalb der *Bulk*-kritischen Temperatur zu erhalten, wurde in Teil 3 dieser Arbeit der Limes $n \rightarrow \infty$ des dreidimensionalen n -Vektor-Modells analysiert. Von diesem Grenzwert ist bekannt, dass er exakt für alle Temperaturen handhabbar ist und hier auch der Einfluss symmetriebrechender Magnetfelder untersucht werden kann. Das Auftreten einer spontanen Symmetriebrechung ist dabei jedoch in drei Dimensionen für alle Temperaturen $T > 0$ aufgrund des Mermin-Wagner-Theorems ausgeschlossen. Aus demselben Grund existiert hier auch der spezielle Oberflächenübergang mit kritischer Verstärkung der Oberflächenkopplung $c = c_{\text{sp}} > -\infty$ nicht. Es zeigte sich, dass dieses Modell hervorragend dazu geeignet ist, den Verlauf der Skalenfunktion des für die Messungen an suprafluidem Helium relevanten dreidimensionalen XY-Modells mit verschwindenden Magnetfeldern qualitativ korrekt zu beschreiben.

Es wurde eine Methode präsentiert, mit welcher die Skalenfunktionen des *Large- n* -Modells numerisch auf viele Stellen genau bestimmt werden können: Dabei tritt das Potential $V(z)$ einer Schrödinger-Gleichung auf, welches selbstkonsistent so bestimmt werden muss, dass die freie Energie des Systems — abhängig von dem Potential und den Eigenwerten des Hamilton-Operators — extremal wird. Zur numerischen Lösung dieser selbstkonsistenten Gleichungen wurde eine geeignete Diskretisierung eingeführt. Aus der Lösung dieser Gleichungen konnte die Casimir-Amplitude des Modells mit offenen Rändern mit einer erstaunlichen Genauigkeit bestimmt werden. Zudem wurden Ergebnisse für die Skalenfunktionen des *Finite-Size*-Anteils der freien Energie sowie der Kraft für alle Temperaturen präsentiert. Diese Resultate verbessern die bekannten Rechnungen für das *Large- n* -Modell mit periodischen Randbedingungen hinsichtlich ihrer Relevanz für Experimente in suprafluidem Helium deutlich: Während die Skalenfunktionen für periodische Randbedingungen qualitativ von den experimentell gemessenen abweichen — wesentlicher Unterschied ist das fehlende Extremum unterhalb der *Bulk*-kritischen Temperatur —, können die hier gefundenen Ergebnisse für offene Ränder alle charakteristischen Eigenschaften der Skalenfunktionen qualitativ reproduzieren.

Die bis dahin präsentierten Untersuchungen beschränkten sich auf Systeme mit nicht explizit gebrochener $O(n)$ -Symmetrie. Für die Interpretation der Messungen an suprafluidem Helium ist diese Beschränkung sinnvoll, da es hier keine symmetriebrechenden Felder gibt. Für die andere Klasse von Systemen, in denen der Casimir-Effekt experimentell beobachtet wurde — binäre Flüssigkeitsgemische in der Nähe des Entmischungsübergangs —, ist dies jedoch anders. Hier sind generisch Oberflächenfelder vorhanden, welche die Eigenschaften der Oberflächen beschreiben, eine Spezies des Gemischs zu bevorzugen. Zur Untersuchung des Einflusses dieser Oberflächenfelder h_j auf die Casimir-Kraft mussten die selbstkonsistenten Gleichungen modifiziert werden. So konnte die bis dahin immer erhaltene $O(n)$ -Symmetrie explizit gebrochen werden. Zunächst wurden die Auswirkungen von *Bulk*-Magnetfeldern auf Systeme mit offenen Rändern untersucht. Dann wurden die verschiedenen Kombinationen der Fixpunktwerte h_j^* der Oberflächenfelder und der *Crossover* zwischen diesen Fixpunkten analysiert. Dazu wurden wieder SkalenvARIABLEN $h_j = h_j L^{\Delta_1/\nu}$ eingeführt. Abhängig von diesen Variablen ergab sich ein reichhaltiges Verhalten der Casimir-Kraft. Insbesondere traten wieder *Crossover* der Kraft zwischen Attraktivität und Repulsivität für bestimmte Wahlen der Oberflächenfelder h_1 und h_2 bei variabler Filmdicke L auf.

Der experimentelle Nachweis des *Crossovers* der Kraft zwischen attraktivem und repulsivem Verhalten in Systemen mit symmetrieerhaltenden Randbedingungen scheint äußerst unwahrscheinlich, da nicht bekannt ist, wie die Oberflächenkopplungen c_j zum Beispiel bei Experimenten in suprafluidem Helium verändert werden können. Für binäre Flüssigkeitsgemische sollten diese *Crossover* jedoch messbar sein: Hier ist es durch eine geeignete chemische Behandlung der beiden Oberflächen möglich, die Oberflächenfelder h_j kontinuierlich zu verändern [71, 196]. Stellt man h_1 und h_2 dann so ein, dass das Verhältnis $|h_1/h_2|$ stark genug von Eins abweicht, so sollten nur für kleine und große Abstände L attraktive Kräfte wirken. Dazwischen sollte es jedoch einen Bereich geben, in dem die Casimir-Kraft repulsiv ist. Der experimentelle Nachweis dieses Effektes wäre eine erfreuliche Bestätigung der in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse.

A Anhang

A.1 Berechnung der Summen

Zur Berechnung der Ein- und Zweischleifenterme des *Finite-Size*-Anteils der freien Energie werden Summen der Form

$$S_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}([f], a; b) = \sum_{m=1}^{\infty} f(\kappa_m) (\kappa_m^2 + b^2)^a \quad (\text{A.1})$$

für verschiedene meromorphe Funktionen $f(\kappa)$ benötigt. Dabei ist $b^2 = \mathring{\tau}L^2$ und der Parameter a ist von der Dimensionalität des Systems abhängig. Damit erfordert die dimensionelle Regularisierung eine analytische Fortsetzung in a . Die κ_m sind die positiven Nullstellen von Gleichung (2.16), $R_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa_m) = 0$. Die Summe (A.1) definiert Verallgemeinerungen von Epstein-Hurwitz-Zeta Funktionen (siehe zum Beispiel [197]).

Es soll nun gezeigt werden, wie Summen der Form (A.1) berechnet werden können. Die Herleitung wendet die in Anhang C von [12] für die dort untersuchten Spezialfälle der Randbedingungen verwendete Methode auf den Fall von Robin-Randbedingungen an. Sie besteht aus zwei wesentlichen Schritten: Zunächst wird mit Hilfe von komplexen Integrationsmethoden eine Integraldarstellung der Summe hergeleitet und anschließend, durch eine geeignete analytische Fortsetzung des Integrals, die Summe regularisiert. In [106] wurde eine ähnliche Formel auf eine etwas andere Weise hergeleitet. Dazu wurde die in [198, 199] vorgeschlagene Verallgemeinerung der Abel-Plana-Formel angewendet.¹

Im Folgenden sei wieder angenommen, dass die Oberflächenkopplungen \mathring{c}_j so gewählt sind, dass keine Nullmode und keine imaginären Moden im Spektrum auftreten. Es gelte also wieder $\mathring{c}_j \geq 0$ und $\mathring{c}_1 + \mathring{c}_2 > 0$. Die Eigenwerte κ_m , $m = 1, 2, \dots, \infty$ sind dann positiv und nicht entartet. Aus dem Residuensatz folgt daher, dass die Funktion $\partial_\kappa \log R_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa)$ einfache Pole in der komplexen κ -Ebene mit Residuen von eins bei jeder Mode $\kappa = \kappa_m$ hat. Unter der Bedingung, dass $f(\kappa) (\kappa^2 + b^2)^a$ auf der reellen Achse regulär ist, lässt sich

¹Die Abel-Plana-Formel geht auf den Norweger N.H. Abel und den Italiener G.A.A. Plana zurück, die diese Summationsformel unabhängig voneinander entdeckten. Sie ist eng mit der Euler-Maclaurin-Formel verwandt, jedoch deutlich weniger bekannt (siehe zum Beispiel [200, Kapitel 13.13], [201, Kapitel 8] und [202–204] beziehungsweise [54] zur Anwendung auf den Casimir-Effekt).

jeder Summand in (A.1) schreiben als

$$f(\kappa_m) (\kappa_m^2 + b^2)^a = \operatorname{Res}_{\kappa=\kappa_m} [f(\kappa)(\kappa^2 + b^2)^a \Upsilon_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa)]. \quad (\text{A.2})$$

Die Funktion $\Upsilon_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa) := \partial_\kappa \log R_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa)$ ergibt sich aus der Zerlegung

$$R'_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa_m) = 2 \frac{N_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa_m)}{\lambda_m} = N_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa_m) g_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa_m), \quad (\text{A.3})$$

mit

$$N_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa) \equiv (\mathcal{C}_1 \mathcal{C}_2 - \kappa^2) \cos \kappa - (\mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2) \kappa \sin \kappa \quad (\text{A.4})$$

sowie

$$g_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa) \equiv 1 + \frac{\mathcal{C}_1}{\mathcal{C}_1 + \kappa^2} + \frac{\mathcal{C}_2}{\mathcal{C}_2 + \kappa^2}. \quad (\text{A.5})$$

Daraus folgt

$$\Upsilon_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa) = \frac{N_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa) g_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa)}{R_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa)}. \quad (\text{A.6})$$

Jeder Term der Summe kann damit als komplexes Linienintegral ausgedrückt werden:

$$f(\kappa_m) (\kappa_m^2 + b^2)^a = \frac{1}{2\pi i} \oint d\kappa f(\kappa) (\kappa^2 + b^2)^a \Upsilon_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa). \quad (\text{A.7})$$

Der Integrationsweg muss dabei im mathematisch positiven Sinn einmal um das Residuum bei $\kappa = \kappa_m$ verlaufen und darf keine weiteren Singularitäten einschließen. Die Funktion $f(\kappa)$ verhalte sich wie $\sim \kappa^\mu$ für $\kappa \rightarrow \infty$. Dann konvergiert die Summe für $\mu + 2a < -1$ und der Integrand des Linienintegrals fällt für $\kappa \rightarrow \pm\infty \pm 0$ schnell genug auf Null ab, sodass die Vereinigung aller Linienintegrale in ein Linienintegral entlang nur einer Kontur verformt werden kann. Da die Funktionen $\Upsilon_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa)$ und $(\kappa^2 + b^2)^a$ gerade Funktionen in κ sind, kann — unter der Annahme, dass dies auch für die Funktionen $g(\kappa)$ gelte — wegen $\kappa_{-|m|} = -\kappa_{|m|}$ die Summation über alle $m \in \mathbb{N}^+$ auf alle $m \in \mathbb{Z}^{\neq 0}$ ausgeweitet und dies mit einem zusätzlichen Faktor 1/2 kompensiert werden. Die sich dadurch ergebende Kontur umschließt also alle Pole bei κ_m mit $m \in \mathbb{Z}^{\neq 0}$ und ist in Abbildung A.1 grün dargestellt. Aufgrund des Faktors $(\kappa^2 + b^2)^a$ hat der Integrand Verzweigungsschnitte auf der imaginären Achse von ib nach $i\infty$ und von $-ib$ nach $-i\infty$ (magenta). Zudem erzeugt der Faktor $g_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}$ einfache Polterme bei $\pm i\mathcal{C}_1$ und $\pm i\mathcal{C}_2$ (gelbe Quadrate). Die Integrationskontur γ_1 kann durch Addieren und Subtrahieren von Linienintegralen entlang der in Abbildung A.1 gezeigten Konturen γ_2 (blau) und γ_3 (rot) geschlossen werden. Die Vereinigung $\gamma_1 \cup \gamma_2 \cup \gamma_3$ umschließt dann nur den einen Polterm bei $\kappa = 0$ und verläuft in einem Bereich, in dem der Integrand analytisch ist. Das zugehörige Linienintegral er-

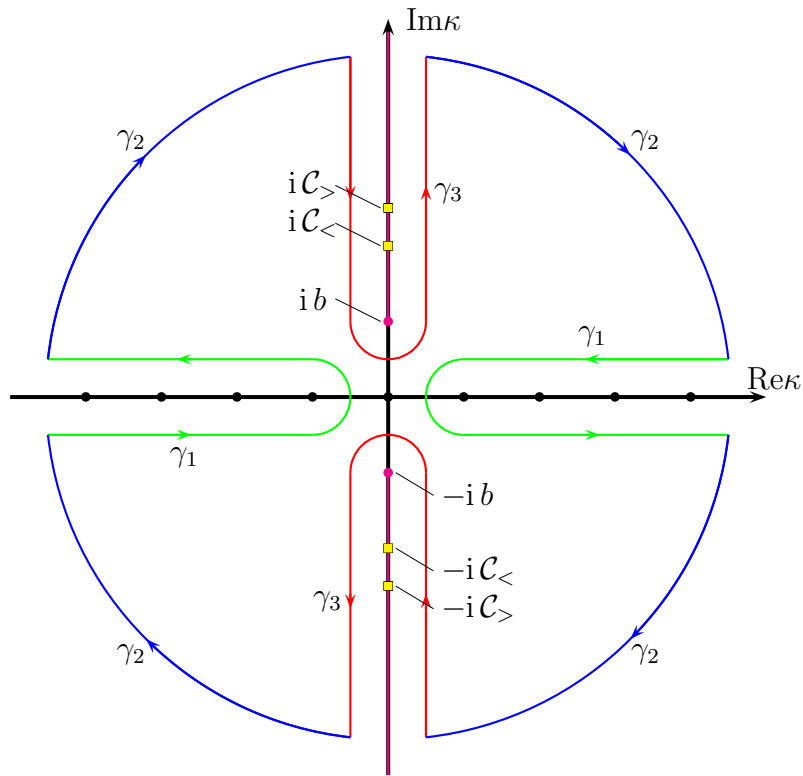


Abbildung A.1: Analytische Struktur und Integrationswege in der komplexen κ -Ebene.

gibt also $-2\pi i$ mal das Residuum bei $\kappa = 0$. Zudem verschwindet das Integral entlang der Kreisbögen γ_2 , wenn der Radius gegen unendlich geht. Damit lässt sich das Integral entlang γ_1 in ein Integral entlang γ_3 umformen. Es ergibt sich der Ausdruck

$$\begin{aligned}
 S_{c_1, c_2}([f], a; b) &= \left(-\frac{1}{2} \operatorname{Res}_{\kappa=0} - \frac{1}{4\pi i} \int_{\gamma_3} d\kappa \right) f(\kappa) (\kappa^2 + b^2)^a \Upsilon_{c_1, c_2}(\kappa) \\
 &= -\frac{f(0)}{2} b^{2a} - \frac{1}{4\pi i} \int_{\gamma_3} d\kappa f(\kappa) (\kappa^2 + b^2)^a \Upsilon_{c_1, c_2}(\kappa). \quad (\text{A.8})
 \end{aligned}$$

Der Integrationsweg γ_3 kann infinitesimal nah an die imaginäre Achse geschoben werden. Dabei müssen die Pole des Integranden bei $\pm iC_j$ mit Halbkreisen der Radien $\delta \rightarrow 0$ umgangen werden. Die Abschnitte mit $\operatorname{Im} \kappa > 0$ und $\operatorname{Im} \kappa < 0$ geben identische Beiträge. Mit

$$\lim_{\substack{\operatorname{Re} \kappa \rightarrow 0^\pm \\ \operatorname{Im} \kappa > 0}} (\kappa^2 + b^2)^a = [(\operatorname{Im} \kappa)^2 - b^2]^a e^{\pm i\pi a} \quad (\text{A.9})$$

lässt sich das komplexe Linienintegral in Gleichung (A.8) in ein gewöhnliches Integral umschreiben,

$$\begin{aligned}
 S_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}([f], a; b) &= -\frac{f(0)}{2} b^{2a} - 2 \sin(\pi a) \mathcal{P} \int_b^\infty \frac{dt}{\pi} f(it) (t^2 - b^2)^a \Upsilon_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(it) \\
 &\quad - 4\pi i \sum_{j=1}^2 f(i\mathcal{C}_j) (\mathcal{C}_j^2 - b^2)^a \cos(a\pi) \operatorname{Res}_{\kappa=i\mathcal{C}_j} \Upsilon_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa). \quad (\text{A.10})
 \end{aligned}$$

Dabei bedeutet $\mathcal{P} \int_b^\infty dt$ den Hauptwert $\lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left(\int_b^{\mathcal{C}_< - \delta} + \int_{\mathcal{C}_< + \delta}^{\mathcal{C}_> - \delta} + \int_{\mathcal{C}_> + \delta}^\infty \right) dt$, wobei $\mathcal{C}_< = \min(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2)$ und $\mathcal{C}_> = \max(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2)$. Die Terme in der zweiten Zeile von Gleichung (A.10) kommen von den die Residuen auf der imaginären Achse umschließenden Halbkreisen.

Aufgrund des Verhaltens des Integranden in Gleichung (A.10) an der unteren Integrationsgrenze muss für die Konvergenz des Integrals $a > -1$ gelten, da sonst IR-Divergenzen auftreten. Aus dem Verhalten an der oberen Integrationsgrenze folgt die ursprüngliche Bedingung $\mu + 2a < -1$ für die Konvergenz der Summe und zur Vermeidung von UV-Divergenzen. Zur analytischen Fortsetzung zu größeren (positiven) Werten von a wird der Grenzwert

$$\lim_{\kappa \rightarrow \pm\infty} \frac{N_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa)}{R_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa)} = \mp i \quad (\text{A.11})$$

im Integranden abgespalten. Zudem ergibt sich aus der Aufspaltung

$$\begin{aligned}
 &\Upsilon_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa) \\
 &= \mp 2i \left[e^{\mp 2i\kappa} \frac{\mathcal{C}_1 \mp i\kappa \mathcal{C}_2 \mp i\kappa}{\mathcal{C}_1 \pm i\kappa \mathcal{C}_2 \pm i\kappa} - 1 \right]^{-1} g_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa) \mp i g_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa), \quad \text{für } \operatorname{Im} \kappa \gtrless 0, \quad (\text{A.12})
 \end{aligned}$$

dass die Residuen bei $\kappa = i\mathcal{C}_j$ des ersten Terms in (A.12) verschwinden und die in der zweiten Zeile von Gleichung (A.10) auftretenden Residuen somit die Gleichung

$$\operatorname{Res}_{\kappa=i\mathcal{C}_j} \Upsilon_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa) = i \operatorname{Res}_{\kappa=i\mathcal{C}_j} g_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa) \quad (\text{A.13})$$

erfüllen. Damit können die Residuenbeiträge mit dem vom Hauptwertintegral abgespaltenen Teil zusammengefasst und durch ein Linienintegral entlang der ursprünglichen Kontur γ_1 ausgedrückt werden. Es ergibt sich das Integral

$$\begin{aligned}
 I_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}([f], a; b) &= \frac{1}{4\pi} \int_{\gamma_1} d\kappa \operatorname{sign}(\operatorname{Im} \kappa) f(\kappa) g_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa) (\kappa^2 + b^2)^a \\
 &= \int_0^\infty \frac{d\kappa}{\pi} f(\kappa) g_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa) (\kappa^2 + b^2)^a, \quad (\text{A.14})
 \end{aligned}$$

wobei mit $\text{sign}(x)$ die Signumfunktion bezeichnet sei. Aus Gleichung (A.10) wird dann

$$S_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}([f], a; b) = -\frac{f(0)}{2}b^{2a} + I_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}([f], a; b) - 2 \sin(\pi a) \int_b^\infty \frac{dt}{\pi} \frac{f(it)g_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(it)(t^2 - b^2)^a}{\frac{t+\mathcal{C}_1}{t-\mathcal{C}_1} \frac{t+\mathcal{C}_2}{t-\mathcal{C}_2} e^{2t} - 1}. \quad (\text{A.15})$$

Das Integral in der zweiten Zeile von Gleichung (A.15) konvergiert für $a > -1$. Somit liefert die analytische Fortsetzung des Integrals $I_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}([f], a; b)$ die gesuchte analytische Fortsetzung der Summe $S_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}([f], a; b)$ für $\mu + 2a > -1$.

Für die Berechnung des Einschleifenterms der freien Energie wird die analytische Fortsetzung der Summe für den Fall $f(\kappa) = 1$ benötigt. Das Integral $I_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}([1], a; b)$ kann dann analytisch berechnet werden. Es konvergiert für $a < -1/2$ und liefert

$$I_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}([1], a; b) = b^{1+2a} \frac{\Gamma(-a - 1/2)}{2\sqrt{\pi}\Gamma(-a)} + \frac{1}{2 \cos(\pi a)} \sum_{j=1}^2 \left[(\mathcal{C}_j^2 - b^2)^a - \frac{b^{1+2a}\sqrt{\pi}}{\Gamma(-a)\mathcal{C}_j} {}_2\tilde{F}_1\left(\frac{1}{2}, 1; a + \frac{3}{2}; \frac{b^2}{\mathcal{C}_j^2}\right) \right], \quad (\text{A.16})$$

wobei mit ${}_2\tilde{F}_1$ die regularisierte hypergeometrische Funktion bezeichnet sei. Sie hängt mit der gewöhnlichen Gaußschen hypergeometrischen Funktion (siehe zum Beispiel [205, Kapitel 15]) gemäß

$${}_2\tilde{F}_1(\alpha, \beta; \gamma; z) = {}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; z)/\Gamma(\gamma). \quad (\text{A.17})$$

zusammen. Die rechte Seite von Gleichung (A.16) liefert die analytische Fortsetzung von $I_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}([1], a; b)$ und somit auch die von $S_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}([1], a; b)$. Das Integral in der zweiten Zeile von (A.15) kann mit Hilfe einer partiellen Integration vereinfacht werden. Am kritischen Punkt wird die Summe für $b = 0$ benötigt. Das Ergebnis lautet

$$\sum_{m=1}^{\infty} \kappa_m^{2a} = \frac{\mathcal{C}_1^{2a} + \mathcal{C}_2^{2a}}{2 \cos(\pi a)} + \frac{2a}{\pi} \sin(\pi a) \int_0^\infty dt t^{2a-1} \log \left(1 - \frac{t - \mathcal{C}_1}{t + \mathcal{C}_1} \frac{t - \mathcal{C}_2}{t + \mathcal{C}_2} e^{-2t} \right), \quad (\text{A.18})$$

und stellt offenbar eine Verallgemeinerung der Riemannschen Zetafunktion dar.

Zwei verschiedene Summen $S_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}([f], a; 0)$ werden zur Bestimmung des Zweischleifenterms benötigt. Zum einen die Summe mit

$$f(\kappa) = f_1(\kappa) \equiv \lambda(\kappa) \quad (\text{A.19})$$

und zum anderen

$$f(\kappa) = f_2(\kappa) \equiv \lambda(\kappa) \frac{\kappa^{2\sigma}}{(\kappa^2 + \mathcal{C}_1^2)(\kappa^2 + \mathcal{C}_2^2)}. \quad (\text{A.20})$$

Die Funktion $\lambda(\kappa)$ ist die Normierungskonstante der Eigenfunktionen. Es gilt also $\lambda(\kappa_m) \equiv \lambda_m$.² Aus Gleichung (A.15) kann mit der Beziehung $\lambda(\kappa) = 2/g_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa)$ sofort die analytische Fortsetzung der ersten benötigten Summe bestimmt werden. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} S_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}([f_1], a; b) &= \sum_{m=1}^{\infty} \lambda_m (\kappa_m^2 + b^2)^a \\ &= -\frac{b^{2a}}{1 + \mathcal{C}_1^{-1} + \mathcal{C}_2^{-1}} - \frac{\Gamma(-a - \frac{1}{2})}{\sqrt{\pi}\Gamma(-a)} b^{1+2a} \\ &\quad - 4 \sin(\pi a) \int_b^{\infty} \frac{dt}{\pi} (t^2 - b^2)^a \left(\frac{t + \mathcal{C}_1}{t - \mathcal{C}_1} \frac{t + \mathcal{C}_2}{t - \mathcal{C}_2} e^{2t} - 1 \right)^{-1}, \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

was sich am kritischen Punkt $b = 0$ in der Nähe der oberen kritischen Dimension $a = d^* - 3 = 1$ zu

$$\sum_{m=1}^{\infty} \lambda_m \kappa_m^{2a} = -4 \sin(\pi a) \int_0^{\infty} \frac{dt}{\pi} t^{2a} \left(\frac{t + \mathcal{C}_1}{t - \mathcal{C}_1} \frac{t + \mathcal{C}_2}{t - \mathcal{C}_2} e^{2t} - 1 \right)^{-1} \quad (\text{A.22})$$

vereinfachen lässt. Ebenso lässt sich die verbleibende Summe $S_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}([f_2], a; 0)$ bestimmen. Man erhält

$$\sum_{m=1}^{\infty} \lambda_m \frac{\kappa_m^{2(\sigma+a)}}{(\kappa^2 + \mathcal{C}_1^2)(\kappa^2 + \mathcal{C}_2^2)} = 2X_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{2a+3, \sigma} + 2Y_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{2a+3, \sigma}, \quad (\text{A.23})$$

mit den in den Gleichungen (2.62) und (2.63) definierten Funktionen $X_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{2a+3, \sigma}$ und $Y_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}^{2a+3, \sigma}$.

A.2 Einfache Berechnung der Skalenfunktionen für periodische und antiperiodische Randbedingungen

Die in dieser Arbeit untersuchte Diskretisierung des *Large-n*-Modells mit offenen Randbedingungen, bei der nur die senkrechte Richtung diskretisiert wird und die anderen Richtungen kontinuierlich bleiben, eignet sich hervorragend, um auch periodische oder antiperiodische Randbedingungen zu untersuchen und die aus der Literatur [28, 29, 144, 180] bekannten Ergebnisse für diese Randbedingungen auf einfache Art zu reproduzieren. In diesem Anhang sollen die Skalenfunktion der freien Energie für periodische und antiperi-

²Aufgrund des Auftretens der Normierungskonstante in den Funktionen f_1 und f_2 haben diese vier einfache Pole auf der imaginären Achse. Diese müssen jedoch nicht beachtet werden, da sie in Gleichung (A.10) durch die Funktion $g_{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2}(\kappa)$ aufgehoben werden.

odische Randbedingungen in drei Dimensionen hergeleitet werden. Ausgangsbasis dafür ist die Selbstkonsistenzgleichung für das Maximum der freien Energie (Gleichung (3.139)) im Limes $g \rightarrow \infty$

$$t = \langle z | \log \mathbf{H} | z \rangle. \quad (3.139)$$

Aus dieser ergibt sich durch Ausnutzen der Translationsinvarianz in z -Richtung die einfachere Bestimmungsgleichung für das konstante Potential V

$$Lt = x = \log \det \mathbf{H}. \quad (A.24)$$

Die Determinante kann nach dem Laplaceschen Entwicklungssatz berechnet und durch die 2×2 -Matrix

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 2 + V & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (A.25)$$

ausgedrückt werden:

$$\det(\mathbf{H}) = \text{Sp}(\mathbf{M}^L) \mp 2. \quad (A.26)$$

Das obere Vorzeichen bezeichnet im Folgenden das System mit periodischen, das untere das System mit antiperiodischen Randbedingungen. Die Spur in Gleichung (A.26) kann über die Eigenwerte der Matrix \mathbf{M} berechnet werden und ergibt

$$\det(\mathbf{H}(V)) = \left[1 + \frac{1}{2} \left(V + \sqrt{V(V+4)} \right) \right]^L + \left[1 + \frac{1}{2} \left(V - \sqrt{V(V+4)} \right) \right]^L \mp 2, \quad (A.27)$$

was zu

$$\det(\mathbf{H}(V)) = 2 \cosh \left[2L \operatorname{arsinh} \left(\frac{\sqrt{V}}{2} \right) \right] \mp 2 \quad (A.28)$$

vereinfacht werden kann.

Um das Verhalten des Potentials im thermodynamischen Limes zu erhalten, wird es gemäß $v = VL^2$ mit L^2 reskaliert. Einsetzen in die Determinante ergibt den Grenzwert

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \det(\mathbf{H}(vL^{-2})) = 2 \cosh(\sqrt{v}) \mp 2. \quad (A.29)$$

Aus der Bedingung $\log \det(\mathbf{H}) \stackrel{!}{=} x$ erhält man also die Potentiale

$$\hat{v}(x) = \operatorname{arcosh}^2 \left(\frac{e^x \pm 2}{2} \right), \quad (A.30)$$

beziehungsweise

$$\hat{v}_p(x) = 4 \operatorname{arsinh}^2 \left(\frac{e^{x/2}}{2} \right) \quad (\text{A.31})$$

$$\hat{v}_{ap}(x) = 4 \operatorname{arcosh}^2 \left(\frac{e^{x/2}}{2} \right). \quad (\text{A.32})$$

Die kritischen Werte ergeben sich zu

$$\hat{v}_p(0) = \log^2 \left(\frac{\sqrt{5} + 3}{2} \right) \quad (\text{A.33})$$

$$\hat{v}_{ap}(0) = -\frac{4}{9}\pi^2. \quad (\text{A.34})$$

Die Skalenfunktion der freien Energie erhält man daraus durch Integration der Sattelpunktgleichung. Mit der passenden Wahl der Integrationskonstanten ergibt sich die Gleichung

$$\Theta_\varphi(x) = \Delta_{C,G}^{(\varphi)} - \frac{x^3}{24\pi}\theta(x) + \frac{x}{8\pi}\hat{v}_\varphi(x) - \frac{1}{8\pi} \int_0^{\hat{v}_\varphi(x)} dv \log [2 \cosh \sqrt{v} \mp 2], \quad (\text{A.35})$$

wobei $\theta(x)$ die Heavisidesche Sprungfunktion bezeichnet und vom *Bulk*-Term herrührt und $\Delta_{C,G}^{(\varphi)}$ die Casimir-Amplitude des jeweiligen Gaußschen Modells ($V = 0$)

$$\Delta_{C,G}^{(\text{per})} = -\frac{\zeta(3)}{2\pi} \quad \text{und} \quad \Delta_{C,G}^{(\text{aper})} = \frac{3\zeta(3)}{8\pi} \quad (\text{A.36})$$

ist. Das Integral in Gleichung (A.35) kann sowohl für periodische als auch für antiperiodische Randbedingungen analytisch berechnet werden und ergibt die bekannten Ergebnisse der Skalenfunktionen [28, 29, 144, 180].³ Insbesondere ergeben sich für die Amplituden die Werte

$$\Delta_C^{(\text{per})} = -\frac{2\zeta(3)}{5\pi} \quad \text{und} \quad \Delta_C^{(\text{aper})} = \frac{\operatorname{Cl}_2(\pi/3)}{3} - \frac{\zeta(3)}{6\pi}, \quad (\text{A.37})$$

wobei mit $\operatorname{Cl}_2(\theta)$ die Clausen-Funktion bezeichnet wird [206].

Deutlich einfacher sind die Formeln für die Ableitungen $\Theta'(x)$ der Skalenfunktionen nach der Skalenvariablen. Ableiten von Gleichung (A.35) ergibt

$$\Theta'_\varphi(x) = -\frac{x^2}{8\pi}\theta(x) + \frac{1}{8\pi}\hat{v}_\varphi. \quad (\text{A.38})$$

³In den angegebenen Referenzen sind abweichende Definitionen der Skalenvariablen verwendet worden. Für x_t aus [180] gilt zum Beispiel $x_t = x/(2\pi)$.

A.3 Amplitude für ein einfaches Modellpotential

Eine analytische Berechnung der Casimir-Amplitude im Limes $n \rightarrow \infty$ zerfällt in zwei wesentliche Schritte: Zuerst muss die Selbstkonsistenzgleichung gelöst und somit das Potential bestimmt werden, dann muss die zu diesem Potential gehörende freie Energie ermittelt werden. Es ist jedoch nicht gelungen, das Potential analytisch zu berechnen. Es ist aber aus der exakten Lösung des halbumendlichen kontinuierlichen Modells [142, 143] und der Auswertung der numerischen Daten des diskreten Modells bekannt, dass das Potential sich in der Nähe der Oberflächen wie

$$-\frac{1}{4z^2} + c + \dots \quad (\text{A.39})$$

verhalten muss. Zudem folgt aus der Symmetrie des Systems, dass $V(z)$ spiegelsymmetrisch ist: $V(z) = V(L - z)$.

Es soll nun der erste Lösungsschritt übersprungen werden und statt des exakten Potentials eine Näherungsansatz mit den genannten Eigenschaften gemacht werden. Daraus wird dann die zugehörige Casimir-Amplitude bestimmt.

Eine einfache Wahl für ein solches Modellpotential ist

$$V(\zeta) = -\frac{1}{4\zeta^2}\theta\left(\frac{1}{2} - \zeta\right) - \frac{1}{4(\zeta - 1)^2}\theta\left(\zeta - \frac{1}{2}\right). \quad (\text{A.40})$$

Die freie Energie wird daraus gemäß

$$f_L(t=0) = \frac{1}{2} \text{Sp} \log(-\nabla^2 + V(z/L)) \quad (\text{A.41})$$

berechnet. Hier sei das Modell als in allen Richtungen kontinuierlich angenommen. Im Impulsraum ergibt sich dann

$$f_L(t=0) = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{p}}^{(d-1)} \sum_{n=1}^{\infty} \log(\mathbf{p}^2 + w_n^2/L^2), \quad (\text{A.42})$$

wobei die Moden w_n die Eigenwerte der Schrödinger-Gleichung

$$[-\partial_\zeta^2 + V(\zeta)] \varphi_n(\zeta) = w_n^2 \varphi_n(\zeta) \quad (\text{A.43})$$

mit Dirichlet-Randbedingungen bei $\zeta = 0$ und $\zeta = 1$ sind. Die Lösungen der Differentialgleichung (A.43) können durch Linearkombinationen der Funktionen $\sqrt{\zeta}J_0(w\zeta)$ und $\sqrt{\zeta}Y_0(w\zeta)$ ausgedrückt werden, wobei $J_\nu(x)$ und $Y_\nu(x)$ Bessel-Funktionen der ersten be-

ziehungsweise zweiten Art sind. Die Eigenfunktionen lauten also (bis auf die Normierung)

$$\varphi_{1,n}(\zeta) = \sqrt{\zeta} J_0(w_{1,n}\zeta)\theta(1/2 - \zeta) - (-1)^n \sqrt{(1-\zeta)} J_0[w_{1,n}(1-\zeta)]\theta(\zeta - 1/2) \quad (\text{A.44a})$$

sowie

$$\varphi_{2,n}(\zeta) = \sqrt{\zeta} Y_0(w_{2,n}\zeta)\theta(1/2 - \zeta) - (-1)^n \sqrt{(1-\zeta)} Y_0[w_{2,n}(1-\zeta)]\theta(\zeta - 1/2), \quad (\text{A.44b})$$

wobei sich die Moden $w_{i,n}$ aus der Forderung ergeben, dass die Eigenfunktionen und deren Ableitungen bei $\zeta = 1/2$ stetig sind:

$$\sqrt{\zeta} J_0(w_{1,n}\zeta) \Big|_{\zeta=1/2} \stackrel{!}{=} 0 \quad \text{oder} \quad \frac{d}{d\zeta} \left[\sqrt{\zeta} J_0(w_{1,n}\zeta) \right] \Big|_{\zeta=1/2} \stackrel{!}{=} 0 \quad (\text{A.45a})$$

sowie

$$\sqrt{\zeta} J_0(w_{2,n}\zeta) \Big|_{\zeta=1/2} \stackrel{!}{=} 0 \quad \text{oder} \quad \frac{d}{d\zeta} \left[\sqrt{\zeta} J_0(w_{2,n}\zeta) \right] \Big|_{\zeta=1/2} \stackrel{!}{=} 0. \quad (\text{A.45b})$$

Die in den Gleichungen (A.44) definierten Funktionen sind also Lösungen der Schrödingergleichung (A.43). Aufgrund der Singularitäten des Potentials ist hier eine Besonderheit zu beachten [207]. Bereits die Funktionen $\varphi_{1,n}(\zeta)$ bilden auf dem Intervall $\zeta \in [0, 1]$ ein vollständiges Orthogonalsystem [208, 209]. Das durch (A.44) definierte Eigensystem ist somit über-vollständig. Zudem erfüllen die Funktionen $\varphi_{2,n}(\zeta)$ zwar Dirichlet-Randbedingungen, haben aber nicht das gewünschte asymptotische Verhalten in der Nähe der Oberflächen $\varphi_n(\zeta) \sim \sqrt{\zeta}$, sondern vielmehr

$$\varphi_{2,n}(\zeta) = \frac{2}{\pi} \sqrt{\zeta} [\gamma + \log(w_{2,n}\zeta/2)] + O(\zeta^{3/2}). \quad (\text{A.46})$$

Daher muss man sich bei der Berechnung der Modensumme in Gleichung (A.42) auf die durch (A.45a) definierten Eigenwerte beschränken. Im Folgenden wird deshalb wieder $w_{1,n} = w_n$ geschrieben. Gleichung (A.45a) ist somit äquivalent zu

$$J_0\left(\frac{w_n}{2}\right) \left[J_0\left(\frac{w_n}{2}\right) - \frac{w_n}{2} J_1\left(\frac{w_n}{2}\right) \right] \stackrel{!}{=} 0 \quad (\text{A.47})$$

und die Berechnung der Impulsintegrale aus Gleichung (A.42) in dimensioneller Regularisierung ergibt

$$f_L(t=0) = -L^{-(d-1)} \frac{A_{d-1}}{d-1} \sum_{n=1}^{\infty} w_n^{d-1}. \quad (\text{A.48})$$

Zur weiteren Auswertung wird also die analytische Fortsetzung der mit den Nullstellen der Gleichung (A.47) assoziierten Zetafunktion benötigt. Diese kann wieder durch Integration in der komplexen Ebene gewonnen und durch die in Gleichung (4.14) aus [210] definierte Funktion⁴

$$\zeta_{\theta,\nu}(s) = \frac{s}{\pi} \sin\left(\frac{\pi s}{2}\right) \int_0^\infty d\rho \rho^{-s-1} \log \left[\sqrt{\frac{2\pi}{\rho}} e^{-\rho} \left(\rho I'_\nu(\rho) + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} I_\nu(\rho) \right) \right] \quad (\text{A.49})$$

ausgedrückt werden. Dieser Ausdruck muss jedoch noch nach der in [210] angegebenen Prozedur nach $s = -2$ analytisch fortgesetzt werden. Bei der Entwicklung um drei Dimensionen fällt der Polterm im Vorfaktor von Gleichung (A.48) wegen $\zeta_{\theta,\nu}(-2) = 0$ weg und es ergibt sich für die Casimir-Amplitude:

$$\Delta = \frac{1}{\pi} [\zeta'_{0,0}(-2) + \zeta'_{\arctan(2),0}(-2)] \quad (\text{A.50})$$

$$= -0.0120095186 \dots \quad (\text{A.51})$$

Dieser Wert weicht um etwa 11.5% von dem numerisch exakt bestimmten Wert für die Amplitude ab. Eine erstaunlich genaue Approximation für die Casimir-Amplitude kann erhalten werden, wenn für das Modell-Potential die Form

$$V(\zeta) = -\frac{\pi^2}{4 \sin(\zeta\pi)} + y_0 \quad (\text{A.52})$$

angenommen wird [211]. Die zugehörige Schrödinger-Gleichung kann analytisch gelöst werden. Man erhält so das Spektrum, aus dem die Casimir-Amplitude bestimmt werden kann. Der zusätzliche Parameter y_0 verschiebt die Energie-Eigenwerte und wird so bestimmt, dass die resultierende Casimir-Amplitude maximal wird. Für $y_0 = y_c = \text{arcosh}^2(e/2)$ ergibt sich der Wert

$$\Delta = -\frac{y_c^3/2}{12\pi} + \frac{y_c}{8\pi} - \frac{\pi}{96} + \frac{1}{8\pi} \int_{y_c}^\infty dy \log [1 + \exp(-2\sqrt{y})] \quad (\text{A.53})$$

$$= -0.010779690932 \dots, \quad (\text{A.54})$$

was um nur 0.58% von dem numerisch exakt bestimmten Wert für die Amplitude abweicht.

⁴Das Quadrat am Kosinus in Gleichung (4.14) aus [210] ist ein Druckfehler.

A.4 Das Integral $I_D(r)$

Zur Berechnung des *Bulk*-Anteils der freien Energie wird das Integral

$$I_D(r) = \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} \left[4 \sin^2 \left(\frac{k}{2} \right) + r \right]^{\frac{D-3}{2}} \quad (\text{A.55})$$

benötigt. Durch die Substitution

$$\xi = \cos^2 \left(\frac{k}{2} \right) \quad \text{mit} \quad \frac{d\xi}{dk} = -\sqrt{\xi(1-\xi)} \quad (\text{A.56})$$

erhält man

$$I_D(r) = \frac{1}{\pi} (4+r)^{\frac{D-3}{2}} \int_0^1 \frac{d\xi}{\sqrt{\xi(1-\xi)}} \left(1 - \frac{4}{4+r} \xi \right)^{\frac{D-3}{2}}. \quad (\text{A.57})$$

Für $r = 0$ erkennt man sofort die Definition der Beta-Funktion [205, Gleichung 5.12.1]

$$B(x, y) = \int_0^1 dt t^{x-1} (1-t)^{y-1} = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} \quad (\text{A.58})$$

mit $x = 1/2$ und $y = (D-2)/2$. Es ergibt sich also

$$\begin{aligned} I_D(0) &= \frac{2^{D-3}}{\pi} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{D}{2} - 1\right)}{\Gamma\left(\frac{D-1}{2}\right)} \\ &= \frac{2^D}{8\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma\left(\frac{D}{2} - 1\right)}{\Gamma\left(\frac{D-1}{2}\right)}. \end{aligned} \quad (\text{A.59})$$

Für $r > 0$ lässt sich auf die Integraldarstellung der Gaußschen hypergeometrischen Funktion [163, Gleichung 3.197 3.]

$${}_2F_1(\nu, \lambda, \lambda + \mu; \beta) = \frac{1}{B(\lambda, \mu)} \int_0^1 dx x^{\lambda-1} (1-x)^{\mu-1} (1-x\beta)^{-\nu} \quad (\text{A.60})$$

zurückgreifen. Mit $\nu = (3-D)/2$, $\lambda = 1/2$, $\mu = 1/2$ und $\beta = 4/(4+r)$ ergibt sich

$$I_D(r) = (4+r)^{\frac{D-3}{2}} {}_2F_1\left(\frac{3-D}{2}, \frac{1}{2}; 1; \frac{4}{4+r}\right). \quad (\text{A.61})$$

Die Entwicklung von (A.59) um $D = 3$ ergibt

$$I_D(0) = 1 + O[(D-3)^2]. \quad (\text{A.62})$$

Zudem wird die Entwicklung von $I_D(\tau)$ um $D = 3$ und $D = 5$ für $\tau > 0$ benötigt. Diese erhält man, indem man, statt direkt Gleichung (A.61) zu entwickeln, zur Definition (3.68) zurückgeht und Entwicklung und k -Integration vertauscht.

Die Entwicklungen in D lauten

$$\left[4 \sin^2 \left(\frac{k}{2}\right) + r\right]^{\frac{D-3}{2}} = 1 + \log \left[4 \sin^2 \left(\frac{k}{2}\right) + r\right] \frac{D-3}{2} + O[(D-3)^2] \quad (\text{A.63})$$

und

$$\begin{aligned} \left[4 \sin^2 \left(\frac{k}{2}\right) + r\right]^{\frac{D-3}{2}} &= \left[4 \sin^2 \left(\frac{k}{2}\right) + r\right] \\ &+ \left[4 \sin^2 \left(\frac{k}{2}\right) + r\right] \log \left[4 \sin^2 \left(\frac{k}{2}\right) + r\right] \frac{D-5}{2} + O[(D-5)^2]. \end{aligned} \quad (\text{A.64})$$

Die k -Integrale über die ersten Terme in (A.63) und (A.64) sind trivial. Der linearen Terme können am einfachsten integriert werden, indem sie durch ein- beziehungsweise zweifaches Ableiten nach r auf die Form

$$\int_0^\pi \frac{dk}{\pi} \frac{1}{4 \sin^2 \left(\frac{k}{2}\right) + r} = \frac{1}{\sqrt{r(r+4)}} \quad (\text{A.65})$$

gebracht werden. Gleichung (A.65) ist eine einfache Anwendung des Residuensatzes. Aufintegrieren bezüglich r ,

$$\int dr \frac{1}{\sqrt{r(r+4)}} = 2 \operatorname{arsinh} \left(\frac{\sqrt{r}}{2}\right), \quad (\text{A.66})$$

$$2 \int dr \operatorname{arsinh} \left(\frac{\sqrt{r}}{2}\right) = 2(2+r) \operatorname{arsinh} \left(\frac{\sqrt{r}}{2}\right) - \sqrt{r(r+4)} \quad (\text{A.67})$$

und Anpassung der Integrationskonstanten mit Hilfe der Integrale [163, Gleichung 4.384 3. und 9.],

$$2 \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} \sin^2 \left(\frac{k}{2}\right) \log \left[4 \sin^2 \left(\frac{k}{2}\right)\right] = 1 \quad (\text{A.68})$$

$$\int_0^\pi \frac{dk}{2\pi} \left\{1 + \log \left[4 \sin^2 \left(\frac{k}{2}\right)\right]\right\} = \frac{1}{2} \quad (\text{A.69})$$

liefert schließlich die Ergebnisse

$$I_D(r) = 1 + (D-3) \operatorname{arsinh} \left(\frac{\sqrt{r}}{2}\right) + O[(D-3)^2] \quad (\text{A.70})$$

und

$$I_D(r) = 2 + r + \frac{D-5}{2} \left\{ (2+r) \left[1 + 2 \operatorname{arsinh} \left(\frac{\sqrt{r}}{2} \right) \right] - \sqrt{r(4+r)} \right\} + O[(D-5)^2]. \quad (\text{A.71})$$

Literaturverzeichnis

- [1] H. B. G. Casimir, *On the attraction between two perfectly conducting plates*, *Proc. K. Ned. Akad. Wet.* **51**, 793–795 (1948). → *S. 1, 7*
- [2] S. K. Lamoreaux, *Demonstration of the Casimir Force in the 0.6 to 6 μ m Range*, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 5–8 (1997), [Erratum: **81**, 5475 (1998)]. → *S. 1, 9, 10*
- [3] U. Mohideen und A. Roy, *Precision Measurement of the Casimir force from 0.1 to 0.9 μ m*, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4549 (1998). → *S. 1, 9, 10*
- [4] A. Roy, C.-Y. Lin und U. Mohideen, *Improved Precision Measurement of the Casimir Force*, *Phys. Rev. D* **60**, 111101 (1999). → *S. 1*
- [5] M. E. Fisher und P.-G. de Gennes, *Phénomènes aux parois dans un mélange binaire critique*, *C. R. Acad. Sci. Série B* **287**, 207 (1978). → *S. 1, 11*
- [6] R. Garcia und M. H. W. Chan, *Critical fluctuation-induced thinning of ^4He films near the superfluid transition*, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1187 (1999). → *S. 1, 14, 15*
- [7] C. Hertlein, L. Helden, A. Gambassi, S. Dietrich und C. Bechinger, *Direct measurement of critical Casimir forces*, *Nature* **451**, 172–175 (2008). → *S. 2, 18*
- [8] A. Gambassi, A. Maciolek, C. Hertlein, U. Nellen, L. Helden, C. Bechinger und S. Dietrich, *Critical Casimir effect in classical binary liquid mixtures*, *Phys. Rev. E* **80**, 061143 (2009). → *S. 2, 18*
- [9] M. Krech, *Fluctuation-induced forces in critical fluids*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **11**, R391 (1999). → *S. 3, 14, 19*
- [10] M. Krech, *Casimir Effect in Critical Systems*, World Scientific, Singapore 1994. → *S. 3, 19, 24, 153, 174*
- [11] M. Krech, *Casimir forces in binary liquid mixtures*, *Phys. Rev. E* **56**, 1642–1659 (1997). → *S. 3, 5, 19, 147, 157, 165*

- [12] M. Krech und S. Dietrich, *Free energy and specific heat of critical films and surfaces*, Phys. Rev. A **46**, 1886–1921 (1992). → S. 3, 5, 16, 19, 26, 27, 34, 46, 54, 57, 58, 175, 176, 186
- [13] K. Symanzik, *Schrödinger Representation and Casimir Effect in Renormalizable Quantum Field Theory*, Nucl. Phys. B **190**, 1 (1981). → S. 3, 16, 19, 26, 31
- [14] C. P. Bachas, *Comment on the sign of the Casimir force*, J. Phys. A: Math. Theor. **40**, 9089–9096 (2007). → S. 4, 11, 16, 74
- [15] F. M. Schmidt, *Kritischer Casimir Effekt bei Robin-Randbedingungen*, Diplomarbeit, Fachbereich Physik, Universität Duisburg-Essen (2008). → S. 4, 6, 31, 34, 43
- [16] F. M. Schmidt und H. W. Diehl, *Crossover from Attractive to Repulsive Casimir Forces and Vice Versa*, Phys. Rev. Lett. **101**, 100601 (2008). → S. 4, 7, 19, 27, 28
- [17] M. Krech und S. Dietrich, *Finite-Size Scaling for Critical Films*, Phys. Rev. Lett. **66**, 345–348 (1991), [Erratum **67**, 1055 (1991)]. → S. 5, 16, 19, 26, 46, 54, 57, 58
- [18] H. W. Diehl, D. Grüneberg und M. A. Shpot, *Fluctuation-induced forces in periodic slabs: Breakdown of ϵ expansion at the bulk critical point and revised field theory*, EPL (Europhysics Letters) **75**, 241 (2006). → S. 5, 19, 27, 28, 58, 59, 60, 61, 66, 72, 176
- [19] D. Grüneberg und H. W. Diehl, *Thermodynamic Casimir effects involving interacting field theories with zero modes*, Phys. Rev. B **77**, 115409 (2008). → S. 5, 19, 28, 46, 49, 58, 59, 60, 61, 66
- [20] H. W. Diehl und F. M. Schmidt, *The critical Casimir effect in films for generic non-symmetry-breaking boundary conditions*, New Journal of Physics **13**, 123025 (2011). → S. 5, 7, 19, 28, 46, 73
- [21] A. Hucht, *Thermodynamic Casimir Effect in ^4He Films near T_λ : Monte Carlo Results*, Phys. Rev. Lett. **99**, 185301 (2007). → S. 5, 16, 19, 80
- [22] O. Vasilyev, A. Gambassi, A. Maciołek und S. Dietrich, *Monte Carlo simulation results for critical Casimir forces*, EPL (Europhysics Letters) **80**, 60009 (2007). → S. 5, 16, 19, 80, 158

- [23] R. Zandi, A. Shackell, J. Rudnick, M. Kardar und L. P. Chayes, *Thinning of superfluid films below the critical point*, Phys. Rev. E **76**, 030601 (2007). → S. 5, 16
- [24] A. Maciołek, A. Gambassi und S. Dietrich, *Critical Casimir effect in superfluid wetting films*, Phys. Rev. E **76**, 031124 (2007). → S. 5, 16
- [25] T. F. Mohry, A. Maciołek und S. Dietrich, *Crossover of critical Casimir forces between different surface universality classes*, Phys. Rev. E **81**, 061117 (2010). → S. 5, 19, 166
- [26] H. W. Diehl, D. Grüneberg, M. Hasenbusch, A. Hucht, S. B. Rutkevich und F. M. Schmidt, *Exact thermodynamic Casimir forces for an interacting three-dimensional model system in film geometry with free surfaces*, EPL (Europhysics Letters) **100**, 10004 (2012). → S. 5, 7, 17, 80, 83, 97, 119
- [27] H. W. Diehl, D. Grüneberg, M. Hasenbusch, A. Hucht, S. B. Rutkevich und F. M. Schmidt, *Large- n approach to thermodynamic Casimir effects in slabs with free surfaces*, Phys. Rev. E **89**, 062123 (2014). → S. 5, 7, 17, 80, 83, 97, 118, 119, 138
- [28] D. Danchev, *Finite-size scaling Casimir force function: Exact spherical-model results*, Phys. Rev. E **53**, 2104–2109 (1996). → S. 5, 17, 19, 83, 86, 133, 147, 154, 191, 193
- [29] D. M. Danchev, *Exact three-dimensional Casimir force amplitude, C function, and Binder's cumulant ratio: Spherical model results*, Phys. Rev. E **58**, 1455–1462 (1998). → S. 5, 17, 19, 83, 86, 147, 154, 191, 193
- [30] M. E. Fisher, *Renormalization group theory: Its basis and formulation in statistical physics*, Rev. Mod. Phys. **70**, 653–681 (1998). → S. 6
- [31] F. London, *Zur Theorie und Systematik der Molekularkräfte*, Z. Phys. **63**, 245 (1930). → S. 9
- [32] H. B. G. Casimir und D. Polder, *The Influence of Retardation on the London-van der Waals Forces*, Phys. Rev. **73**, 360–372 (1948). → S. 9
- [33] J. T. G. Overbeek und M. J. Sparnaay, *Classical coagulation. London-van der Waals attraction between macroscopic objects*, Discuss. Faraday Soc. **18**, 12 (1954). → S. 9

- [34] B. Deriagin und I. Abrikosova, *Direct measurement of the molecular attraction of solid bodies. 1. Statement of the problem and method of measuring forces by using negative feedback*, Sov.Phys.JETP **3**, 819–829 (1957). → S. 9
- [35] M. J. Sparnaay, *Attractive Forces between Flat Plates*, Nature **180**, 334–335 (1957). → S. 9
- [36] M. J. Sparnaay, *Measurements of attractive forces between flat plates*, Physica **24**, 751 (1958). → S. 9
- [37] P. H. G. M. van Blokland und J. T. G. Overbeek, *Van der Waals forces between objects covered with a chromium layer*, J. Chem. Soc. Faraday Trans. **74**, 2637 (1978). → S. 10
- [38] B. Derjaguin, *Untersuchungen über die Reibung und Adhäsion, IV*, Kolloid-Zeitschrift **69**, 155–164 (1934). → S. 10
- [39] G. L. Klimchitskaya, U. Mohideen und V. M. Mostepanenko, *The Casimir force between real materials: Experiment and theory*, Rev. Mod. Phys. **81**, 1827–1885 (2009). → S. 10, 11
- [40] G. L. Klimchitskaya, U. Mohideen und V. M. Mostepanenko, *Control of the Casimir Force Using Semiconductor Test Bodies*, International Journal of Modern Physics B **25**, 171–230 (2011). → S. 10
- [41] A. W. Rodriguez, F. Capasso und S. G. Johnson, *The Casimir effect in microstructured geometries*, Nature Photonics **5** (2011). → S. 10
- [42] F. Serry, D. Walliser und G. Maclay, *The anharmonic Casimir oscillator (ACO)-the Casimir effect in a model microelectromechanical system*, Journal of Microelectromechanical Systems **4**, 193–205 (1995). → S. 10
- [43] F. M. Serry, D. Walliser und G. J. Maclay, *The role of the Casimir effect in the static deflection and stiction of membrane strips in microelectromechanical systems (MEMS)*, J. Appl. Phys. **84**, 2501 (1998). → S. 10
- [44] E. Buks und M. L. Roukes, *Stiction, adhesion energy, and the Casimir effect in micromechanical systems*, Phys. Rev. B **63**, 033402 (2001). → S. 10
- [45] E. Buks und M. L. Roukes, *Metastability and the Casimir effect in micromechanical systems*, EPL (Europhysics Letters) **54**, 220 (2001). → S. 10

- [46] H. B. Chan, V. A. Aksyuk, R. N. Kleiman, D. J. Bishop und F. Capasso, *Quantum Mechanical Actuation of Microelectromechanical Systems by the Casimir Force*, Science **291**, 1941–1944 (2001), [Errata: **293** 607 und 1766]. → S. 10
- [47] J. N. Munday, F. Capasso und V. A. Parsegian, *Measured long-range repulsive Casimir-Lifshitz forces.*, Nature **457**, 170–3 (2009). → S. 10
- [48] E. Lifshitz, *The theory of molecular attractive forces between solids*, Sov.Phys.JETP **2**, 73–83 (1956). → S. 10
- [49] I. E. Dzyaloshinskii, E. M. Lifshitz und L. P. Pitaevskii, *GENERAL THEORY OF VAN DER WAALS' FORCES*, Soviet Physics Uspekhi **4**, 153 (1961). → S. 10
- [50] K. A. Milton, *Resource Letter VWCPF-1: van der Waals and Casimir-Polder forces*, American Journal of Physics **79**, 697–711 (2011). → S. 10, 11
- [51] O. Kenneth und I. Klich, *Opposites Attract: A Theorem about the Casimir Force*, Phys. Rev. Lett. **97**, 160401 (2006). → S. 10
- [52] S. J. Rahi, T. Emig und R. L. Jaffe, *Geometry and Material Effects in Casimir Physics-Scattering Theory*, in *Casimir Physics*, herausgegeben von D. Dalvit, P. Milonni, D. Roberts und F. da Rosa, Bd. 834 von *Lecture Notes in Physics*, S. 129–174, Springer Berlin Heidelberg 2011. → S. 11
- [53] K. A. Milton, *The Casimir Effect*, World Scientific Pub. Co., 1. Aufl. 2001. → S. 11
- [54] V. Mostepanenko und N. N. Trunov, *The Casimir Effect and its Applications*, Clarendon Press, Oxford, UK 1997. → S. 11, 186
- [55] K. A. Milton, *The Casimir effect: Recent controversies and progress*, J. Phys. A: Math. Gen. **37**, R209 (2004). → S. 11
- [56] M. Bordag, U. Mohideen und V. Mostepanenko, *New developments in the Casimir effect*, Physics Reports **353**, 1–205 (2001). → S. 11
- [57] S. K. Lamoreaux, *Resource Letter CF-1: Casimir Force*, American Journal of Physics **67**, 850–861 (1999). → S. 11
- [58] V. Privman, *Finite-Size Scaling Theory*, in *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*, herausgegeben von V. Privman, Kap. 1, World Scientific, Singapore 1990. → S. 12

- [59] M. N. Barber, *Finite-size Scaling*, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, herausgegeben von C. Domb und J. L. Lebowitz, Bd. 8, S. 145–266, Academic, London 1983. → *S. 12, 24, 154, 174*
- [60] A. Hucht und F. M. Schmidt. unveröffentlicht. → *S. 13*
- [61] H. Li und M. Kardar, *Fluctuation-induced forces between manifolds immersed in correlated fluids*, Phys. Rev. A **46**, 6490–6500 (1992). → *S. 13*
- [62] M. Krech und S. Dietrich, *Specific heat of critical films, the Casimir force, and wetting films near critical end points*, Phys. Rev. A **46**, 1922–1941 (1992). → *S. 14, 19*
- [63] D. Grüneberg, *Einfluss van-der-Waals-artiger Wechselwirkungen auf den thermodynamischen Casimir-Effekt*, Doktorarbeit, Universität Duisburg-Essen, Duisburg Februar 2008. → *S. 15*
- [64] A. Ganshin, S. Scheidemantel, R. Garcia und M. H. W. Chan, *Critical Casimir Force in ^4He Films: Confirmation of Finite-Size Scaling*, Phys. Rev. Lett. **97**, 075301 (2006). → *S. 15*
- [65] V. Dohm, *Pronounced minimum of the thermodynamic Casimir forces of $O(n)$ symmetric film systems: analytic theory* (2014), arXiv:1401.2374. → *S. 16, 83*
- [66] H. Li und M. Kardar, *Fluctuation-induced forces between rough surfaces*, Phys. Rev. Lett. **67**, 3275–3278 (1991). → *S. 16*
- [67] R. Zandi, J. Rudnick und M. Kardar, *Casimir Forces, Surface Fluctuations, and Thinning of Superfluid Film*, Phys. Rev. Lett. **93**, 155302 (2004). → *S. 16*
- [68] A. Mukhopadhyay und B. M. Law, *Critical Casimir Effect in Binary Liquid Wetting Films*, Phys. Rev. Lett. **83**, 772 (1999). → *S. 18*
- [69] M. Fukuto, Y. F. Yano und P. S. Pershan, *Critical Casimir Effect in Three-Dimensional Ising Systems: Measurements on Binary Wetting Films*, Phys. Rev. Lett. **94**, 135702 (2005). → *S. 18*
- [70] S. Rafai, D. Bonn und J. Meunier, *Repulsive and attractive critical Casimir forces*, Physica A **386**, 31–35 (2007). → *S. 18*

- [71] U. Nellen, L. Helden und C. Bechinger, *Tunability of critical Casimir interactions by boundary conditions*, EPL (Europhysics Letters) **88**, 26001 (2009). → S. 19, 185
- [72] F. Soyka, O. Zvyagolskaya, C. Hertlein, L. Helden und C. Bechinger, *Critical Casimir Forces in Colloidal Suspensions on Chemically Patterned Surfaces*, Phys. Rev. Lett. **101**, 208301 (2008). → S. 19
- [73] M. Tröndle, O. Zvyagolskaya, A. Gambassi, D. Vogt, L. Harnau, C. Bechinger und S. Dietrich, *Trapping colloids near chemical stripes via critical Casimir forces*, Molecular Physics **109**, 1169–1185 (2011). → S. 19
- [74] M. Burgsmüller, H. W. Diehl und M. A. Shpot, *Fluctuation-induced forces in strongly anisotropic critical systems*, J. Stat. Mech.: Theor. Exp. **2010**, P11020 (2010), [Erratum: E05001 (2011)]. → S. 19, 177, 178
- [75] J. G. Brankov, D. M. Dantchev und N. S. Tonchev, *Theory of Critical Phenomena in Finite-Size Systems — Scaling and Quantum Effects*, World Scientific, Singapore 2000. → S. 19, 85, 86, 154, 174
- [76] D. Dantchev, H. W. Diehl und D. Grüneberg, *Excess free energy and Casimir forces in systems with long-range interactions of van der Waals type: General considerations and exact spherical-model results*, Phys. Rev. E **73**, 016131 (2006). → S. 19, 86, 95, 176
- [77] Z. Borjan und P. J. Upton, *Off-Critical Casimir Effect in Ising Slabs with Symmetric Boundary Conditions in $d = 3$* , Phys. Rev. Lett. **101**, 125702 (2008). → S. 19, 158
- [78] Z. Borjan und P. J. Upton, *Order-Parameter Profiles and Casimir Amplitudes in Critical Slabs*, Phys. Rev. Lett. **81**, 4911–4914 (1998). → S. 19, 158
- [79] Z. Borjan, *Crossover behaviors in the Ising strips with changeable boundary conditions: Exact variational results*, EPL (Europhysics Letters) **99**, 56004 (2012). → S. 19, 165, 173
- [80] R. Evans und J. Stecki, *Solvation force in two-dimensional Ising strips*, Phys. Rev. B **49**, 8842–8851 (1994). → S. 19, 157
- [81] D. B. Abraham und A. Maciolek, *Casimir Interactions in Ising Strips with Boundary Fields: Exact Results*, Phys. Rev. Lett. **105**, 055701 (2010). → S. 19, 158, 165

-
- [82] A. Hucht, D. Grüneberg und F. M. Schmidt, *Aspect-ratio dependence of thermodynamic Casimir forces*, Phys. Rev. E **83**, 051101 (2011). → S. 19
- [83] O. Vasilyev, A. Gambassi, A. Maciołek und S. Dietrich, *Universal scaling functions of critical Casimir forces obtained by Monte Carlo simulations*, Phys. Rev. E **79**, 041142 (2009). → S. 19, 80, 158
- [84] M. Hasenbusch, *The thermodynamic Casimir effect in the neighbourhood of the λ -transition: a Monte Carlo study of an improved three-dimensional lattice model*, J. Stat. Mech.: Theor. Exp. **2009**, P07031 (2009). → S. 19
- [85] M. Hasenbusch, *Another method to compute the thermodynamic Casimir force in lattice models*, Phys. Rev. E **80**, 061120 (2009). → S. 19
- [86] M. Hasenbusch, *Specific heat, internal energy, and thermodynamic Casimir force in the neighborhood of the λ transition*, Phys. Rev. B **81**, 165412 (2010). → S. 19
- [87] M. Hasenbusch, *Thermodynamic Casimir effect for films in the three-dimensional Ising universality class: Symmetry-breaking boundary conditions*, Phys. Rev. B **82**, 104425 (2010). → S. 19, 80, 158
- [88] M. Hasenbusch, *Thermodynamic Casimir force: A Monte Carlo study of the crossover between the ordinary and the normal surface universality class*, Phys. Rev. B **83**, 134425 (2011). → S. 19, 158, 165
- [89] M. Hasenbusch, *Thermodynamic Casimir effect: Universality and corrections to scaling*, Phys. Rev. B **85**, 174421 (2012). → S. 19, 158
- [90] O. Vasilyev, A. Maciołek und S. Dietrich, *Critical Casimir forces for Ising films with variable boundary fields*, Phys. Rev. E **84**, 041605 (2011). → S. 19, 153, 165, 166, 173
- [91] S. Balibar und R. Ishiguro, *Critical Casimir forces and anomalous wetting*, Pramana–J. Phys. **64**, 743 (2005). → S. 19
- [92] A. Gambassi, *The Casimir effect: From quantum to critical fluctuations*, J. Phys.: Conference Series **161**, 012037 (2009). → S. 19
- [93] H. W. Diehl, *Field-theoretical Approach to Critical Behaviour at Surfaces*, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, herausgegeben von C. Domb und J. L. Lebowitz, Bd. 10, S. 75–267, Academic, London 1986. → S. 20, 22, 23, 24, 31, 44, 46, 48, 50, 80, 147

- [94] H. Nakanishi und M. E. Fisher, *Multicriticality of Wetting, Prewetting, and Surface Transitions*, Phys. Rev. Lett. **49**, 1565–1568 (1982). → S. 20
- [95] T. C. Lubensky und M. H. Rubin, *Critical phenomena in semi-infinite systems. II. Mean-field theory*, Phys. Rev. B **12**, 3885–3901 (1975). → S. 22, 96
- [96] K. Binder, *Critical behaviour at surfaces*, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, herausgegeben von C. Domb und J. L. Lebowitz, Bd. 8, S. 1–144, Academic, London 1983. → S. 23
- [97] H. W. Diehl, *The theory of boundary critical phenomena*, Int. J. Mod. Phys. B **11**, 3503–3523 (1997). → S. 23, 118
- [98] L. P. Kadanoff, *Scaling, Universality, and Operator Algebras*, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, herausgegeben von C. Domb und M. S. Green, Bd. 5a, S. 1–34, Academic, London 1976. → S. 23
- [99] S. Sachdev, *Theory of finite-temperature crossovers near quantum critical points close to, or above, their upper-critical dimension*, Phys. Rev. B **55**, 142–163 (1997). → S. 28
- [100] R. Courant und D. Hilbert, *Methoden der mathematischen Physik I*, Bd. 30 von *Heidelberger Taschenbücher*, Springer-Verlag, Berlin, 3. Aufl. 1968. → S. 33
- [101] K. Jänich, *Analysis für Physiker und Ingenieure*, Springer-Lehrbuch, Springer, Berlin, Heidelberg 2001. → S. 33
- [102] A. Peyerimhoff, *Gewöhnliche Differentialgleichungen II*, studien-text, Akademische Verlagsgesellschaft, Frankfurt am Main 1970. → S. 33
- [103] E. A. Coddington und R. Carlson, *Linear ordinary differential equations*, Siam, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, USA 1997. → S. 33
- [104] P. M. Morse und M. Feshbach, *Methods Of Theoretical Physics, Part I*, McGraw-Hill, New York 1953. → S. 41, 88, 114
- [105] L. C. de Albuquerque und R. M. Cavalcanti, *Casimir effect for the scalar field under Robin boundary conditions: a functional integral approach*, J. Phys. A: Math. Gen. **37**, 7039 (2004). → S. 42
- [106] A. Romeo und A. A. Saharian, *Casimir effect for scalar fields under Robin boundary conditions on plates*, J. Phys. A: Math. Gen. **35**, 1297 (2002). → S. 42, 186

-
- [107] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, International series of monographs on physics, Oxford University Press, Oxford, 2. Aufl. 1993. → S. 44, 143, 148
- [108] D. J. Amit, *Field theory, the renormalization group, and critical phenomena*, World Scientific, Singapore, 2. Aufl. 1989. → S. 44, 46, 48, 87
- [109] M. L. Bellac, *Quantum and Statistical Field Theory*, Clarendon Press, Oxford, 1. Aufl. 1991. → S. 44
- [110] H. W. Diehl und S. Dietrich, *Field-Theoretical Approach to Static Critical Phenomena in Semi-Infinite Systems*, Z. Phys. B **42**, 65 (1981), [Erratum: **43**, 281 (1981)]. → S. 46, 48
- [111] H. W. Diehl und S. Dietrich, *Field-Theoretical Approach to Multicritical Behavior Near Free Surfaces*, Phys. Rev. B **24**, 2878 (1981). → S. 46, 48
- [112] H. W. Diehl und S. Dietrich, *Multicritical Behaviour at Surfaces*, Z. Phys. B **50**, 117 (1983). → S. 46, 48
- [113] H. Diehl und S. Dietrich, *Scaling laws and surface exponents from renormalization group equations*, Physics Letters A **80**, 408–412 (1980). → S. 46
- [114] R. Schloms und V. Dohm, *Minimal renormalization without ϵ -expansion: critical behavior in three dimensions*, Nucl. Phys. B **328**, 639–663 (1989). → S. 46
- [115] S. R. Finch, *Mathematical constants*, Bd. 94 von *Encyclopedia of mathematics and its applications*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, New York 2003. → S. 47
- [116] H. W. Diehl und D. Grüneberg, *Critical Casimir amplitudes for n -component ϕ^4 models with $O(n)$ -symmetry breaking quadratic boundary terms*, Nucl. Phys. B **822**, 517–542 (2009). → S. 58, 59, 60, 61
- [117] M. Hasenbusch, *Monte Carlo study of surface critical phenomena: The special point*, Phys. Rev. B **84**, 134405 (2011). → S. 74
- [118] C. Ruge, S. Dunkelmann und F. Wagner, *New method for determination of critical parameters*, Phys. Rev. Lett. **69**, 2465–2467 (1992). → S. 78

- [119] C. Ruge, S. Dunkelmann, F. Wagner und J. Wulf, *Study of the three-dimensional Ising model on film geometry with the cluster Monte Carlo method*, Journal of Statistical Physics **73**, 293–317 (1993). → S. 78
- [120] H. W. Diehl, S. Dietrich und E. Eisenriegler, *Universality, irrelevant surface operators, and corrections to scaling in systems with free surfaces and defect planes*, Phys. Rev. B **27**, 2937–2954 (1983). → S. 80, 118, 133
- [121] A. Gambassi, A. Maciołek, C. Hertlein, U. Nellen, L. Helden, C. Bechinger und S. Dietrich, *Critical Casimir effect in classical binary liquid mixtures*, Phys. Rev. E **80**, 061143 (2009). → S. 80
- [122] N. D. Mermin und H. Wagner, *Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in 1D or 2D isotropic Heisenberg models*, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966). → S. 83, 92
- [123] P. C. Hohenberg, *Existence of Long-Range Order in One and Two Dimensions*, Phys. Rev. **158**, 383–386 (1967). → S. 83, 92
- [124] S. Coleman, *There are no Goldstone bosons in two dimensions*, Communications in Mathematical Physics **31**, 259–264 (1973). → S. 83, 92
- [125] M. Hasenbusch, *The specific heat of thin films near the λ -transition: a Monte Carlo study of an improved three-dimensional lattice model*, J. Stat. Mech.: Theor. Exp. **2009**, P10006 (2009). → S. 83
- [126] J. M. Kosterlitz und D. J. Thouless, *Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems*, Journal of Physics C: Solid State Physics **6**, 1181 (1973). → S. 83
- [127] J. M. Kosterlitz, *The critical properties of the two-dimensional xy model*, Journal of Physics C: Solid State Physics **7**, 1046 (1974). → S. 83
- [128] D. Dantchev, J. Bergknoff und J. Rudnick, *Casimir force in the $O(n \rightarrow \infty)$ model with free boundary conditions*, Phys. Rev. E **89**, 042116 (2014). → S. 83
- [129] S. Biswas, J. K. Bhattacharjee, H. S. Samanta, S. Bhattacharyya und B. Hu, *The critical Casimir force in the superfluid phase: effect of fluctuations*, New Journal of Physics **12**, 063039 (2010). → S. 83
- [130] P. Jakubczyk und M. Napiórkowski, *Critical Casimir forces for $O(N)$ models from functional renormalization*, Phys. Rev. B **87**, 165439 (2013). → S. 83

-
- [131] W. Lenz, *Beitrag zum Verständnis der magnetischen Erscheinungen in festen Körpern*, Z. Phys. **21**, 613 (1920). → S. 84
- [132] E. Ising, *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*, Z. Phys. **31**, 253 (1925). → S. 84
- [133] M. Kac, *The work of T. H. Berlin in statistical mechanics: A personal reminiscence*, Phys. Today **17**, 40 (1964). → S. 84
- [134] T. H. Berlin und M. Kac, *The Spherical Model of a Ferromagnet*, Phys. Rev. **86**, 821–835 (1952). → S. 84, 85
- [135] E. Montroll, *Continuum models of cooperative phenomenon*, Il Nuovo Cimento Series 9 **6**, 265–278 (1949). → S. 85
- [136] H. W. Lewis und G. H. Wannier, *Spherical model of a ferromagnet*, Phys. Rev. **88**, 682 (1952), [Erratum: **90**, 1131 (1953)]. → S. 85
- [137] H. E. Stanley, *Critical Indices for a System of Spins of Arbitrary Dimensionality Situated on a Lattice of Arbitrary Dimensionality*, J. Appl. Phys. **40**, 1272 (1969). → S. 85
- [138] H. E. Stanley, *Dependence of Critical Properties on Dimensionality of Spins*, Phys. Rev. Lett. **20**, 589 (1968). → S. 85
- [139] M. Kac und C. J. Thompson, *Spherical Model and the Infinite Spin Dimensionality Limit*, Phys. Norv. **5**, 163–168 (1971). → S. 85
- [140] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, International Series of Monographs on Physics, Oxford University Press, Oxford 1971. → S. 85
- [141] H. J. F. Knops, *Infinite spin dimensionality limit for nontranslationally invariant interactions*, J. Math. Phys. **14**, 1918–1920 (1973). → S. 86
- [142] A. J. Bray und M. A. Moore, *Critical Behavior of a Semi-infinite System: n-Vector Model in the Large-n Limit*, Phys. Rev. Lett. **38**, 735–738 (1977). → S. 86, 95, 194
- [143] A. J. Bray und M. A. Moore, *Critical behaviour of semi-infinite systems*, J. Phys. A: Math. Gen. **10**, 1927–1961 (1977). → S. 86, 95, 122, 154, 174, 194

- [144] H. Chamati, *Finite-size effects in the spherical model of finite thickness*, J. Phys. A: Math. Theor. **41**, 375002 (2008). → S. 86, 126, 161, 164, 191, 193
- [145] X. S. Chen und V. Dohm, *Scaling and nonscaling finite-size effects in the Gaussian and the mean spherical model with free boundary conditions*, Phys. Rev. E **67**, 056127 (2003). → S. 86
- [146] B. Kastening und V. Dohm, *Critical Casimir force scaling functions of the mean spherical model in $2 < d \leq 3$ dimensions for nonperiodic boundary conditions*, in *Proceedings of the 9th International Conference on Path Integrals - New Trends and Perspectives, Dresden 2007*, herausgegeben von W. Janke und A. Pelster, S. 283, World Scientific, Singapore 2008. → S. 86
- [147] R. L. Stratonovich, *On a Method of Calculating Quantum Distribution Functions*, Soviet Physics Doklady **2**, 416 (1957). → S. 87
- [148] J. Hubbard, *Calculation of Partition Functions*, Phys. Rev. Lett. **3**, 77–78 (1959). → S. 87
- [149] S.-K. Ma, *The $1/n$ Expansion*, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, herausgegeben von C. Domb und M. S. Green, Bd. 6, S. 249–292, Academic, London 1976. → S. 88, 153, 178
- [150] H. Hellmann, *Einführung in die Quantenchemie*, Deuticke, Leipzig und Wien 1937, Übersetzung aus dem Russischen. → S. 89
- [151] R. P. Feynman, *Forces in Molecules*, Phys. Rev. **56**, 340–343 (1939). → S. 89
- [152] P. M. Chaikin und T. Lubensky, *Principles of condensed matter physics*, Cambridge University Press, Cambridge 1995. → S. 91
- [153] M. Moshe und J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory in the Large N Limit: a review*, Phys. Rep. **385**, 69–228 (2003). → S. 91, 113, 115, 179
- [154] H. W. Diehl und S. B. Rutkevich, *The $O(n)$ ϕ^4 model with free surfaces in the large- n limit: some exact results for boundary critical behaviour, fluctuation-induced forces and distant-wall corrections*, J. Phys. A: Math. Theor. **47**, 145004 (2014). → S. 97, 123, 137
- [155] S. B. Rutkevich und H. W. Diehl. *unveröffentlicht*. → S. 97, 126

-
- [156] G. S. Joyce und I. J. Zucker, *Evaluation of the Watson integral and associated logarithmic integral for the d -dimensional hypercubic lattice*, J. Phys. A: Math. Gen. **34**, 7349 (2001). → S. 98, 117
- [157] I. M. Gel'fand und A. M. Yaglom, *Integration in Functional Spaces and its Applications in Quantum Physics*, J. Math. Phys. **1**, 48–69 (1960). → S. 100
- [158] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*, World Scientific, Singapore, 5. Aufl. 2006. → S. 100
- [159] G. 't Hooft und M. Veltman, *Regularization and renormalization of gauge fields*, Nucl. Phys. B **44**, 189–213 (1972). → S. 102
- [160] Wolfram Research, Inc., *Mathematica Edition: Version 8.0*, Wolfram Research, Inc., Champaign, Illinois 2010. → S. 107
- [161] D. Comtesse, *Untersuchung des thermodynamischen Casimir-Effektes in $\mathcal{O}(n)$ -symmetrischen ϕ^4 -Theorien im Limes $n \rightarrow \infty$: Exakte Ergebnisse*, Diplomarbeit, Universität Duisburg-Essen (2008). → S. 109
- [162] D. Comtesse, A. Hucht und D. Grüneberg, *Thermodynamic Casimir Effect in the large- n limit* (2009), arXiv:0904.3661. → S. 109
- [163] I. S. Gradshteyn und I. M. Ryzhik, *Table of integrals, series, and products*, Academic Press, London, 4. Aufl. 1965. → S. 114, 197, 198
- [164] G. S. Joyce, *Singular behaviour of the cubic lattice Green functions and associated integrals*, J. Phys. A: Math. Gen. **34**, 3831 (2001). → S. 117
- [165] H. Kleinert und V. Schulte-Frohlinde, *Critical Properties of ϕ^4 -Theories*, World Scientific, Singapore 2000. → S. 117
- [166] C. Itzykson und J.-B. Zuber, *Quantum Field Theory*, International Series in Pure and Applied Physics, McGraw-Hill, New York, N. Y., USA 1980. → S. 117
- [167] E. Eisenriegler, M. Krech und S. Dietrich, *Absence of hyperuniversality in critical films*, Phys. Rev. Lett. **70**, 619–622 (1993). → S. 118
- [168] F. J. Wegner, *The Critical State, General Aspects*, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, herausgegeben von C. Domb und M. S. Green, Bd. 6, S. 7–124, Academic, London 1976. → S. 118

- [169] T. W. Capelhart und M. E. Fisher, *Susceptibility scaling functions for ferromagnetic Ising films*, Phys. Rev. B **13**, 5021–5038 (1976). → S. 133
- [170] A. M. Tselvik, *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2. Aufl. 2003. → S. 138, 140
- [171] H. W. Diehl und A. Nüsser, *Critical behavior of the nonlinear σ model with a free surface: The “ordinary” transition in $2+\epsilon$ dimensions*, Phys. Rev. Lett. **56**, 2834–2837 (1986). → S. 138
- [172] H. W. Diehl, *Derivation of the nonlinear σ -model from the $O(n)$ Ginsburg-Landau-Wilson model in the low-temperature limit*, Physics Letters A **75**, 375–378 (1980). → S. 138
- [173] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge University Press, Cambridge UK, 2. Aufl. 2011. → S. 142, 161
- [174] B. D. Josephson, *Relation between the superfluid density and order parameter for superfluid He near T_c* , Physics Letters **21**, 608–609 (1966). → S. 142
- [175] M. Zubaszewska, A. Maciołek und A. Drzewinski, *Critical Casimir forces along the isofields*, Phys. Rev. E **88**, 052129 (2013). → S. 153, 155
- [176] O. A. Vasilyev und S. Dietrich, *Critical Casimir forces for films with bulk ordering fields*, EPL (Europhysics Letters) **104**, 60002 (2013). → S. 155, 157
- [177] A. Maciołek, A. Drzewiński und A. Ciach, *Crossover between ordinary and normal transitions in the presence of a bulk field*, Phys. Rev. E **64**, 026123 (2001). → S. 157
- [178] M. E. Fisher und P. J. Upton, *Universality and interfaces at critical end points*, Phys. Rev. Lett. **65**, 2402–2405 (1990). → S. 158
- [179] M. E. Fisher und P. J. Upton, *Fluid interface tensions near critical end points*, Phys. Rev. Lett. **65**, 3405–3408 (1990). → S. 158
- [180] D. Dantchev und D. Grüneberg, *Casimir force in $O(n)$ systems with a diffuse interface*, Phys. Rev. E **79**, 041103 (2009). → S. 161, 191, 193
- [181] J. Bergknoff, D. Dantchev und J. Rudnick, *Casimir force in the rotor model with twisted boundary conditions*, Phys. Rev. E **84**, 041134 (2011). → S. 162

-
- [182] E. Brézin, E. Korutcheva, T. Jolicoeur und J. Zinn-Justin, *O(N) vector model with twisted boundary conditions*, Journal of Statistical Physics **70**, 583–598 (1993). → S. 162
- [183] L. V. Mikheev und M. E. Fisher, *Exact variational analysis of layered planar Ising models*, Phys. Rev. Lett. **70**, 186–189 (1993). → S. 165
- [184] L. V. Mikheev und M. E. Fisher, *Two-dimensional layered Ising models: Exact variational formulation and analysis*, Phys. Rev. B **49**, 378–402 (1994). → S. 165
- [185] M. Burgsmüller, *Thermodynamischer Casimir-Effekt an Lifshitz-Punkten*, Diplomarbeit, Universität Duisburg-Essen (2008). → S. 177
- [186] S.-K. Ma, *The renormalization group and the large n limit*, Journal of Mathematical Physics **15**, 1866–1891 (1974). → S. 178
- [187] E. Brézin und S. R. Wadia, Red., *The Large N Expansion in Quantum Field Theory and Statistical Physics: From Spin Systems to 2-dimensional Gravity*, World Scientific Pub. Co., Singapore 1993. → S. 179
- [188] R. Abe, *Expansion of a Critical Exponent in Inverse Powers of Spin Dimensionality*, Prog. Theor. Phys. **48**, 1414–1415 (1972). → S. 179
- [189] R. Abe, *Expansion of a Critical Exponent in Inverse Powers of Spin Dimensionality*, Prog. Theor. Phys. **49**, 113–128 (1973). → S. 179
- [190] R. Abe und S. Hikami, *Critical Exponents and Scaling Relations in 1/n Expansion*, Progr. Theor. Phys. **49**, 442–452 (1973). → S. 179
- [191] K. Ohno und Y. Okabe, *The 1/n Expansion for the n-Vector Model in the Semi-Infinite Space*, Prog. Theor. Phys. **70**, 1226–1239 (1983). → S. 179
- [192] K. Ohno und Y. Okabe, *Surface critical exponents in the 1/n expansion*, Physics Letters A **95**, 41–43 (1983). → S. 179
- [193] K. Ohno und Y. Okabe, *The 1/n Expansion for the Extraordinary Transition of Semi-Infinite System*, Prog. Theor. Phys. **72**, 736–745 (1984). → S. 179
- [194] K. Ohno, Y. Okabe und R. Abe, *Anisotropic special transition of semi-infinite systems in the 1/n expansion*, Physics Letters A **107**, 41–44 (1985). → S. 179
- [195] R. Abe, *Critical Exponent η up to $1/n^2$ for the Three-Dimensional System with Short-Range Interaction*, Prog. Theor. Phys. **49**, 1877–1888 (1973). → S. 181

- [196] N. S. Desai, S. Peach und C. Franck, *Critical adsorption in the undersaturated regime*, Phys. Rev. E **52**, 4129–4133 (1995). → S. 185
- [197] E. Elizalde, *Ten Physical Applications of Spectral Zeta Functions*, Bd. m35 von *Lecture Notes in Physics*, Springer, Berlin-Heidelberg, Deutschland 1995. → S. 186
- [198] A. A. Saharian, *The generalized Abel-Plana formula. Applications to Bessel functions and Casimir effect* (2000), arXiv:hep-th/0002239. → S. 186
- [199] A. A. Saharian, *The generalized Abel-Plana formula with applications to Bessel functions and Casimir effect* (2007), arXiv:0708.1187. → S. 186
- [200] G. H. Hardy, *Divergent Series*, Clarendon Press, Oxford 1949. → S. 186
- [201] F. W. J. Olver, *Asymptotics and Special Functions*, A. K. Peters, Wellesley, MA 1997. → S. 186
- [202] G. Dahlquist, *On summation formulas due to Plana, Lindelöf and Abel, and related Gauss-Christoffel rules, I*, BIT Numerical Mathematics **37**, 256–295 (1997). → S. 186
- [203] G. Dahlquist, *On summation formulas due to Plana, Lindelöf and Abel, and related Gauss-Christoffel rules, II*, BIT Numerical Mathematics **37**, 804–832 (1997). → S. 186
- [204] G. Dahlquist, *On summation formulas due to Plana, Lindelöf and Abel, and related Gauss-Christoffel rules, III*, BIT Numerical Mathematics **39**, 51–78 (1999). → S. 186
- [205] F. W. Olver, D. W. Lozier, R. F. Boisvert und C. W. Clark, *NIST Handbook of Mathematical Functions*, Cambridge University Press, New York, NY, USA, 1. Aufl. 2010. → S. 190, 197
- [206] L. Lewin, *Polylogarithms and associated functions*, Elsevier North Holland. Inc., New York 1981. → S. 193
- [207] K. M. Case, *Singular Potentials*, Phys. Rev. **80**, 797–806 (1950). → S. 195
- [208] G. N. Watson, *A Treatise on the Theory of Bessel Functions*, Cambridge University Press, Cambridge, UK 1922. → S. 195
- [209] W. Kaplan, *Advanced Calculus*, Addison-Wesley, Reading, MA, 4. Aufl. 1991. → S. 195

- [210] S. Leseduarte und A. Romeo, *Zeta function of the Bessel operator on the negative real axis*, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 2483 (1994). → S. 196
- [211] S. B. Rutkevich. *unveröffentlicht*. → S. 196

Danksagung

Zum Gelingen dieser Arbeit haben einige Menschen wesentlich beigetragen. An dieser Stelle möchte ich mich bei diesen Personen bedanken.

An erster Stelle gilt mein Dank Herrn Prof. Dr. Hans Werner Diehl, der mir die Möglichkeit zur Anfertigung dieser Dissertation in seiner Arbeitsgruppe gab und sich als engagierter Betreuer hervortat. Er nahm sich stets Zeit für Diskussionen und ließ mich so an seinem Wissen teilhaben.

Dr. Alfred Hucht möchte ich für die zahlreichen Diskussionen über fachbezogene und fachfremde Themen sowie die gute Zusammenarbeit bei der Durchführung der numerischen Rechnungen und Auswertung der Daten danken.

Ein besonderer Dank gebührt auch Bärbel Rehse, Michael Schmidt und Sophia Schmidt für das unermüdliche Korrekturlesen der Arbeit.

Für die gute Arbeitsatmosphäre und zahlreiche interessante Diskussionen danke ich den aktuellen und ehemaligen Mitarbeitern der Arbeitsgruppe Diehl. Insbesondere gilt mein Dank Matthias Burgsmüller für die nette Gesellschaft und Zusammenarbeit während des gesamten Studiums bis heute. Zudem seien Dr. Sergei Rutkevich, Stanko Petković, Dr. Daniel Grüneberg und Denis Comtesse dankend erwähnt.

Meiner Freundin Claudia Busch und meiner Familie danke ich schließlich dafür, dass sie mich stets in jeglicher Hinsicht unterstützt haben und mir so die Kraft zur Fertigstellung der Arbeit gegeben haben.

