

**Einfluss van-der-Waals-artiger
Wechselwirkungen auf den thermodynamischen
Casimir-Effekt**

Vom Fachbereich Physik der Universität Duisburg-Essen
(Campus Duisburg)

zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften

Dr. rer. nat.
genehmigte Dissertation

von

Daniel Grüneberg
aus Bochum

Duisburg, im Februar 2008

1. Gutachter: Prof. Dr. Hans Werner Diehl
2. Gutachter: Prof. Dr. Lothar Schäfer

Tag der mündlichen Prüfung: 26. Mai 2008

Zusammenfassung

Wird ein makroskopisches System, das im thermodynamischen Limes einen Phasenübergang zweiter Ordnung aufweist, in seiner räumlichen Ausdehnung beschränkt, so kann dies — wenn sich das System am oder in der Umgebung seines kritischen Punktes befindet — langreichweitige effektive Kräfte hervorrufen. Der Mechanismus, der der Entstehung dieser Kräfte zugrunde liegt, wird als thermodynamischer Casimir-Effekt bezeichnet, dessen experimenteller Nachweis erst Ende der 1990er Jahre gelang. Bei seiner experimentellen Realisierung spielen Flüssigkeiten und die darin auftretenden Phasenübergänge zweiter Ordnung eine wichtige Rolle, wie zum Beispiel der Übergang zur Suprafluidität in ^4He und auch der flüssig-gasförmig Übergang in einfachen Flüssigkeiten. Bereits in früheren theoretischen Arbeiten konnte dabei qualitativ gezeigt werden, dass die in Flüssigkeiten vorhandenen langreichweitigen van der Waals-Wechselwirkungen Auswirkungen auf den thermodynamischen Casimir-Effekt haben, obgleich sie das führende kritische Verhalten des Systems nicht beeinflussen. Aus ihnen gehen lediglich Korrekturen hervor, die jedoch in Abhängigkeit von Parametern wie der Temperatur und auch den Längenskalen, die die räumliche Beschränkung des Systems charakterisieren, in einem gewissen Regime das Verhalten der thermodynamischen Casimir-Kraft in führender Ordnung bestimmen. Die qualitativen und quantitativen Unterschiede, die sich daraus im Vergleich zu Systemen mit rein kurzreichweitigen Wechselwirkungen ergeben, werden in dieser Arbeit untersucht. Dazu werden d -dimensionale $O(n)$ -symmetrische Modelle mit $L \times \infty^{d-1}$ Filmgeometrie und periodischen Randbedingungen betrachtet, und unter Beschränkung auf den Temperaturbereich bei und oberhalb der Übergangstemperatur ($T \geq T_{c,\infty}$) die thermodynamische Casimir-Kraft und ihre führenden Korrekturen hergeleitet. Zugrunde gelegt wird dabei eine isotrope langreichweitige Wechselwirkung, die für große Abstände x asymptotisch proportional zu $x^{-(d+\sigma)}$ abfällt, wobei der Wert des Parameters σ auf das Intervall $2 < \sigma < 4$ beschränkt ist. Um den Limes $n \rightarrow \infty$ zu behandeln, wird ein hierzu äquivalentes exakt lösbares sphärisches Modell aufgestellt und unter Beschränkung auf $2 < d < 4$ Dimensionen exakte Ergebnisse für die thermodynamische Casimir-Kraft und ihre führenden Korrekturen hergeleitet. Der Fall $n < \infty$, der in $2 < d < 4$ Dimensionen keine exakten Lösungen gestattet, wird mit Hilfe eines feldtheoretischen ϕ^4 -Modells beschrieben. Die freie Energie dieses Modells wird dabei im Rahmen der renormierungsgruppenverbesserten Störungstheorie in Zweischleifenordnung berechnet, und hieraus die thermodynamische Casimir-Kraft und ihre führenden Korrekturen abgeleitet.

Anhand beider Modelle wird heraus gestellt, dass die thermodynamische Casimir-Kraft in Anwesenheit der langreichweitigen Wechselwirkung im Temperaturbereich $T > T_{c,\infty}$ auf großen Längenskalen durch einen algebraischen Abfall $\sim L^{-(d+\sigma)}$ gekennzeichnet ist, während sie im rein kurzreichweitigen Fall auf der Skala der Korrelationslänge exponentiell abfällt. Ein Vergleich der störungstheoretischen Resultate für den rein kurzreichweitigen Fall mit Monte Carlo-Ergebnissen für das dreidimensionale Ising- und XY-Modell ergibt eine gute Übereinstimmung.

Summary

The spatial confinement of critical and near-critical order parameter fluctuations in a system undergoing a second-order bulk phase transition may cause long-range effective forces. This is the so-called thermodynamic Casimir effect, which has been verified experimentally for the first time at the end of the 1990ies. Experimentally relevant systems in which the occurrence of thermodynamic Casimir forces can be observed, are critical fluids such as ^4He near the lambda transition and simple fluids near their liquid-vapor critical points. Previous theoretical studies have shown that long-range van der Waals forces — being always present in fluids — do affect the thermodynamic Casimir effect, although their presence does not alter the leading critical behavior, i.e. they leave the critical exponents unchanged. Instead they give rise to corrections which in a particular regime of temperatures and values of other parameters, such as characteristic macroscopic length scales of the spatial confinement, become dominant and thus determine the thermodynamic Casimir force to leading order. Interactions of this kind are called subleading long-range interactions. To study how the behavior of the thermodynamic Casimir force changes qualitatively and quantitatively due to the presence of such interactions — compared to systems with purely short-range interactions — is the aim of this work.

Considering d -dimensional models belonging to the universality class of the $O(n)$ -symmetrical systems, the thermodynamic Casimir force and its leading corrections are derived for temperatures at and above the transition temperature ($T \geq T_{c,\infty}$). The underlying pair potential is assumed to be isotropic and long-ranged, decaying asymptotically proportional to $x^{-(d+\sigma)}$ for large separations x , where the value of the parameter σ is restricted to the interval $2 < \sigma < 4$. By solving an appropriate spherical model in $2 < d < 4$ dimensions, which in the case of periodic boundary conditions and translationally invariant pair potentials is equivalent to the ($n \rightarrow \infty$)-limit of the $O(n)$ -model, exact results for the thermodynamic Casimir force and its leading corrections are obtained. To study the case $n < \infty$, which in $2 < d < 4$ dimensions does not admit exact solutions, a field-theoretical ϕ^4 -model is considered. Employing renormalization-group improved perturbation theory in $d = 4 - \epsilon$ bulk dimensions, the thermodynamic Casimir force and its leading corrections are evaluated to two-loop order.

It is shown that both in the spherical model and in the $O(n)$ -symmetrical case with $n < \infty$ to two-loop order, the thermodynamic Casimir force in the presence of the long-range interaction decays algebraically $\sim L^{-(d+\sigma)}$ at fixed temperature $T > T_{c,\infty}$ on sufficiently large length scales. This behavior strongly contrast the case of purely short-range interactions, in which the thermodynamic Casimir force is known to decay exponentially on the scale of the correlation length. The two-loop field-theoretical results for the purely short-range case are compared to Monte Carlo results for the three-dimensional Ising and XY model, and found to be in good agreement.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	iii
Summary	v
1 Einführung und Grundlagen	1
1.1 Bereits veröffentlichte Teile dieser Arbeit	5
1.2 Der Casimir-Effekt in der Quantenelektrodynamik	6
1.3 Der thermodynamische Casimir-Effekt	8
1.4 Skalenverhalten der Casimir-Kraft und langreichweitige Wechselwirkungen	14
2 Exakte Ergebnisse für das <i>Mean</i> -Sphärische-Modell	23
2.1 Definition des Modells	24
2.2 Eigenschaften des Paarpotentials	25
2.3 Freie Energie und Zustandsgleichung	27
2.4 Lösung der Zustandsgleichung	30
2.5 Skalenverhalten der freien Energie, Exzess-Freien-Energie und Casimir-Kraft	41
3 Renormierungsgruppenverbesserte Störungstheorie für das ϕ^4 -Modell	60
3.1 Definition des Modells	63
3.2 Freie Energie und Zweipunktkorrelationsfunktion	65
3.3 Skalenverhalten der freien Energie, Exzess-Freien-Energie und Casimir-Kraft	75
3.4 Vergleich mit Monte Carlo-Simulationsdaten	106
3.5 Vergleich mit Ergebnissen zum <i>Mean</i> -Sphärischen-Modell	109
4 Zusammenfassung und abschließende Diskussion	112
A Anhang	115
A.1 Fouriertransformation des Paarpotentials	115
A.2 Berechnung der Modensummen $W_{d,\Omega}(r L)$ und $U_{d,\Omega}(r L)$	118
A.3 Berechnung des freien Propagators $\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} \overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{b})$	122
A.4 Berechnung der Funktionen $Q_{d,\sigma}(y)$ und $R_{d,\sigma}(y)$	124

Literaturverzeichnis	138
Abbildungsverzeichnis	148
Tabellenverzeichnis	149
Danksagung	151

1 Einführung und Grundlagen

Zwischen makroskopischen Objekten können verschiedene langreichweitige Kräfte auftreten, deren Ursprung sich in den physikalischen Eigenschaften dieser Objekte begründet. Hierzu zählt beispielsweise die Gravitationskraft und die durch elektrische Ladungen der Objekte hervorgerufene Coulomb-Kraft, und auch van der Waals-Kräfte, die aus spontanen Ladungsfluktuationen innerhalb der Objekte hervorgehen. Effektive langreichweitige Kräfte können jedoch auch durch die Fluktuationen eines Mediums oder Feldes, das diese Objekte umgibt, hervorgerufen werden. Ein wichtiges Beispiel hierfür ist der nach seinem Entdecker H. B. G. Casimir benannte Casimir-Effekt [1], der seinen Ursprung in den Vakuumfluktuationen des elektromagnetischen Feldes hat. Dieser Effekt, dessen experimenteller Nachweis mit hoher Genauigkeit erst in jüngster Zeit erbracht werden konnte [2–4], äußert sich in einer anziehenden und langreichweitigen Kraft, der sogenannten Casimir-Kraft, zwischen zwei im elektromagnetischen Vakuum befindlichen planparallelen und perfekt elektrisch leitfähigen Platten.

Weitere Beispiele für Kräfte, die durch Fluktuationen induziert werden und der Casimir-Kraft in der Quantenelektrodynamik ähnlich sind, finden sich in der Physik der kritischen Phänomene. Diese Kräfte werden durch Goldstone-Moden in Systemen mit spontan gebrochener kontinuierlicher Symmetrie und auch durch thermische Fluktuationen am kritischen Punkt eines Phasenübergangs zweiter Ordnung hervorgerufen [5–8]. Da Goldstone-Moden masselos sind, induzieren sie langreichweitige Kräfte. Dasselbe gilt für thermische Fluktuationen am kritischen Punkt eines Phasenübergangs zweiter Ordnung, aufgrund der dort auftretenden Divergenz der Korrelationslänge. Dieser Effekt wird als thermodynamischer Casimir-Effekt bezeichnet, und ist erstmals Ende der 1990er Jahre im Rahmen von Messungen der Temperaturabhängigkeit der Dicke von suprafluiden ^4He -Filmen in der Umgebung des Lambda-Übergangs experimentell nachgewiesen worden [9]. Er ist in makroskopischen Systemen zu beobachten, die einen solchen Phasenübergang aufweisen, in ihrer räumlichen Ausdehnung jedoch durch Grenzflächen oder andere in das System eingebrachte makroskopische Objekte beschränkt sind — beispielsweise durch zwei im Abstand L befindliche planparallele Platten, wie in Casimirs ursprünglicher Anordnung. Die freie Energie eines solchen Systems, zum Beispiel eines d -dimensionalen n -Vektor-Magneten oder einer Flüssigkeit, weist eine explizite Abhängigkeit vom Plattenabstand L auf. Diese L -Abhängigkeit impliziert eine zwi-

schen den Platten wirkende Kraft, die sogenannte thermodynamische Casimir-Kraft. Befindet sich das System an seinem kritischen Punkt, der in Abwesenheit eines symmetriebrechenden äußeren Feldes durch den kritischen Wert der Temperatur $T_{c,\infty}$ gekennzeichnet ist, so ist diese Kraft langreichweitig und zerfällt algebraisch $\sim (d-1)\Delta_C L^{-d}$ auf großen Längenskalen L . Die sogenannte Casimir-Amplitude Δ_C [5] ist dabei eine universelle Größe. Sie ist unabhängig von mikroskopischen Details des Systems, und wird lediglich durch dessen globale Eigenschaften festgelegt, wie zum Beispiel der Universalitätsklasse des auftretenden Phasenübergangs und Randbedingungen, denen der Ordnungsparameter an den das System begrenzenden Oberflächen unterliegt.

Abseits des kritischen Punktes jedoch, im Temperaturbereich $T > T_{c,\infty}$, ist die thermodynamische Casimir-Kraft durch einen auf der Skala der Korrelationslänge exponentiellen Zerfall gekennzeichnet. Dies gilt jedoch nur, wenn im System keine langreichweitigen Wechselwirkungen vorhanden sind. In Flüssigkeiten, die bei der experimentellen Realisierung des thermodynamischen Casimir-Effekts eine wichtige Rolle spielen [10, 11], ist dies jedoch nicht der Fall. Hier treten langreichweitige Dispersionkräfte auf, die ihren Ursprung in spontanen Fluktuationen der Ladungsdichte in den Atomen beziehungsweise Molekülen der Flüssigkeit haben. Dazu zählen die nicht-retardierten und retardierten van der Waals-Wechselwirkungen [12, 13], deren Paarpotentiale, die als Wechselwirkungsenergie zweier Atome beziehungsweise Moleküle in der Flüssigkeit aufzufassen sind, in drei Dimensionen für große Abstände x in führender Ordnung $\sim x^{-6}$ beziehungsweise $\sim x^{-7}$ abfallen. Solche mit zunehmendem Abstand schnell abfallenden langreichweitigen Kräfte haben keinen Einfluss auf das führende kritische Verhalten. Sie sind irrelevant im Sinne der Renormierungsgruppentheorie, so dass aus ihnen lediglich Korrekturen zum führenden kritischen Verhalten hervorgehen (siehe z.B. [14]). Trotz ihrer Irrelevanz haben sie dennoch Auswirkungen auf die thermodynamische Casimir-Kraft. Sind solche langreichweitigen Wechselwirkungen, deren Paarpotentiale für große Abstände algebraisch in x abfallen, vorhanden, so induzieren diese auch fernab des kritischen Punktes langreichweitige Korrelationen innerhalb des Systems [15, 16]. Diese Korrelationen zerfallen im Grenzfall $x \rightarrow \infty$ ebenfalls algebraisch im Abstand x , anstelle des im rein kurzreichweitigen Fall vorzufindenden exponentiellen Zerfalls (siehe z.B. [17, 18]). Ähnliche qualitative Unterschiede ergeben sich auch im Verhalten der thermodynamischen Casimir-Kraft. Die van-der-Waals-artigen Wechselwirkungen führen zu Beiträgen in der Casimir-Kraft, die auf großen Längenskalen algebraisch in L abfallen und zwar sowohl am kritischen Punkt als auch fernab davon. Diese Beiträge konkurrieren mit denen, die aus den kritischen Fluktuationen am und in der Umgebung des kritischen Punktes hervorgehen, und dominieren diese in hinreichend großem Abstand vom kritischen Punkt [14, 19–22]. Das Einsetzen dieses Regimes hängt dabei von L , der Temperatur und weiteren Parametern ab, wie zum Beispiel der Stärke der van-der-Waals-artigen Wechselwirkung.

Diese Zusammenhänge und die sich daraus ergebenden Konsequenzen für das Verhalten der thermodynamischen Casimir-Kraft sind bislang nicht systematisch untersucht worden. Dies ist

das Ziel dieser Arbeit. Dabei erscheint es naheliegend, den Hauptaugenmerk auf Flüssigkeiten zu richten, die für den thermodynamischen Casimir-Effekt die wohl wichtigste Klasse von Systemen darstellen. Das Verhalten einer einfachen Flüssigkeit an ihrem flüssig-gasförmig Phasenübergang wird durch einen einkomponentigen Ordnungsparameter beschrieben, während der Ordnungsparameter des Übergangs zur Suprafluidität in ${}^4\text{He}$ zweikomponentig ist (siehe z.B. [10]). Statt sich jedoch auf diese Fälle zu beschränken, werden in dieser Arbeit d -dimensionale Systeme mit im Allgemeinen n -komponentigen Ordnungsparametern betrachtet, die auf $O(n)$ -symmetrische Modelle abgebildet werden können. Zugrundegelegt werden dabei isotrope langreichweitige Paarpotentiale $v^{(\sigma)}(\mathbf{x})$, die sich asymptotisch für große Abstände $x \equiv |\mathbf{x}|$ gemäß

$$v^{(\sigma)}(\mathbf{x}) \underset{x \rightarrow \infty}{\approx} \text{const.} \times x^{-(d+\sigma)} \quad (1.1)$$

verhalten, mit Werten des Parameters σ aus dem Intervall $2 < \sigma < 4$. Das Volumen der betrachteten Systeme sei auf einen Film der Dicke L mit $(d-1)$ -dimensionaler Querschnittsfläche $A \rightarrow \infty$ beschränkt, wobei entlang der Normalenrichtung zur Filmoberfläche periodische Randbedingungen angenommen werden.

Aufgrund der periodischen Randbedingungen gereichen die in in dieser Arbeit betrachteten $O(n)$ -symmetrischen Modelle nicht zu einer realistischen Beschreibung kritischer Flüssigkeiten. Im Rahmen von einfachen klassischen Flüssigkeiten wird der Einfluss von Grenzflächen durch symmetriebrechende Oberflächenfelder modelliert¹, während das Verhalten des Ordnungsparameters an den Oberflächen suprafluider ${}^4\text{He}$ -Filme durch Dirichlet-Randbedingungen zu beschreiben ist (siehe z.B. [10, 24, 25]). Dennoch sind diese Modelle dazu geeignet, die Auswirkungen van-der-Waals-artiger Wechselwirkungen auf den thermodynamischen Casimir-Effekt zu untersuchen, die sich auch in realen Flüssigkeiten wiederfinden sollten. Ein Vorteil ist dabei, dass die Behandlung periodischer Randbedingungen in der Regel geringere mathematische Komplikationen mit sich bringt, als dies bei anderen Randbedingungen oder unter der Berücksichtigung von Oberflächenfeldern der Fall ist. Der Grenzfall $n \rightarrow \infty$ lässt sich dabei durch Betrachtung eines *Mean-Sphärischen-Modells* sogar exakt behandeln, da dieses exakt lösbares Modell im Fall translationsinvarianter Paarpotentiale und periodischer Randbedingungen äquivalent zum Limes $n \rightarrow \infty$ des $O(n)$ -symmetrischen Modells ist [26–28]. Für diesen Grenzfall werden in $2 < d < 4$ Dimensionen und unter Beschränkung auf den Temperaturbereich $T \geq T_{c,\infty}$ exakte Ergebnisse für die thermodynamische Casimir-Kraft angegeben, die im Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen in drei Dimensionen $d = \sigma = 3$ sogar in geschlossen-analytischer Form dargestellt werden können. Darüberhinaus wird anhand der exakten Ergebnisse das Zustandekommen

¹Neben den durch Oberflächenfelder beschreibbaren kurzreichweitigen Wechselwirkungen, treten in realen Flüssigkeiten zwischen den Atomen beziehungsweise Molekülen der Flüssigkeit und den Grenzflächen des Systems auch langreichweitige Kräfte auf. Hieraus resultieren zusätzliche irrelevante Korrekturen zur thermodynamischen Casimir-Kraft (siehe z.B. [23]).

logarithmischer Anomalien diskutiert, die im Fall $d + \sigma = 6$ bei den aus dem langreichweitigen Anteil des Paarpotentials resultierenden Korrekturen zur thermodynamischen Casimir-Kraft auftreten. Diese sind eine Besonderheit des Grenzfalles $n \rightarrow \infty$ und erstmals in Referenz [14] beobachtet worden.

Die exakten Resultate für das *Mean-Sphärische-Modell* sind in vielerlei Hinsicht nützlich. Zum einen sind exakt lösbare Modelle in der Theorie der kritischen Phänomene bereits für sich genommen interessante Studienobjekte. Zum anderen können die anhand der exakten Lösung gewonnenen Erkenntnisse auch hilfreich für die Untersuchung anderer, nicht exakt lösbarer Modelle im Rahmen approximativer Verfahren sein. Ein solches Verfahren findet auch im Folgenden Anwendung, um den Fall $n < \infty$ zu behandeln. Dazu wird ein feldtheoretisches ϕ^4 -Kontinuumsmodell mit n -komponentigem Ordnungsparameterfeld ϕ aufgestellt, und die thermodynamische Casimir-Kraft unter Beschränkung auf den Temperaturbereich $T \geq T_{c,\infty}$ im Rahmen der renormierungsgruppenverbesserten Störungstheorie in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen in Zweischleifenordnung hergeleitet. Dabei stößt man jedoch auf ein Problem, dessen Auswirkungen bereits in früheren feldtheoretischen Arbeiten über den thermodynamischen Casimir-Effekt in Erscheinung getreten sind [29, 30]. Die konventionelle renormierungsgruppenverbesserte Störungstheorie bricht im Fall endlicher Filmdicke $L < \infty$ oberhalb von Zweischleifenordnung am kritischen Punkt $T = T_{c,\infty}$ aufgrund von Infrarotdivergenzen zusammen, und zwar immer dann, wenn in Landau-Theorie bei $T = T_{c,\infty}$ eine Nullmode auftritt. Dies ist der Fall bei periodischen Randbedingungen und den sogenannten speziellen Randbedingungen [31, 32] an den Oberflächen des Films, und führt bereits in Zweischleifenordnung zu einem qualitativ falschen Verhalten der thermodynamischen Casimir-Kraft in der Umgebung des kritischen Punktes $T = T_{c,\infty}$.

Wie in einer Arbeit von Diehl, Grüneberg und Shpot [33] gezeigt, lässt sich der Zusammenbruch der Störungstheorie durch eine Umordnung vermeiden, bei der die Nullmode abgespalten, und für diese durch Ausintegration der übrigen Moden eine effektive Theorie aufgestellt wird. Diese effektive Theorie wird für das langreichweitige ϕ^4 -Modell hergeleitet und in Zweischleifenordnung ausgewertet. Mit den dabei erhaltenen Resultaten, die gleichermaßen relevant für den thermodynamischen Casimir-Effekt in $O(n)$ -symmetrischen Systemen mit rein kurzreichweitigen Wechselwirkungen sind, können im Hinblick auf das Verhalten der thermodynamischen Casimir-Kraft in der Umgebung des kritischen Punktes $T = T_{c,\infty}$ deutliche Verbesserungen erzielt werden.

Die vorliegende Arbeit ist nun folgendermaßen aufgebaut: Um die thermodynamische Casimir-Kraft im Grenzfall $n \rightarrow \infty$ zu berechnen, wird in Kapitel 2 das *Mean-Sphärische-Modell* eingeführt und seine exakte Lösung für eine langreichweitige Wechselwirkung der Form (1.1) in $2 < d < 4$ Dimensionen hergeleitet. Das daran anschließende Kapitel 3 befasst sich mit dem allgemeinen Fall eines n -komponentigen Ordnungsparameters. Dazu wird zunächst ein geeignetes langreichweitiges ϕ^4 -Modell aufgestellt und die thermodynamische Casimir-Kraft im Rahmen der renormierungsgruppenverbesserten Störungstheorie in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen unter Verwendung

der in [33] vorgeschlagenen Umordnung in Zweischleifenordnung berechnet. Die störungstheoretischen Resultate werden sowohl mit Monte Carlo-Simulationsdaten für das dreidimensionale Ising- und XY-Modell mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen [34], als auch — im Rahmen der Epsilon-Entwicklung in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen — mit den für das *Mean-Sphärische-Modell* erhaltenen exakten Ergebnissen verglichen. In den Anhängen A.1–A.4 sind die ausführlichen Berechnungen wichtiger, in dieser Arbeit auftretender Ausdrücke und Funktionen zusammengestellt. Die verbleibenden Abschnitte dieses ersten Kapitels widmen sich jedoch zunächst dem Casimir-Effekt in der Quantenelektrodynamik sowie dem thermodynamischen Casimir-Effekt und einigen wesentlichen Grundlagen wie der Definition der thermodynamischen Casimir-Kraft, die auch im weiteren Verlauf dieser Arbeit von Bedeutung sind. Zuvor sollen jedoch einige in dieser Arbeit gebräuchliche Notationen eingeführt werden. Dies sind die Symbole \approx und \sim , die im Zusammenhang mit der Diskussion des asymptotischen Verhaltens mathematischer Ausdrücke in gewissen Limiten auftreten und zur Kennzeichnung *asymptotischer Gleichheit* beziehungsweise *asymptotischer Proportionalität* verwendet werden. Dabei gelte für zwei Funktionen $f(x)$ und $g(x)$ im Fall asymptotischer Gleichheit im Limes $x \rightarrow x_0$,

$$f(x) \underset{x \rightarrow x_0}{\approx} g(x) \quad \Leftrightarrow \quad \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x)}{g(x)} = 1 \quad (1.2)$$

und im Fall asymptotischer Proportionalität,

$$f(x) \underset{x \rightarrow x_0}{\sim} g(x) \quad \Leftrightarrow \quad \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x)}{g(x)} = \text{const.} \quad (1.3)$$

Ferner stehe das Symbol \propto für Proportionalität, und es gelte somit

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

Die im Folgenden ebenfalls verwendeten Symbole $O(\dots)$ und $o(\dots)$ haben ihre gängige, auf Bachmann [35] und Landau [36] zurückgehende Bedeutung (siehe z.B. § 2.1.4 9. in [37]).

Zur Durchführung der im Rahmen dieser Arbeit angestellten analytischen und numerischen Berechnungen wurde das Computeralgebra-Programm Mathematica [38] eingesetzt.

1.1 Bereits veröffentlichte Teile dieser Arbeit

Ein Großteil der Ergebnisse der vorliegenden Arbeit ist bereits veröffentlicht [33, 39, 40]. Abschnitt 1.4 des Kapitels 1, das gesamte Kapitel 2, die Anhänge A.1 und A.2 sowie Teile des Anhangs A.4 sind in Referenz [39] enthalten. Auszüge des Kapitels 3 und der Anhänge A.3 und A.4 sind in den Referenzen [33, 40] publiziert.

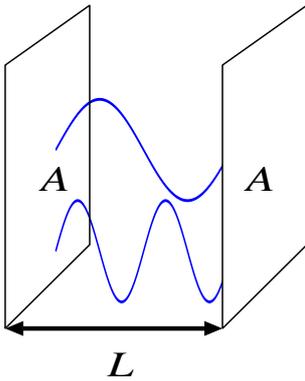


Abbildung 1: Schematische Darstellung der von Casimir betrachteten Anordnung zweier planparalleler Platten im elektromagnetischen Vakuum im Abstand L . Aufgrund ihrer perfekten elektrischen Leitfähigkeit, können im Zwischenraum der Platten nur die angedeuteten diskret verteilten Moden der elektrischen Feldkomponente mit Knoten an deren Oberflächen existieren.

1.2 Der Casimir-Effekt in der Quantenelektrodynamik

Der Casimir-Effekt ist benannt nach dem niederländischen Physiker Hendrik B. G. Casimir. In einer im Jahre 1948 veröffentlichten theoretischen Arbeit [1] betrachtete er eine Anordnung zweier planparalleler Platten im Abstand L , die sich im elektromagnetischen Vakuum befinden (siehe Abbildung 1). Er nahm weiterhin an, dass die Platten elektrisch ungeladen und perfekt elektrisch leitfähig seien. Sie stellen somit Randbedingungen für das elektromagnetische Feld dar, da das elektrische Feld in den Platten aufgrund ihrer elektrischen Leitfähigkeit verschwindet und sich seine Parallelkomponente an der Grenzfläche stetig verhält. Im Zwischenraum der Platten können daher nur die Moden des zunächst kontinuierlichen Anregungsspektrums der elektromagnetischen Vakuumfluktuationen existieren, die diesen Randbedingungen genügen. Dabei gilt für die erlaubten Moden senkrecht zu den Plattenoberflächen $k_{\perp} = n\pi/L$ mit $n \in \mathbb{N}$, während die Moden parallel dazu $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_{\parallel}^{(1)}, k_{\parallel}^{(2)})$ nach wie vor kontinuierlich verteilt sind. Diese Modifikation des elektromagnetischen Modenspektrums führt — als zentrales Ergebnis von Casimirs Berechnungen — zu einer anziehenden und langreichweitigen Kraft zwischen den Platten, der Casimir-Kraft $\mathcal{F}_C(L)$, die pro Flächeneinheit der Plattenoberfläche A gegeben ist durch [1]

$$\frac{\mathcal{F}_C(L)}{A} = -\frac{\pi^2}{240} \frac{\hbar c}{L^4}. \quad (1.5)$$

Bereits im Jahrzehnt nach Casimirs Entdeckung sind erste Messungen durchgeführt worden, mit dem Ziel, den experimentellen Nachweis des Casimir-Effekts zu erbringen [41–43]. Die in diesen Experimenten erzielte Genauigkeit reichte jedoch nicht aus, um den von Casimir erhaltenen Ausdruck (1.5) und dabei insbesondere den Abfall der Casimir-Kraft mit der vierten inversen Potenz des Plattenabstandes zu verifizieren. Ein Durchbruch, die erste quantitative Bestätigung von Casimirs Vorhersage, gelang erst nahezu vierzig Jahre später mit den von Lamoreaux [2] durchgeführten Messungen. Wie zuvor schon van Blokland und Overbeek [44], verwendete Lamoreaux jedoch nicht die von Casimir ursprünglich betrachtete Zweiplattengeometrie sondern eine aus einer beschichteten sphärischen Linse und einer Platte bestehende Anordnung. Mit dieser umgeht man die im Experiment bei der Zweiplattengeometrie auftretende Schwierigkeit, die

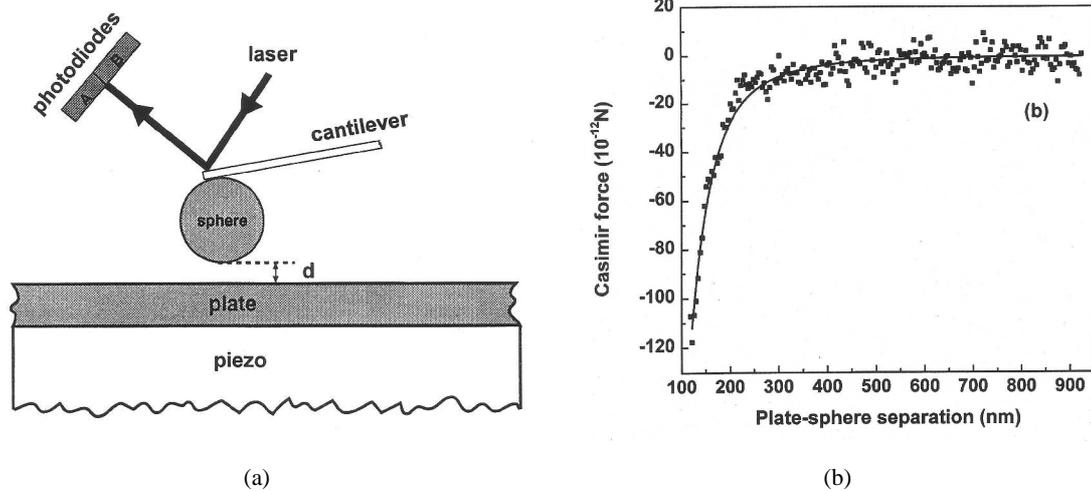


Abbildung 2: Schematische Darstellung des Versuchsaufbaus im Rahmen der von Mohideen und Roy [3] vorgenommenen Messungen der Casimir-Kraft (a). Auftragung der Casimir-Kraft in pN über dem Normalabstand zwischen Platte und sphärischem Probekörper in nm (b). Die Datenpunkte entsprechen den gemessenen Werten und die durchgezogene Linie beschreibt die theoretische Abstandsabhängigkeit der Casimir-Kraft. Beide Abbildungen sind aus Referenz [3] entnommen.

im Abstand weniger μm befindlichen Platten exakt parallel auszurichten. Um die für Probekörper dieser Geometrie erhaltenen Messergebnisse mit dem von Casimir angegebenen Ausdruck (1.5) vergleichen zu können, muss dieser Ausdruck modifiziert werden, da er die Casimir-Kraft zwischen planparallelen Platten angibt. Lamoreaux verwendete dazu die sogenannte *Proximity-Force-Approximation* [45]. Im Rahmen dieser Näherung ergibt sich die Casimir-Kraft zwischen einer im Abstand d befindlichen Platte und einem sphärischen Probekörper mit Krümmungsradius $R \gg d$ zu $-2\pi R \int_{\infty}^d dL \mathcal{F}_C(L)$ mit $\mathcal{F}_C(L)$ aus Gleichung (1.5). Lamoreaux verglich die auf diesem Wege erhaltenen theoretischen Werte für die Casimir-Kraft mit seinen Messwerten, und fand dabei eine lediglich fünfprozentige Abweichung.

Eine der bislang größten Genauigkeiten bei der experimentellen Untersuchung des Casimir-Effekts wurde in den von Mohideen und Roy [3] durchgeführten Versuchen erreicht. Zur Messung der Casimir-Kraft zwischen einer Polystyrol-Kugel ($\varnothing 196 \mu\text{m}$) und einem Saphir-Plättchen, beide Probekörper metallisch beschichtet, befestigten sie die Polystyrol-Kugel am Cantilever eines Rasterkraftmikroskops (AFM) (siehe Abbildung 2(a)). Den Abstand der beiden Objekte, der im Rahmen ihrer Messungen 0.1 bis 0.9 μm betrug, variierten sie mit Hilfe eines piezoelektrischen Elements, auf das das unterhalb der Polystyrol-Kugel befindliche Saphir-Plättchen aufgebracht war. Die aus der Casimir-Kraft resultierende Auslenkung des Cantilevers wurde mittels eines daran reflektierten und in einem Photodiodenarray detektierten Laserstrahls ermittelt. Über den für den Cantilever zuvor bestimmten Zusammenhang zwischen Auslenkung und wirkender

Kraft, konnte die Casimir-Kraft errechnet werden. Die im Rahmen ihrer Messungen erhaltenen Daten verglichen Mohideen und Roy unter Verwendung der *Proximity-Force-Approximation* mit den theoretischen Werten gemäß Gleichung (1.5) und Korrekturen dazu, die — als Erweiterung Casimirs ursprünglicher Annahmen — endliche Temperaturen sowie die Oberflächenrauigkeit und nicht perfekte elektrische Leitfähigkeit der Probekörper berücksichtigen. Eine Auftragung der Messwerte zusammen mit der unter Berücksichtigung dieser Korrekturen erhaltenen theoretischen Abstandsabhängigkeit der Casimir-Kraft, ist in Abbildung 2(b) dargestellt. Die dabei auftretenden Abweichungen betragen, in Abhängigkeit vom Abstand der Probekörper, lediglich ein bis zwei Prozent und bestätigen damit Casimirs Vorhersage in beeindruckender Weise.

Auch nach diesen richtungsweisenden Experimenten wurden zahlreiche weitere Messungen von Casimir-Kräften unter Verwendung modernster experimentalphysikalischer Methoden vorgenommen, sowohl für die von Casimir ursprünglich betrachtete Zweiplattengeometrie [46] als auch andere Geometrien, wie beispielsweise zylindrische Probekörper [47]. Fragestellungen, die die Abhängigkeit des Casimir-Effekts von Geometrie, Anordnung und Beschaffenheit der Probekörper — beispielsweise ihren dielektrischen Eigenschaften — betreffen, sind nach wie vor Gegenstand aktueller Forschung. Einen Überblick hierüber geben die Übersichtsartikel von Bordag *et al.* [48] und Milton [49] sowie die Referenzen [50, 51].

1.3 Der thermodynamische Casimir-Effekt

Der Mechanismus, der hinter dem im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen Casimir-Effekt in der Quantenelektrodynamik steht, ist allgemeingültig und kann generell in Systemen auftreten, in denen ein fluktuierendes und langreichweitig korreliertes Medium in seiner räumlichen Ausdehnung beschränkt wird. Ein weiteres Beispiel hierfür, das diese Voraussetzungen erfüllt, sind die thermischen Fluktuationen an Phasenübergängen zweiter Ordnung, was erstmals in einer theoretischen Arbeit von Fisher und de Gennes [5] aus dem Jahre 1978 gezeigt wurde. Der kritische Punkt eines solchen Phasenübergangs ist gekennzeichnet durch eine Divergenz der Korrelationslänge und damit verbundenen langreichweitigen Korrelationen innerhalb des Systems. Eine räumliche Beschränkung ändert das Modenspektrum der Ordnungsparameterfluktuationen, und kann — in vollkommener Analogie zum Casimir-Effekt in der Quantenelektrodynamik — langreichweitige Kräfte hervorrufen. Dieser Effekt wird in der Literatur als thermodynamischer Casimir-Effekt bezeichnet, und soll nun exemplarisch anhand des auch in dieser Arbeit betrachteten Falls der Filmgeometrie erörtert werden. Dazu wird ein thermodynamisches System, wie zum Beispiel ein n -Vektor-Magnet, betrachtet, das sich im thermodynamischen Gleichgewicht mit einem Wärmereservoir der Temperatur T befindet. Beschränkt man dessen räumliche Ausdehnung auf einen Film der Dicke L , so wird die freie Energie $F(T)$ des Systems, die sämtliche Informationen über dessen statistische Eigenschaften enthält und in die auch die Systemgeometrie

eingeht, explizit L -abhängig. Sie lässt sich dabei im hier betrachteten Fall der Filmgeometrie in vier Anteile aufspalten [52]. Diese Aufspaltung lautet

$$\lim_{A \rightarrow \infty} \frac{F(T)}{Ak_B T} = L f_{\text{bk}}(T) + f_{s,1}(T) + f_{s,2}(T) + \delta f_L(T) \quad (1.6)$$

pro Flächeneinheit A und $k_B T$ im thermodynamischen Limes $A \rightarrow \infty$ bezüglich der lateralen Ausdehnung des Films. Dabei entspricht $f_{\text{bk}}(T)$ der reduzierten freien Energie pro Volumeneinheit des *Bulk*-Systems, und $f_{s,1}(T) + f_{s,2}(T)$ sind die Exzessbeiträge der beiden das System begrenzenden Oberflächen zur freien Energie. Der vierte in Gleichung (1.6) auftretende Term $\delta f_L(T)$ ist ein *Finite-Size*-Anteil, der im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ verschwindet. Das Auftreten dieses Terms ist der Ursprung des thermodynamischen Casimir-Effekts, und hierdurch definiert ergibt sich die thermodynamische Casimir-Kraft pro Flächeneinheit der Filmoberfläche zu

$$\mathcal{F}_C(T, L) = -k_B T \frac{\partial \delta f_L(T)}{\partial L}. \quad (1.7)$$

Sie ist demnach als verallgemeinerte Kraft aufzufassen, die zur Filmdicke L konjugiert ist, und definitionsgemäß im Limes $L \rightarrow \infty$ verschwindet.

Interessiert man sich für das Verhalten der thermodynamischen Casimir-Kraft in der Umgebung des kritischen Punktes auf Längenskalen $L \gg a$, wobei a eine charakteristische mikroskopische Längenskala des Systems ist, lässt sich dies im Rahmen der Theorie des *Finite-Size-Scaling* [53, 54] beschreiben. Grundlage hierfür ist die auf M. E. Fisher [55] zurückgehende *Finite-Size*-Skalenhypothese. Diese besagt, dass das Skalenverhalten der verschiedenen thermodynamischen Größen im Regime $L, \xi_\infty \gg a$ durch den Wert des Quotienten L/ξ_∞ bestimmt wird, falls L die einzige charakteristische makroskopische Längenskala innerhalb des Systems ist. Dabei bezeichnet ξ_∞ die *Bulk*-Korrelationslänge, die über das zweite Moment der Zweipunktkorrelationsfunktion des Ordnungsparameters definiert werden kann [56], oder auch — als *wahre* Korrelationslänge — über die charakteristische Länge deren exponentiellen räumlichen Zerfalls in Systemen mit rein kurzreichweitigen Wechselwirkungen [17]. Die genaue Definition von ξ_∞ ist an dieser Stelle jedoch noch unerheblich.

Lässt man zunächst etwaige reguläre Hintergrundterme und im Sinne der Renormierungsgruppentheorie irrelevante Beiträge außer Acht, wird das Skalenverhalten der thermodynamischen Casimir-Kraft pro Flächeneinheit demgemäß durch eine *Finite-Size*-Skalenform [54, 57]

$$\frac{\mathcal{F}_C(T, L)}{k_B T} \approx L^{-d} \vartheta(L/\xi_\infty) \quad (1.8)$$

mit einer dimensionslosen und universellen *Finite-Size*-Skalenfunktion ϑ beschrieben. Diese ist unabhängig von mikroskopischen Details des Systems, und wird ausschließlich durch dessen globale Eigenschaften bestimmt. Hierzu zählt die *Bulk*-Universalitätsklasse, die durch die Dimensionalität d , die Reichweite der im System vorhandenen Wechselwirkungen im Sinne von Langreichweitigkeit und Kurzreichweitigkeit, und die Anzahl n der Komponenten des Ordnungsparameters

festgelegt wird. Einfluss auf universelle Größen haben auch die Randbedingungen, denen der Ordnungsparameter an den Grenzflächen des Systems unterliegt. Dabei zeigt sich insbesondere, dass die thermodynamische Casimir-Kraft im Fall symmetrischer Randbedingungen attraktiv ist, während bei ungleichen Randbedingungen eine repulsive thermodynamische Casimir-Kraft resultiert (siehe z.B. § 5.3.1 in [24] und [7]).

Nähert sich die Temperatur ihrem Wert $T_{c,\infty}$ am kritischen Punkt des *Bulk*-Systems, so wächst die *Bulk*-Korrelationslänge ξ_∞ an. Am kritischen Punkt divergiert ξ_∞ schließlich, so dass das Verhältnis L/ξ_∞ bei konstant gehaltenem Wert der Filmdicke L gegen null geht. Der Wert, den die *Finite-Size*-Skalenfunktion der thermodynamischen Casimir-Kraft in diesem Grenzfall annimmt, wird konventionsgemäß als

$$\vartheta(0) \equiv (d-1)\Delta_C \quad (1.9)$$

notiert, und definiert die sogenannte Casimir-Amplitude Δ_C [5]. Diese ist, genau wie die *Finite-Size*-Skalenfunktion ϑ , eine universelle Größe. Sie ist dabei eng verknüpft mit dem Wert der thermodynamischen Casimir-Kraft am kritischen Punkt — der sogenannten kritischen Casimir-Kraft. Diese ergibt sich gemäß den Gleichungen (1.8) und (1.9) pro Flächeneinheit zu

$$\frac{\mathcal{F}_C(T_{c,\infty}, L)}{k_B T_{c,\infty}} \underset{L \rightarrow \infty}{\approx} (d-1)\Delta_C L^{-d}. \quad (1.10)$$

Der thermodynamische Casimir-Effekt war — seit der grundlegenden Arbeit von Fisher und de Gennes — Gegenstand zahlreicher theoretischer Arbeiten. Er ist im Rahmen von feldtheoretischer Renormierungsgruppentheorie [29, 30, 58–62], konformer Feldtheorie [63], anhand von exakt löslichen Modellen [21, 24, 57, 64, 65] und Monte Carlo-Simulationen [25, 34, 65–68] untersucht worden. Auch konnten seit Ende der 1990er Jahre thermodynamische Casimir-Kräfte in einer Vielzahl von Experimenten gemessen werden [9, 11, 69–76]. Der erste experimentelle Nachweis des thermodynamischen Casimir-Effekts geht dabei auf Garcia und Chan [9] zurück. Sie untersuchten die Dicke von suprafluiden ^4He -Filmen in der Umgebung der Übergangstemperatur T_λ . Der in Helium bei tiefen Temperaturen auftretende Übergang zur Suprafluidität ist ein Phasenübergang zweiter Ordnung. Nähert man sich von tiefen Temperaturen $T < T_\lambda$ her kommend der Übergangstemperatur T_λ , nimmt der Anteil suprafluiden Heliums zugunsten des Anteils normalfluiden Heliums stetig ab, und verschwindet schließlich, wenn $T \geq T_\lambda$.

Im Rahmen ihrer Messungen machten sich Garcia und Chan zunutze, dass flüssiges Helium aufgrund attraktiver van der Waals-Wechselwirkungen auf metallischen Oberflächen dünne Filme bildet. Der von ihnen verwendete Versuchsaufbau bestand dabei, wie in Abbildung 3(a) schematisch dargestellt, aus einer Versuchszelle, in der sich über einem Reservoir flüssigen Heliums sechs in gewissen Höhen h übereinander geschichtete plattenförmige Kupferelektroden befanden. Die Dicke d der Helium-Filme, die sich an deren Ober- und Unterseiten ausbildeten, bestimmten Garcia und Chan indirekt, durch Messung der elektrischen Ladungskapazität jeweils benachbarter Plattenpaare. Hieraus ermittelten sie die effektive Dielektrizitätskonstante, die unmittelbar mit der

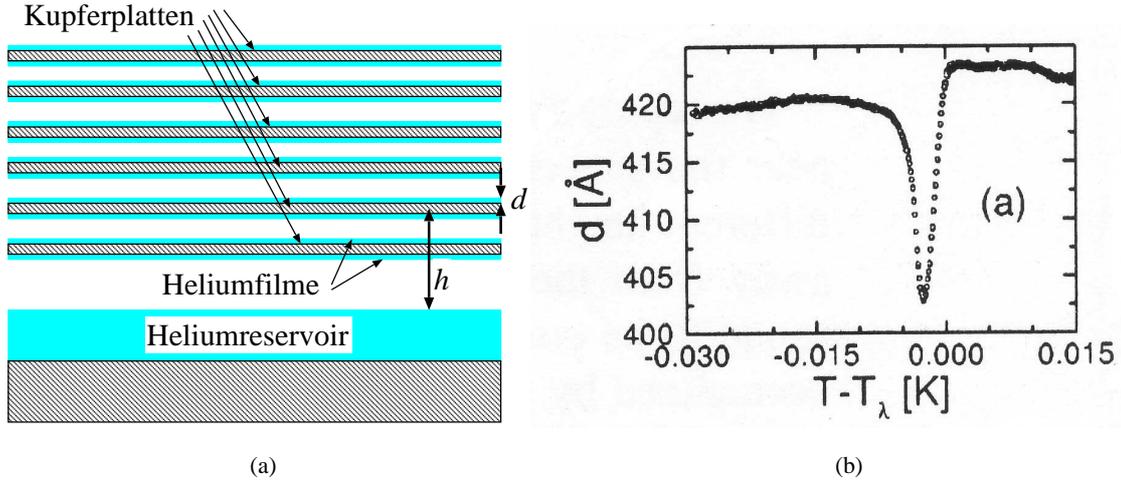


Abbildung 3: Schematische Darstellung des von Garcia und Chan [9] verwendeten Versuchsaufbaus (a). Auftragung der Filmdicke d in Å über der Temperaturdifferenz $T - T_\lambda$ in K (b). Abbildung (b) ist aus Referenz [9] entnommen.

Die Dicke der zwischen den Platten befindlichen Helium-Filme zusammenhängt. Diese Messungen der Kapazität wurden für alle fünf benachbarten Plattenpaare und verschiedene Temperaturen in der Umgebung der Übergangstemperatur T_λ durchgeführt und die jeweilige Filmdicke bestimmt. Aufgetragen über der Temperaturdifferenz $T - T_\lambda$ ergab sich dabei — exemplarisch für eines der fünf Plattenpaare — der in Abbildung 3(b) dargestellte Verlauf der Filmdicke d . Dabei zeigt sich, dass die Filmdicke bei Temperaturen oberhalb der Übergangstemperatur $T - T_\lambda \gtrsim 0$ und auch im Bereich $T - T_\lambda \lesssim -0.0075$ nahezu konstant ist. Zwischen diesen Bereichen durchläuft d jedoch ein ausgeprägtes Minimum (*Dip*), das auf den thermodynamischen Casimir-Effekt zurückzuführen ist.

Berücksichtigt man die thermodynamische Casimir-Kraft $\propto \vartheta$, die anziehende van der Waals-Wechselwirkung $\propto \gamma_0 d^{-3}$ zwischen einer Kupferelektrode und einem Helium-Film der Dicke d sowie dessen potentielle Energie $\propto h$ im Schwerfeld der Erde, so kann gemäß (siehe z.B. [9, 10, 77])

$$\frac{\gamma_0}{d^3} \left(1 + \frac{d}{d_{1/2}}\right)^{-1} + \frac{k_B T_\lambda V}{d^3} \vartheta(t d^{1/\nu}) = mgh \quad (1.11)$$

ein impliziter Zusammenhang zwischen der Temperatur, der Filmdicke d und der Höhe h der jeweiligen Elektrode über dem Helium-Reservoir angegeben werden. Dabei bezeichnet g die Schwerkbeschleunigung, m die Atommasse von ${}^4\text{He}$, V sein spezifisches Volumen, ν den Korrelationslängenexponenten und t die reduzierte Temperatur $(T - T_\lambda)/T_\lambda$. Die positiven Konstanten γ_0 und $d_{1/2}$ sind spezifisch für ${}^4\text{He}$ auf Kupfer, wobei der Koeffizient $(1 + d/d_{1/2})^{-1}$ die Retardierung der van der Waals-Wechselwirkung für $d \gg d_{1/2}$ berücksichtigt.

Ist die thermodynamische Casimir-Kraft zu vernachlässigen, d.h. $\vartheta = 0$, was außerhalb des kritischen Bereichs der Fall ist, so impliziert Gleichung (1.11) eine temperaturunabhängige Film-

dicke d , deren Wert ausschließlich durch die Höhe h der jeweiligen Elektrode über dem Helium-Reservoir bestimmt wird. Variationen in der Filmdicke — wie sie in Abbildung 3(b) zu sehen sind — gehen somit auf von null verschiedene Werte der *Finite-Size*-Skalenfunktion ϑ zurück, wobei die Filmdicke gegenüber ihrem Wert im Fall $\vartheta = 0$ bei negativen Werten von ϑ abnimmt und bei positiven Werten zunimmt. Dabei kann der Wert von ϑ , bei gegebenen Werten von d und h , unter Verwendung von Gleichung (1.11) berechnet werden. Als Argument der *Finite-Size*-Skalenfunktion ϑ in Gleichung (1.11) wählten Garcia und Chan die Skalenvariable $td^{1/\nu}$, die durch die *Finite-Size*-Skalenvariable d/ξ_∞ ausgedrückt werden kann. Da das asymptotische Verhalten der *Bulk*-Korrelationslänge in der Umgebung des kritischen Punktes $t > 0$ durch ein Potenzgesetz von der Form

$$\xi_\infty(t) \underset{t \rightarrow 0^+}{\approx} \hat{\xi}^+ |t|^{-\nu} \quad (1.12)$$

mit der kritischen Amplituden $\hat{\xi}^+$ gekennzeichnet ist, gilt oberhalb des kritischen Punktes

$$td^{1/\nu} \underset{t \rightarrow 0^+}{\approx} \hat{\xi}^{+1/\nu} (d/\xi_\infty)^{1/\nu}. \quad (1.13)$$

Unterhalb des kritischen Punktes ($t < 0$) ist das Umschreiben der Skalenvariablen $td^{1/\nu}$ auf d/ξ_∞ in $O(n)$ -symmetrischen Systemen mit $n \geq 2$ — wie im Fall des Übergangs zur Suprafluidität für den $n = 2$ ist — nicht möglich. In solchen Systemen mit einer kontinuierlichen Symmetrie sind zwei verschiedene Korrelationslängen zu unterscheiden, die als transversale und longitudinale Korrelationslänge ξ_L und ξ_T bezeichnet werden, und auf der Koexistenzkurve, d.h. für $T < T_{c,\infty}$ im Limes $H \rightarrow 0^\pm$ des symmetriebrechenden äußeren Feldes H im Fall eines magnetischen Systems, beide divergieren (siehe z.B. [78, 79]).

Unter Verwendung von Gleichung (1.11) und den von ihnen für alle fünf Plattenpaare ermittelten Filmdicken in Abhängigkeit von der Temperatur, berechneten Garcia und Chan die *Finite-Size*-Skalenfunktion ϑ der thermodynamischen Casimir-Kraft. Eine Auftragung von ϑ über der Skalenvariablen $x = td^{1/\nu}$ ergab den in Abbildung 4(a) dargestellten Skalenplot. Dabei zeigen sich deutliche systematische Abweichungen der für die verschiedenen Plattenpaare erhaltenen Verläufe, während der in einem Skalenplot zu erwartende Datenkollaps lediglich im Bereich $x \gtrsim -5$ zu beobachten ist. Um diese systematischen Abweichungen zu eliminieren, normierten Garcia und Chan sämtliche Skalenfunktionen auf den Wert ihres jeweiligen Minimums ϑ_{\min} und erzielten auf diesem Wege einen Datenkollaps (Abbildung 4(b)). Signifikante Abweichungen sind nun lediglich im Bereich $x \ll 0$ ($T \ll T_\lambda$) zu beobachten. Weiterhin ist dabei zu bemerken, dass die Skalenfunktionen hier nicht auf null abfallen, wie dies im Bereich $x > 0$ oberhalb des kritischen Punktes der Fall ist, sondern auf einen nahezu konstanten negativen Wert. Grund hierfür sind bei Temperaturen $T < T_\lambda$ auftretende zusätzliche Beiträge zur Casimir-Kraft, die aus Goldstone-Moden und der Anregung von Kapillarwellen an der Grenzfläche zwischen den Helium-Filmen und der

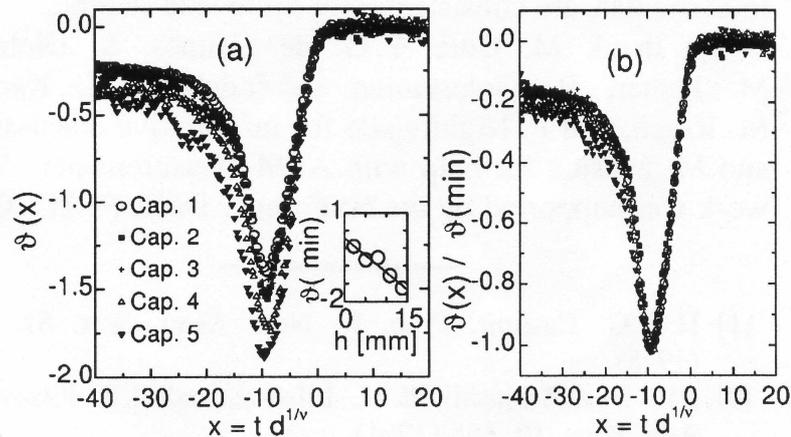


Abbildung 4: Auftragung der von Garcia und Chan anhand der fünf benachbarten Plattenpaare experimentell ermittelten *Finite-Size*-Skalenfunktionen $\vartheta(x)$ über der SkalenvARIABLEN $x = td^{1/\nu}$ (a). Abbildung (b) zeigt die auf ihre Werte am Minimum ϑ_{\min} normierten *Finite-Size*-Skalenfunktionen $\vartheta(x)/\vartheta_{\min}$ über der SkalenvARIABLEN $x = td^{1/\nu}$. Beide Abbildungen sind aus Referenz [9] entnommen.

umgebenden Gasphase resultieren [6–8, 80].

Ganshin *et al.* [74] wiederholten die von Garcia und Chan durchgeführten Messungen. Dabei stellte sich heraus, dass der fehlende Datenkollaps und die damit einhergehende Verletzung von *Finite-Size-Scaling* auf die Oberflächenrauigkeit der Kupferelektroden zurückzuführen ist. Sie konnten zeigen, dass unter Verwendung hinreichend glatter Oberflächen erhaltene Messwerte einen Datenkollaps und keinerlei systematische Abweichungen aufweisen. Ihre Ergebnisse bestätigen damit die Gültigkeit des in Gleichung (1.8) angegebenen *Finite-Size*-Skalenansatzes für die thermodynamische Casimir-Kraft. Der Verlauf der *Finite-Size*-Skalenfunktion ist jedoch mit Ausnahme des Temperaturbereichs $T \geq T_\lambda$ und des durch die Anregung von Kapillarwellen und Goldstone-Moden gekennzeichneten Tieftemperaturbereichs $T \ll T_\lambda$ theoretisch unverstanden. Neben einer in der Literatur kontrovers diskutierten Arbeit [81, 82] und einem auf *Mean-Field*-Theorie basierenden Ansatz [83], gibt es für diesen Temperaturbereich bislang keine quantitative Theorie. Unmittelbar vor der Fertigstellung dieser Arbeit ist es jedoch gelungen, die thermodynamische Casimir-Kraft in einem XY-Modell auf einem dreidimensionalen einfach kubischen Gitter mit Filmgeometrie und offenen Randbedingungen an den Oberflächen des Films im Rahmen von Monte Carlo-Simulationen zu bestimmen [67]. Dieses Modell weist dasselbe asymptotisch kritische Verhalten auf wie der in ^4He auftretende Übergang zur Suprafluidität. Die Monte Carlo-Daten, die unter Verwendung des Wolff-Algorithmus [84] erhalten wurden, geben die in den Messungen von Garcia und Chan ermittelte *Finite-Size*-Skalenfunktion der Casimir-Kraft mit guter Übereinstimmung wieder. Eine entsprechende Auftragung der Simulationsdaten zusammen mit

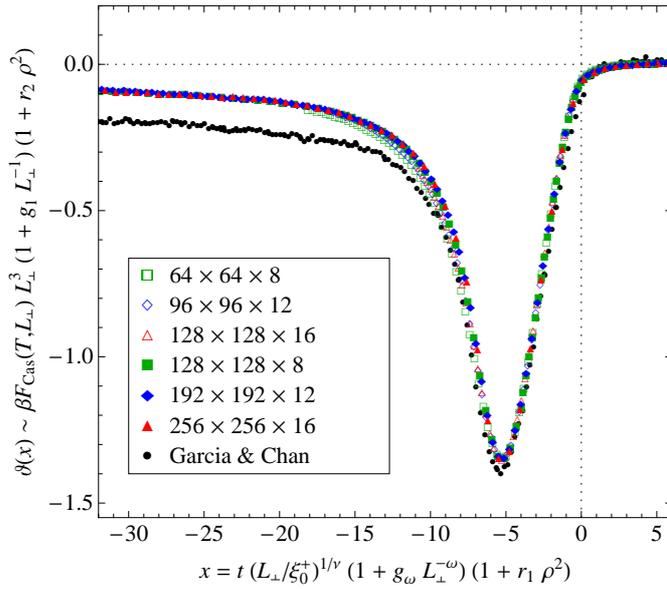


Abbildung 5: Auftragung der im Rahmen von Monte Carlo-Simulationen dreidimensionaler XY-Modelle bestimmten Skalenfunktion der thermodynamischen Casimir-Kraft $\vartheta(x)$. Die in den Simulationen verwendeten Systemgrößen, für die die jeweiligen Datenpunkte erhalten wurden, sind in der Legende angegeben. Die bereits in Abbildung 4(b) dargestellten experimentellen Daten von Garcia und Chan entsprechen den runden Datenpunkten.

den experimentellen Daten findet sich in Abbildung 5 [85]. Die im Bereich $x \lesssim -10$ zu beobachtenden Abweichungen sind auf im Experiment auftretende zusätzliche Beiträge zur thermodynamischen Casimir-Kraft zurückzuführen, beispielsweise durch die Anregung von Kapillarwellen an der Grenzfläche zwischen den Helium-Filmen und der umgebenden Gasphase [80].

Neben den in diesem Abschnitt diskutierten Messungen an suprafluiden ^4He -Filmen, sind thermodynamische Casimir-Kräfte auch in anderen Systemen nachgewiesen und gemessen worden. Einen Überblick über weitere experimentelle Realisierungen und auch andere Arbeiten hierzu, geben die Übersichtsartikel von Krech [10] und Balibar und Ishiguro [11].

1.4 Skalenverhalten der Casimir-Kraft und langreichweitige Wechselwirkungen

In dieser Arbeit werden Systeme mit langreichweitigen Wechselwirkungen der in Gleichung (1.1) angegebenen Form behandelt, mit Werten des Parameters σ aus dem Intervall $2 < \sigma < 4$. Im Folgenden wird daher unter Berücksichtigung derartiger langreichweitiger Wechselwirkungen ein *Finite-Size*-Skalenansatz für die Casimir-Kraft aufgestellt, und ihr Verhalten auf großen Längenskalen L zunächst qualitativ auf der Grundlage phänomenologischer Betrachtungen untersucht. Dabei wird hier und auch in den folgenden Kapiteln dieser Arbeit auf die bei magnetischen Systemen gebräuchliche Terminologie zurückgegriffen.

Ausgangspunkt ist die reduzierte freie Energie pro Flächeneinheit im thermodynamischen Limes $A \rightarrow \infty$ bezüglich der lateralen Ausdehnung des Films, die sich — wie in Gleichung (1.6)

angegeben — im Fall der Filmgeometrie in vier Beiträge aufspalten lässt. Sie ist definiert als

$$f_L(T, H) \equiv \lim_{A \rightarrow \infty} \frac{F(T, H)}{Ak_B T}, \quad (1.14)$$

wobei zusätzlich eines äußeres Magnetfeld H berücksichtigt wird, und setzt sich gemäß der phänomenologischen Theorie des *Finite-Size-Scaling* [53–55] aus einen regulären Anteil f_L^{reg} und einen singulären Anteil f_L^{sing} zusammen, d.h.

$$f_L(T, H) = f_L^{\text{reg}}(T, H) + f_L^{\text{sing}}(T, H). \quad (1.15)$$

Der reguläre Anteil ist dabei in der Umgebung des kritischen Punktes eine analytische Funktion von Temperatur und äußerem Magnetfeld, und für das universelle kritische Verhalten des Systems ohne Bedeutung. Von vordergründigem Interesse hingegen ist der singuläre Anteil, der in der Umgebung des kritischen Punktes auf hinreichend großen Längenskalen L eine Skalenform besitzt. Diese lautet

$$f_L^{\text{sing}}(T, H) \approx L^{-(d-1)} X(g_t L^{1/\nu}, g_h L^{\Delta/\nu}; g_\sigma L^{-\omega_\sigma}, g_\omega L^{-\omega}, \dots), \quad (1.16a)$$

und geht nach Multiplikation mit L^{-1} auf beiden Seiten und Vollziehen des thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ in eine Skalenform

$$f_{\text{bk}}^{\text{sing}}(T, H) \approx g_t^{2-\alpha} X^{(\infty)}(g_h g_t^{-\Delta}; g_\sigma g_t^{\nu\omega_\sigma}, g_\omega g_t^{\nu\omega}, \dots), \quad (1.16b)$$

für den singulären Anteil der reduzierten freien Energie pro Volumeneinheit des *Bulk*-Systems über. Dabei sind X und $X^{(\infty)}$ Skalenfunktionen, in deren Argumente die linearen Skalenfelder g_t , g_h , g_σ und g_ω zusammen mit den kritischen Exponenten ν , Δ , ω_σ , ω und α eingehen. Das Temperaturskalenfeld g_t und das Skalenfeld des äußeren Magnetfeldes g_h sind dabei die beiden führenden relevanten *Bulk*-Skalenfelder. Für diese gilt in der Umgebung des kritischen Punktes $(T, H) = (T_{c,\infty}, 0)$ in einfachen magnetischen Systemen

$$g_t \approx a_t t, \quad g_h \approx a_h h, \quad (1.17)$$

mit der reduzierten Temperatur und dem reduzierten äußeren Magnetfeld

$$t \equiv (T - T_{c,\infty})/T_{c,\infty}, \quad h \equiv H/k_B T_{c,\infty}, \quad (1.18)$$

und den nicht-universellen metrischen Faktoren a_t und a_h .

Das Skalenfeld g_σ in den Skalenformen (1.16) ist mit dem in Gleichung (1.1) spezifizierten langreichweitigen Anteil des Paarpotentials assoziiert. Für den zugehörigen Exponenten ω_σ gilt dabei (siehe z.B. [14] und § II.B.1 in [39])

$$\omega_\sigma = \sigma + \eta - 2, \quad (1.19)$$

wobei η den Korrelationsexponenten des entsprechenden kurzreichweitigen Modells bezeichnet. Da im Folgenden $2 < \sigma < 4$ angenommen wird, ist der Wert des Exponenten ω_σ stets positiv, und g_σ — wie in § II.B.1 in [39] diskutiert — ein irrelevantes Skalenfeld. Der langreichweitige Anteil des Paarpotentials hat daher keinen Einfluss auf das führende kritische Verhalten sondern erzeugt Korrekturen dazu. Zusätzlich zu diesen Korrekturen werden mit dem Skalenfeld g_ω auch Wegner-Korrekturen [86] mit dem Wegner-Exponenten $\omega > 0$ berücksichtigt. Die Auslassungspunkte in den Skalenformen (1.16) stehen für weitere Skalenfelder, die allesamt als irrelevant im Hinblick auf das führende kritische Verhalten angenommen werden. Das bedeutet insbesondere, dass — neben g_t und g_h — keine weiteren relevanten Skalenfelder in Betracht gezogen werden. Darüberhinaus sei keines der vernachlässigten irrelevanten Skalenfelder *gefährlich irrelevant* (siehe z.B. Anhang D in [87]), so dass diese ohne weiteres gleich null gesetzt werden können.

Schätzungen des Wegner-Exponenten $\omega \equiv \omega(d, n)$ für $O(n)$ -symmetrische Modelle in drei Dimensionen ergeben, wie in Tabelle 1 aufgeführt, $\omega \simeq 0.808$ im einkomponentigen Fall, und geringfügig kleinere Werte für $n = 2$ und $n = 3$. Im Grenzfall $n \rightarrow \infty$ ist der Wert des Wegner-Exponenten exakt anzugeben und beträgt (siehe z.B. Gleichungen (93) in [88])

$$\omega(d, n = \infty) = 4 - d \quad (1.20)$$

in $2 < d < 4$ Dimensionen. Diese Werte des Wegner-Exponenten sollen nun mit den sich aus Gleichung (1.19) ergebenden Werten des Exponenten ω_σ verglichen werden. Dabei gilt für den Parameter σ im Fall nicht-retardierter und retardierter van der Waals-Wechselwirkungen in d -Dimensionen $\sigma = d$ beziehungsweise $\sigma = d + 1$, so dass sich der Wert des Exponenten ω_σ hierfür gemäß Gleichung (1.19) zu $\omega_\sigma^{\text{n.-ret.}} = d + \eta - 2$ beziehungsweise $\omega_\sigma^{\text{ret.}} = d + \eta - 1$ ergibt. Beide Exponenten sind positiv für die in dieser Arbeit betrachteten ($2 < d < 4$)-dimensionalen Systeme. Ist die Anzahl n der Komponenten des Ordnungsparameters endlich und somit $\eta > 0$, so ist $\omega_\sigma^{\text{ret.}}$ stets größer als der Wegner-Exponent ω in diesem Regime, während $\omega_\sigma^{\text{n.-ret.}}$ geringfügig unterhalb drei Dimensionen kleiner als ω wird. Im Limes $n \rightarrow \infty$, in dem der Korrelationsexponent η verschwindet, tritt dieser Vorzeichenwechsel von $\omega_\sigma^{\text{n.-ret.}} - \omega$ in genau drei Dimensionen auf, da hier $\omega_\sigma^{\text{n.-ret.}} = \omega = 1$ ist. Dieser Fall, in dem die Korrektorexponenten ω_σ und ω entartet sind, bedarf besonderer Aufmerksamkeit, da er — wie sich herausstellen wird — durch das Auftreten logarithmischer Anomalien gekennzeichnet ist. Bei der Betrachtung des zum Limes $n \rightarrow \infty$ äquivalenten

Exponent	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = \infty$
η	0.037 ± 0.009	0.045 ± 0.012	0.052 ± 0.015	0 (exakt)
ω	0.808 ± 0.046	0.807 ± 0.038	0.807 ± 0.031	1 (exakt)

Tabelle 1: Aus Referenz [88] entnommene Werte des Korrelationsexponenten η und des Wegner-Exponenten ω für $O(n)$ -symmetrische Modelle in drei Dimensionen. Die Werte der beiden Exponenten im Limes $n \rightarrow \infty$ sind exakt.

Mean-Sphärischen-Modells in Kapitel 2 werden daher die beiden Fälle $d + \sigma \neq 6$ ($\omega_\sigma \neq \omega$) und $d + \sigma = 6$ ($\omega_\sigma = \omega$) getrennt behandelt. Im $O(n)$ -symmetrischen Fall mit $n < \infty$, mit dem sich das dritte Kapitel befasst, ist diese Unterscheidung nicht erforderlich.

Von diesen Überlegungen unabhängig führt die Anwesenheit langreichweitiger Wechselwirkungen abseits des kritischen Punktes zu einem qualitativ andersartigen Verhalten der Casimir-Kraft auf großen Längenskalen, das durch einen algebraischen Abfall in der Filmdicke L gekennzeichnet ist, anstelle einer exponentiellen Abnahme wie im rein kurzreichweitigen Fall [20, 22]. Zu diesen Zusammenhängen werden im Folgenden einige qualitative Vorüberlegungen angestellt. Dazu wird zunächst — als weitere in dieser Arbeit betrachtete Größe — die als Differenz

$$f_{\text{ex}}(T, H; L) \equiv f_L(T, H) - Lf_{\text{bk}}(T, H) \quad (1.21)$$

definierte Exzess-Freie-Energie eingeführt. Diese entspricht gemäß Gleichung (1.6) der Summe aus dem *Finite-Size*-Anteil $\delta f_L(T, H)$ und den Oberflächenbeiträgen $f_{s,i}$ ($i = 1, 2$). Bildet man die Ableitung der Exzess-Freien-Energie nach L , so fallen die im Fall periodischer Randbedingungen ohnehin nicht auftretenden Oberflächenbeiträge weg, und man erhält unter Berücksichtigung von Gleichung (1.7),

$$\mathcal{F}_C(T, H; L) = -k_B T \frac{\partial f_{\text{ex}}(T, H; L)}{\partial L}. \quad (1.22)$$

Wie die freie Energie pro Flächeneinheit f_L und die freie Energie pro Volumeneinheit des *Bulk-Systems* f_{bk} , setzt sich auch die Exzess-Freie-Energie gemäß $f_{\text{ex}} = f_{\text{ex}}^{\text{reg}} + f_{\text{ex}}^{\text{sing}}$ aus einem regulären Anteil $f_{\text{ex}}^{\text{reg}}$ und einem singulären Anteil $f_{\text{ex}}^{\text{sing}}$ zusammen. Diese beiden Anteile ergeben sich dabei unter Verwendung der Definitionsgleichung (1.21) der Exzess-Freien-Energie zu $f_{\text{ex}}^{\text{reg/sing}} = f_L^{\text{reg/sing}} - Lf_{\text{bk}}^{\text{reg/sing}}$. Der auf diese Weise zustande kommende reguläre Anteil der Exzess-Freien-Energie soll nun etwas genauer betrachtet werden. Dabei zeigt sich in einfachen Gittersystemen mit rein kurzreichweitigen Wechselwirkungen und periodischen Randbedingungen, dass die regulären Anteile der freien Energie (pro Volumen) im Fall endlicher Filmdicke $L < \infty$ und im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ bis auf exponentiell kleine Korrekturen $\sim e^{-L/\xi_\infty}$ miteinander übereinstimmen, und somit in guter Näherung $f_L^{\text{reg}} = Lf_{\text{bk}}^{\text{reg}}$ angenommen werden kann (siehe z.B. § 2.1 in [54]). Unter Hinzunahme der irrelevanten langreichweitigen Wechselwirkung ist zu erwarten, dass zusätzlich auch Korrekturen auftreten, die algebraisch in L abfallen. Auch diese werden im Folgenden nicht berücksichtigt, so dass der reguläre Anteil der Exzess-Freien-Energie verschwindet. Sowohl bei der Exzess-Freien-Energie als auch bei der sich daraus ableitenden thermodynamischen Casimir-Kraft wird daher nicht mehr zwischen regulären und singulären Anteilen unterschieden.

Ausgehend von der *Finite-Size*-Skalenrelation (1.16a) für den singulären Anteil der freien Energie pro Flächeneinheit, kann nun eine entsprechende Relation für die Exzess-Freie-Energie

$$f_{\text{ex}}(T, H; L) \approx L^{-(d-1)} X_{\text{ex}}(g_t L^{1/\nu}, g_h L^{\Delta/\nu}; g_\sigma L^{-\omega_\sigma}, g_\omega L^{-\omega}, \dots) \quad (1.23)$$

mit einer Skalenfunktion X_{ex} aufgestellt werden, die ihr asymptotisches Skalenverhalten in der Umgebung des kritischen Punktes beschreibt. Um herauszuarbeiten, welche qualitativen Unterschiede sich für das Verhalten der Casimir-Kraft aus der Anwesenheit der langreichweitigen Wechselwirkungen ergeben, werden zunächst die Skalenvariablen

$$\check{t} = g_t L^{1/\nu}, \quad \check{h} = g_h L^{\Delta/\nu}, \quad (1.24a)$$

und

$$\check{g}_\sigma = g_\sigma L^{-\omega_\sigma}, \quad \check{g}_\omega = g_\omega L^{-\omega}, \quad (1.24b)$$

eingeführt, und die auf diese Variablen umgeschriebene Skalenfunktion der Exzess-Freien-Energie in \check{g}_σ und \check{g}_ω linearisiert. Dies führt auf

$$X_{\text{ex}}(\check{t}, \check{h}; \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) = X_{\text{ex},0}(\check{t}, \check{h}) + \check{g}_\sigma X_{\text{ex},\sigma}(\check{t}, \check{h}) + \check{g}_\omega X_{\text{ex},\omega}(\check{t}, \check{h}) + o(\check{g}_\sigma, \check{g}_\omega), \quad (1.25)$$

wobei alle nicht berücksichtigten und durch die Auslassungspunkte auf der rechten Seite der *Finite-Size*-Skalenrelation (1.23) angedeuteten irrelevanten Skalenfelder gleich null gesetzt worden sind. Die Skalenfunktionen

$$X_{\text{ex},0}(\check{t}, \check{h}) \equiv X_{\text{ex}}(\check{t}, \check{h}; \check{g}_\sigma = 0, \check{g}_\omega = 0) \quad (1.26a)$$

und

$$X_{\text{ex},\omega}(\check{t}, \check{h}) \equiv \left. \frac{\partial X_{\text{ex}}(\check{t}, \check{h}; \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega)}{\partial \check{g}_\omega} \right|_{\check{g}_\sigma = \check{g}_\omega = 0} \quad (1.26b)$$

sind dabei im Fall periodischer Randbedingungen durch die *Bulk*-Universalitätsklasse, die durch den kurzreichweitigen Anteil des Paarpotentials bestimmt wird, festgelegt, während in die Skalenfunktion

$$X_{\text{ex},\sigma}(\check{t}, \check{h}) \equiv \left. \frac{\partial X_{\text{ex}}(\check{t}, \check{h}; \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega)}{\partial \check{g}_\sigma} \right|_{\check{g}_\sigma = \check{g}_\omega = 0} \quad (1.26c)$$

zusätzlich auch die Eigenschaften des langreichweitigen Anteils — und somit insbesondere der Wert des Parameters σ — eingehen.

Am kritischen Punkt $(\check{t}, \check{h}) = (0, 0)$ nehmen die Skalenfunktionen $X_{\text{ex},i}$ ($i = 0, \sigma, \omega$) endliche und von null verschiedene Werte an. Die Skalenfunktion $X_{\text{ex},0}$ reduziert sich dabei gemäß

$$X_{\text{ex},0}(0, 0) = \Delta_C \quad (1.27a)$$

auf die in Gleichung (1.9) definierte Casimir-Amplitude. In Anlehnung an diese Relation werden für die kritischen Werte der Skalenfunktionen $X_{\text{ex},\sigma}$ und $X_{\text{ex},\omega}$ die Amplituden

$$\Delta_{\sigma,C} \equiv X_{\text{ex},\sigma}(0, 0) \quad (1.27b)$$

beziehungsweise

$$\Delta_{\omega,C} \equiv X_{\text{ex},\omega}(0, 0) \quad (1.27c)$$

eingeführt. Setzt man diese kritischen Werte nun in Gleichung (1.25) ein, erhält man daraus zusammen mit der *Finite-Size*-Skalenrelation (1.23) den kritischen Wert der skalierten Exzess-Freien-Energie,

$$L^{d-1} f_{\text{ex}}(T_{c,\infty}, 0; L) \underset{L \rightarrow \infty}{\approx} \Delta_C + g_\sigma L^{-\omega_\sigma} \Delta_{\sigma,C} + g_\omega L^{-\omega} \Delta_{\omega,C} + o(g_\sigma, g_\omega). \quad (1.28a)$$

Unter Verwendung von Gleichung (1.22) ergibt sich daraus durch Ableiten nach der Filmdicke L der Wert der skalierten Casimir-Kraft am kritischen Punkt zu

$$\frac{L^d \mathcal{F}_C(T_{c,\infty}, 0; L)}{k_B T_{c,\infty}} \underset{L \rightarrow \infty}{\approx} (d-1) \Delta_C + g_\sigma L^{-\omega_\sigma} (d + \omega_\sigma - 1) \Delta_{\sigma,C} + g_\omega L^{-\omega} (d + \omega - 1) \Delta_{\omega,C} + o(g_\sigma, g_\omega). \quad (1.28b)$$

Somit zeigt sich, dass am kritischen Punkt sowohl die aus dem langreichweitigen Anteil des Paarpotentials resultierende Korrektur zur skalierten Exzess-Freien-Energie und zur skalierten Casimir-Kraft als auch die Wegner-Korrekturen auf großen Längenskalen L zu vernachlässigen sind. Sie gehen wegen $\omega_\sigma > 0$ und $\omega > 0$ im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ gegen null, während das führende Verhalten durch die zur Casimir-Amplitude Δ_C proportionalen L -unabhängigen Beiträge in den Gleichungen (1.28) bestimmt wird.

Es bleibt nun das asymptotische Verhalten der Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft im Temperaturbereich $T > T_{c,\infty}$ zu untersuchen. Ihren Definitionsgleichungen (1.24a) entsprechend divergiert sowohl die Temperaturskalenvariable \check{t} als auch — im Fall eines nichtverschwindenden äußeren Magnetfeldes — der Absolutbetrag der Feldskalensvariablen $|\check{h}|$ im Limes $L \rightarrow \infty$. Das Verhalten der in Gleichung (1.25) eingeführten Skalenfunktionen $X_{\text{ex},0}$ und $X_{\text{ex},\omega}$ in diesem Grenzfall ist durch einen exponentiellen Zerfall $\sim \exp(-L/\xi_\infty^{\text{sr}})$ gekennzeichnet (siehe z.B. [20]). Dabei bezeichnet $\xi_\infty^{\text{sr}} \equiv \xi_\infty^{\text{sr}}(T, H)$ die wahre, d.h. über den exponentiellen räumlichen Zerfall der *Bulk*-Zweipunktkorrelationsfunktion des Ordnungsparameters definierte Korrelationslänge im rein kurzreichweitigen Fall. Setzt man das äußere Magnetfeld auf seinen kritischen Wert $H = 0$, folgt somit durch Umschreiben der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞^{sr} auf die Temperaturskalenvariable \check{t} unter Verwendung der Gleichungen (1.12, 1.17, 1.24a) für das asymptotische Verhalten der Skalenfunktion $X_{\text{ex},0}$,

$$X_{\text{ex},0}(\check{t}, 0) \underset{\check{t} \rightarrow \infty}{\sim} \exp(-|\text{const.}| \check{t}^\nu). \quad (1.29)$$

Eine entsprechende Relation ergibt sich auch für das asymptotische Verhalten der Skalenfunktion $X_{\text{ex},\omega}(\check{t}, 0)$, während von der Skalenfunktion $X_{\text{ex},\sigma}(\check{t}, 0)$ hingegen angenommen wird, dass sie in diesem Grenzfall in führender Ordnung algebraisch in der Temperaturskalenvariablen \check{t} abfällt, gemäß eines Potenzgesetzes von der Form

$$X_{\text{ex},\sigma}(\check{t}, 0) \underset{\check{t} \rightarrow \infty}{\sim} \check{g}_\sigma \check{t}^{-\nu\zeta} \quad (1.30)$$

mit dem Korrelationslängenexponenten ν und einem weiteren Exponenten $\zeta \equiv \zeta(d, n)$. Da dieser Ausdruck die asymptotische Proportionalität

$$X_{\text{ex},\sigma}(\dot{t}, 0) \underset{L/\xi_{\infty}^{\text{sr}} \gg 1}{\sim} (L/\xi_{\infty}^{\text{sr}})^{-\zeta} \quad (1.31)$$

impliziert, charakterisiert der Exponent ζ — der im Folgenden genauer zu spezifizieren sein wird — die Abhängigkeit der Skalenfunktion $X_{\text{ex},\sigma}$ von der *Finite-Size*-Skalenvariablen $L/\xi_{\infty}^{\text{sr}}$ im Regime $L/\xi_{\infty}^{\text{sr}} \gg 1$ in führender Ordnung. Da hier die Skalenfunktionen $X_{\text{ex},\sigma}$ und $X_{\text{ex},\omega}$ auf der rechten Seite von Gleichung (1.25) exponentiell gegen null gehen, dominiert der aus dem langreichweitigen Anteil des Paarpotentials resultierende Beitrag $\propto g_{\sigma}$. Er bestimmt das führende asymptotische Verhalten der Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft, das sich unter Verwendung der Gleichungen (1.22, 1.23, 1.25, 1.30) im langreichweitigen Fall zu

$$f_{\text{ex}} \underset{g_t^{\nu} L \rightarrow \infty}{\sim} g_{\sigma} g_t^{-\nu\zeta} L^{-(d+\sigma+\eta+\zeta-3)} \quad (1.32a)$$

beziehungsweise

$$\mathcal{F}_{\text{C}} \underset{g_t^{\nu} L \rightarrow \infty}{\sim} g_{\sigma} g_t^{-\nu\zeta} L^{-(d+\sigma+\eta+\zeta-2)} \quad (1.32b)$$

ergibt. Der Wert des Exponenten ζ beträgt dabei im Limes $n \rightarrow \infty$ [20, 22]

$$\zeta(d, n = \infty) = 2 \quad (1.33)$$

in $2 < d < 4$ Dimensionen. Setzt man diesen Wert nun — zusammen mit dem für diesen Grenzfall in Tabelle 1 angegebenen Wert des Korrelationsexponenten $\eta = 0$ — in die Ausdrücke (1.32) ein, folgt daraus für das führende asymptotische Verhalten der Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft im Limes $n \rightarrow \infty$ des $O(n)$ -symmetrischen Modells mit periodischen Randbedingungen

$$f_{\text{ex}} \underset{L \rightarrow \infty}{\sim} L^{-(d+\sigma-1)}, \quad \mathcal{F}_{\text{C}} \underset{L \rightarrow \infty}{\sim} L^{-(d+\sigma)}, \quad (1.34)$$

bei fester Temperatur $T > T_{\text{c},\infty}$. Dieses Resultat wird durch die in Kapitel 2 diskutierten exakten Ergebnisse für das *Mean-Sphärische-Modell* bestätigt, und es gibt guten Grund zu der Annahme, dass die asymptotischen L -Abhängigkeiten (1.34) auch auf Systeme mit endlicher Anzahl n von Komponenten des Ordnungsparameters, d.h. auch für Werte des Korrelationsexponenten $\eta > 0$, zutreffen. In Referenz [15] wurde mit Hilfe der Griffiths-Sherman-Kelly Ungleichungen bewiesen, dass die *Bulk-Zweipunktkorrelationsfunktion* des Ordnungsparameters in ferromagnetischen Systemen mit langreichweitigen Wechselwirkungen räumlich nicht stärker abfallen kann als das dem System zugrunde liegende Wechselwirkungspotential. Das bedeutet (siehe z.B. § 1 in [16]), betrachtet man beispielsweise ein Spin-Gitter-System bestehend aus skalaren Spinvariablen $S(\mathbf{x})$, die vermittels eines ferromagnetischen und langreichweitigen Paarpotentials $J(\mathbf{x})$ wechselwirken, dass zu jeder Temperatur $T < \infty$ und jedem Wert des äußeren Magnetfeldes H eine positive Konstante $c(T, H)$ existiert, so dass für die *Bulk-Zweipunktkorrelationsfunktion*

$$G_{\infty}^{(2)}(\mathbf{x}; T, H) \equiv \langle S(\mathbf{x})S(\mathbf{0}) \rangle - \langle S(\mathbf{x}) \rangle \langle S(\mathbf{0}) \rangle \quad (1.35)$$

gilt

$$G_\infty^{(2)}(\mathbf{x}; T, H) > c(T, H)J(\mathbf{x}), \quad (1.36)$$

wobei die Notation $\langle \dots \rangle$ hier und im Folgenden für das Ensemblemittel steht. Ein mathematisch rigoroser Beweis dafür, dass die *Bulk*-Zweipunktkorrelationsfunktion $G_\infty^{(2)}(\mathbf{x}; T, H)$ räumlich nicht auch schwächer als das Wechselwirkungspotential abfallen kann, ist in der Literatur nicht zu finden. Nichtsdestotrotz ist es naheliegend anzunehmen, dass $G_\infty^{(2)}(\mathbf{x}; T, H)$ in Systemen mit langreichweitigen Wechselwirkungen asymptotisch im Grenzfalle großer Abstände $x \rightarrow \infty$ mit derselben inversen Potenz des Abstandes abfällt wie das zugrunde liegende Wechselwirkungspotential $J(\mathbf{x})$, abgesehen von etwaigen in Spezialfällen auftretenden logarithmischen Korrekturen. Diese Vermutung ist in Referenz [16] für das auch in dieser Arbeit betrachtete *Mean*-Sphärische-Modell mit van-der-Waals-artigen Wechselwirkungen bestätigt worden.

Ausgehend von dieser Annahme über das Großabstandsverhalten der *Bulk*-Zweipunktkorrelationsfunktion in Systemen mit langreichweitigen Wechselwirkungen, kann nun auch das Skalenverhalten ihres Gegenstücks in *Finite-Size*-Systemen untersucht werden. Legt man dabei ein d -dimensionales System mit Filmgeometrie $L \times \infty^{d-1}$ und periodischen Randbedingungen (*periodic boundary conditions*, pbc) zugrunde, so kann die Zweipunktkorrelationsfunktion im System mit endlicher Filmdicke gemäß (siehe z.B. Gleichung (4.12) in [31])

$$G_L^{(2),\text{pbc}}(\mathbf{x}; T, H) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} G_\infty^{(2)}(\mathbf{x} - jL\hat{e}_\perp; T, H) \quad (1.37)$$

mit Hilfe der *Bulk*-Zweipunktkorrelationsfunktion dargestellt werden, wobei \hat{e}_\perp den zu den Oberflächen des Films senkrecht stehenden Normaleneinheitsvektor bezeichnet. Nimmt man nun an, dass sich das Großabstandsverhalten des Paarpotentials auf die *Bulk*-Zweipunktkorrelationsfunktion $G_\infty^{(2)}$ überträgt, so liefern die Terme mit $j \neq 0$ auf der rechten Seite von Gleichung (1.37) L -abhängige Beiträge, die bei konstant gehaltenem \mathbf{x} unter Zugrundelegung des in Gleichung (1.1) spezifizierten langreichweitigen Paarpotentials $v^{(\sigma)}(\mathbf{x})$ im Grenzfalle $L \rightarrow \infty$ in führender Ordnung $\propto L^{-(d+\sigma)}$ abfallen. Übertragen auf die freie Energie impliziert dieses Ergebnis, dass der *Finite-Size*-Anteil von F mit zunehmendem L abseits des kritischen Punktes $\sim L^{-\sigma}$ gegen null geht. Für das asymptotische Verhalten der Exzess-Freien-Energie in diesem Grenzfalle gilt infolgedessen $f_{\text{ex}} \sim L^{-(d+\sigma-1)}$, und will man dieses Resultat mit der in Gleichung (1.32a) aufgeführten allgemeinen Form ihrer Asymptoten in Übereinstimmung bringen, so folgt daraus unmittelbar, dass der Wert des Exponenten ζ im Falle eines nichtverschwindenden Korrelationsexponenten η

$$\zeta = 2 - \eta \quad (1.38)$$

betragen muss. Obgleich sowohl die im folgenden Kapitel diskutierten exakten Ergebnisse für das *Mean*-Sphärische-Modell als auch die in Kapitel 3 im Rahmen der renormierungsgruppenverbesserten Störungstheorie in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen erhaltenen Zweischleifenresultate für das

$O(n)$ -symmetrische ϕ^4 -Kontinuumsmodell in Einklang mit dieser Hypothese über den Wert des Exponenten ζ stehen, reichen sie jedoch nicht aus, um diese endgültig zu verifizieren. Grund hierfür ist zum einen, dass der Korrelationsexponent η im Limes $n \rightarrow \infty$ verschwindet und somit Gleichung (1.38) in diesem Spezialfall trivial erfüllt ist. Zum anderen ist für eine endliche Anzahl n von Komponenten des Ordnungsparameters der Wert des Exponenten η von der Ordnung ϵ^2 in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen [89], so dass sich die Epsilon-Entwicklung des Exponenten ζ in niedrigster Ordnung zu $\zeta = 2 + O(\epsilon^2)$ ergibt. Die im Rahmen dieser Arbeit betrachtete Ordnung der Störungstheorie reicht jedoch nicht aus, um den ersten über den *Mean-Field*-Wert $\zeta^{\text{MF}} = 2$ hinausgehenden Beitrag in der Epsilon-Entwicklung des Exponenten ζ zu berechnen. Eine nicht-triviale Überprüfung des Zusammenhangs (1.38) zwischen den Exponenten ζ und η würde daher eine Berechnung der in Gleichung (1.25) eingeführten Skalenfunktion $X_{\text{ex},\sigma}$ in hinreichend hoher Ordnung renormierungsgruppenverbesserte Störungstheorie erfordern. Durch Bestimmung ihres asymptotischen Verhaltens im Limes $\check{t} \rightarrow \infty$ und Vergleich mit der in Gleichung (1.30) angenommenen asymptotischen Proportionalität könnte im Rahmen der Epsilon-Entwicklung der Exponent ζ ermittelt, und sein Wert mit dem sich aus der Relation (1.38) ergebenden verglichen werden.

Nach diesen ersten qualitativen Vorüberlegungen zum Einfluss van-der-Waals-artiger Wechselwirkungen auf das Skalenverhalten der Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft am kritischen Punkt und im Temperaturbereich $T > T_{c,\infty}$, sollen die im Vorangegangenen diskutierten Zusammenhänge nun anhand eines exakt lösbares *Mean-Sphärischen-Modells* verifiziert werden.

2 Exakte Ergebnisse für das *Mean-Sphärische-Modell*

Exakt lösbare Modelle spielen in der Theorie der kritischen Phänomene eine wichtige Rolle, da sie wichtige Tests für im Rahmen von Näherungsmethoden erhaltene Ergebnisse ermöglichen. Zu den wichtigsten Vertretern der Klasse exakt lösbarer Modelle in der statistischen Physik des Gleichgewichts zählt neben dem ursprünglich von W. Lenz [90] als Modell für einen Ferromagneten entwickelten Ising-Modells in einer Dimension [91] und im zweidimensionalen Fall ohne äußeres Magnetfeld [92], das von M. Kac im Jahre 1947 vorgeschlagene sphärische Modell (siehe z.B. [93]). Wie auch das Ising-Modell, als dessen exakt lösbare Approximation es seinerzeit eingeführt wurde, handelt es sich beim sphärischen Modell um ein Spin-Gitter-Modell. Wesentlicher Unterschied ist jedoch, dass im sphärischen Modell die dem Ising-Modell zugrundeliegende Annahme von Spinvariablen S_i mit fester Länge $|S_i| = 1$ aufgegeben wird. Stattdessen dürfen alle N Spinvariablen des Systems beliebige reelle Werte $S_i \in (-\infty, \infty)$ annehmen, die in Einklang mit der globalen Normierungsbedingung

$$\sum_{i=1}^N S_i^2 = N \quad (2.1)$$

stehen. Diese Modifikation des Ising-Modells führt auf das von Berlin und Kac [94] in einer, zwei und drei Dimensionen exakt gelöste sphärische Modell. Eine von diesem Modell abgeleitete Variante ist das auf Lewis und Wannier [95] zurückgehende *Mean-Sphärische-Modell*, das ebenfalls exakt lösbar ist, sich von ersterem jedoch im Hinblick auf die globale Normierungsbedingung (2.1) der Spinvariablen unterscheidet. Diese wird im *Mean-Sphärischen-Modell* durch die schwächere Forderung

$$\left\langle \sum_{i=1}^N S_i^2 \right\rangle = N \quad (2.2)$$

ersetzt. Wird den Spins keinerlei Normierungsbedingung auferlegt, resultiert das ebenfalls von Berlin und Kac [94] eingeführte Gaußsche Modell. Dieses Modell ist jedoch im Gegensatz zu den sphärischen Modellen nicht für alle Temperaturen $0 \leq T < \infty$ definiert und weist in jeder Dimension ein triviales, d.h. *mean-field*-artiges kritisches Verhalten auf. Das kritische Verhalten der sphärischen Modelle hingegen, die im Hinblick auf dieses äquivalent sind (siehe z.B. § 3.1.2 in [57]), ist in $d_u^* < d < d_o^*$ Dimensionen nicht-trivial. d_u^* und d_o^* bezeichnen dabei die untere

und obere kritische Dimension, die für beide Varianten des sphärischen Modells $d_u^* = 2$ und $d_o^* = 4$ betragen. In $d \leq d_u^* = 2$ Dimensionen treten daher in den sphärischen Modellen keine Phasenübergänge auf.

Zahlreiche Modifikationen der sphärischen Modelle hinsichtlich Geometrie, Randbedingungen und Eigenschaften der zugrundeliegenden Wechselwirkungen sind in der Literatur bereits behandelt worden (für eine Übersicht siehe z.B. § 3.1 in [57]). Mit der Herleitung der exakten Lösung eines sphärischen Modells befasst sich auch dieses Kapitel. Betrachtet wird dabei ein d -dimensionales *Mean*-Sphärisches-Modell mit Filmgeometrie $L \times \infty^{d-1}$ in $2 < d < 4$ Dimensionen und periodischen Randbedingungen. Unter Zugrundelegung eines langreichweitigen Paarpotentials mit dem in Gleichung (1.1) angegebenen Großabstandsverhalten und Beschränkung auf den Temperaturbereich $T \geq T_{c,\infty}$, werden im Rahmen dieses Modells exakte Ergebnisse für die Exzess-Freie-Energie und die Casimir-Kraft hergeleitet. Die Dimensionalität d wird dabei als reellwertige Größe aufgefasst, da sämtliche Ergebnisse im Sinne einer analytischen Fortsetzung auch für nicht ganzzahlige Werte von d ausgewertet werden können.

2.1 Definition des Modells

In diesem Kapitel wird ein *Mean*-Sphärisches-Modell auf einem zunächst allseits endlichen einfach hyperkubischen Gitter der Geometrie $L_1 \times L_2 \times \dots \times L_d$ mit periodischen Randbedingungen entlang aller d Hauptrichtungen betrachtet. Bezeichnet $\mathcal{L} \subset \mathbb{Z}^d$ die Menge aller Gitterplätze \mathbf{x} dieses Gitters und $S(\mathbf{x}) \in (-\infty, \infty)$ eine am Ort \mathbf{x} lokalisierte skalare Spinvariable, so wird das *Mean*-Sphärische-Modell beschrieben durch (siehe z.B. § 3.1.1 in [57]) die Hamilton-Funktion

$$\frac{\mathcal{H}}{k_B T} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \mathcal{L}} \frac{J(\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{k_B T} S(\mathbf{x}) S(\mathbf{x}') - h \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} S(\mathbf{x}) + s \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} S^2(\mathbf{x}) \quad (2.3a)$$

in Verbindung mit der in der Literatur als *Mean Spherical Constraint* bezeichneten Nebenbedingung

$$\left\langle \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} S^2(\mathbf{x}) \right\rangle = |\mathcal{L}|. \quad (2.3b)$$

Die Kardinalität $|\mathcal{L}|$ entspricht dabei der Gesamtzahl aller Gitterplätze beziehungsweise Spins.

Die Hamilton-Funktion (2.3a) setzt sich aus drei Beiträgen zusammen. Neben einem Wechselwirkungsanteil, in den das Paarpotential $J(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ der an den Orten \mathbf{x} und \mathbf{x}' befindlichen Spins eingeht, wird über den zu $h \equiv H/k_B T$ proportionalen Term die Ankopplung der Spinvariablen an ein äußeres Magnetfeld H berücksichtigt. Der letzte Term in der Hamilton-Funktion (2.3a) koppelt die Quadrate der Spinvariablen an das sogenannte sphärische Feld s , dessen ausschließlich positiver Wert über die Nebenbedingung (2.3b) zu bestimmen ist. Diese Konstruktion stellt sicher, dass die Lösung des Modells für alle Temperaturen $T \geq 0$ definiert ist (siehe z.B. § 3.1 in

[57]). Sind alle Spins des Systems äquivalent — eine Annahme die auf das hier betrachtete Modell aufgrund periodischer Randbedingungen und des translationsinvarianten Paarpotentials zutrifft — folgt aus der Nebenbedingung (2.3b), dass $\langle S^2(\mathbf{x}) \rangle = 1$ für alle $\mathbf{x} \in \mathcal{L}$. Die Spins sind somit im Mittel auf die Länge eins normiert.

Das im Wechselwirkungsanteil der Hamilton-Funktion (2.3a) auftretende Paarpotential $J(\mathbf{x})$ beinhaltet sowohl einen kurzreichweitigen Anteil $J_1(\mathbf{x})$ der benachbarte Spins ferromagnetisch koppelt, als auch einen langreichweitigen, ebenfalls ferromagnetisch koppelnden Anteil $J_2(\mathbf{x})$ mit dem in Gleichung (1.1) spezifizierten Großabstandsverhalten mit $2 < \sigma < 4$. Ein Paarpotential auf das diese Annahmen zutreffen, ist

$$J(\mathbf{x}) = J_1(\mathbf{x}) + J_2(\mathbf{x}) \quad (2.4a)$$

$$= J_1 \delta_{\mathbf{x},1} + \frac{J_2}{(\rho_0^2 + x^2)^{(d+\sigma)/2}} \quad (2.4b)$$

mit dem Kronecker-Symbol $\delta_{i,j}$, den Konstanten $J_1 \geq 0$ und $J_2 > 0$ und einem weiteren Parameter $\rho_0 > 0$. Letzterer legt die Längenskala fest, oberhalb derer das Verhalten des langreichweitigen Anteils näherungsweise seinem Großabstandsverhalten $J_2(\mathbf{x}) \underset{x \rightarrow \infty}{\approx} J_2 x^{-(d+\sigma)}$ entspricht. In Systemen mit langreichweitigen Wechselwirkungen und periodischen Randbedingungen sind jedoch, neben den Wechselwirkungen der Spins innerhalb des ursprünglichen Systems, auch die Wechselwirkungen mit den Spins in dessen periodisch fortgesetzten Bildern zu berücksichtigen. Der langreichweitige Anteil $J_2(\mathbf{x})$ des Paarpotentials in Gleichung (2.4a) ist daher durch die effektive Wechselwirkung

$$J_{2,\text{eff}}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^d} J_2(\mathbf{x} + \mathbf{L}\mathbf{m}) \quad (2.5)$$

mit der $d \times d$ Diagonalmatrix $\mathbf{L} \equiv \text{diag}(L_1, \dots, L_d)$ zu ersetzen. Die Eigenschaften des daraus resultierenden Paarpotentials

$$J(\mathbf{x}) = J_1(\mathbf{x}) + J_{2,\text{eff}}(\mathbf{x}) \quad (2.6)$$

und seiner, in die exakte Lösung des Modells eingehenden Gitter-Fouriertransformierten sollen nun im Folgenden diskutiert werden.

2.2 Eigenschaften des Paarpotentials

Die Gitter-Fouriertransformierte des Paarpotentials,

$$\tilde{J}(\mathbf{q}) \equiv \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} J(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}, \quad (2.7)$$

ist eine zentrale Größe, da das kritische Verhalten des Modells unmittelbar durch ihre Asymptotik im Infrarotlimites $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}$ bestimmt wird. Um dieses asymptotische Verhalten herauszuarbeiten, wird in Anhang A.1 gezeigt, dass die Gitter-Fouriertransformierte des Paarpotentials (2.6) gemäß

$$\tilde{J}(\mathbf{q}) = \tilde{J}(\mathbf{0}) - K k_B T \Omega(\mathbf{q}) \quad (2.8)$$

mit dem temperaturabhängigen und reellwertigen Parameter

$$K \equiv -\frac{1}{k_B T} \left. \frac{\partial \tilde{J}(\mathbf{q})}{\partial q^2} \right|_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} > 0 \quad (2.9)$$

aufgespalten werden kann. Die Funktion $\Omega(\mathbf{q})$ lässt sich dabei in der Umgebung des Punktes $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ in eine Potenzreihe von der Form

$$\Omega(\mathbf{q}) \underset{\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}}{=} q^2 - bq^\sigma + b_4 q^4 + b_{4,1} \sum_{\alpha=1}^d q_\alpha^4 + o(q^4) \quad (2.10)$$

entwickeln, wobei q_α der α -ten Komponente des d -dimensionalen Wellenzahlvektors \mathbf{q} entspricht und $q \equiv |\mathbf{q}|$ seinem Betrag, und für die Entwicklungskoeffizienten $b > 0$, $b_4 > 0$ und $b_4 + b_{4,1} > 0$ gilt. Die auf der rechten Seite von Gleichung (2.10) explizit angegebenen Terme sind dabei, mit Ausnahme des zum Entwicklungskoeffizienten $b_{4,1}$ proportionalen Ausdrucks, im \mathbf{q} -Raum isotrop. Diese Anisotropie hat ihren Ursprung darin, dass die euklidische Symmetrie durch das hyperkubische Gitter auf die hyperkubische Symmetrie heruntergebrochen wird. Der bei $q = 0$ im Allgemeinen nichtanalytische Beitrag proportional zu q^σ resultiert aus dem Großabstandsverhalten des langreichweitigen Anteils des Paarpotentials [96]. Der Koeffizient $bKk_B T$ dieses Terms in Gleichung (2.8) hängt daher von den Eigenschaften des Paarpotentials bei kleinen Abständen und somit insbesondere von dem Parameter ρ_0 nicht ab, während bei den Koeffizienten der analytischen Beiträge von der Ordnung q^2 und q^4 derartige Abhängigkeiten bestehen (siehe Gleichungen (A.14) in Anhang A.1).

Aus den in Abschnitt 2.1 über die Konstanten J_1 und J_2 getroffenen Annahmen folgt, dass das Paarpotential (2.6) für alle Gittervektoren $\mathbf{x} \in \mathcal{L}$ ausschließlich positive Werte annimmt. Eine unmittelbare Konsequenz ist, dass das Modell einen eindeutigen, d.h. von den Werten der Parameter J_1 und J_2 unabhängigen Grundzustand aufweist, der durch ferromagnetische Ordnung der Spins gekennzeichnet ist. Weiterhin ergibt sich daraus für die Gitter-Fouriertransformierte des Paarpotentials, dass $\tilde{J}(\mathbf{0}) > \tilde{J}(\mathbf{q})$ und somit $\Omega(\mathbf{q}) > 0$ ist, für alle Wellenzahlvektoren $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ innerhalb der ersten Brillouin-Zone BZ_1 des einfach hyperkubischen Gitters. Damit diese Eigenschaft der Funktion $\Omega(\mathbf{q})$ auch nach Ersetzung durch ihre in Gleichung (2.10) angegebene Reihenentwicklung vierter Ordnung erhalten bleibt, darf die Gleichung

$$1 - bq^{\sigma-2} + q^2 \left[b_4 + b_{4,1} \sum_{\alpha=1}^d \left(\frac{q_\alpha}{q} \right)^4 \right] = 0 \quad (2.11)$$

mit den für die Entwicklungskoeffizienten b , b_4 und $b_{4,1}$ erhaltenen Werten, keine reellwertige Lösung \mathbf{q} besitzen. Diese Bedingung wird von den in Anhang A.1 bestimmten Koeffizienten (A.14c) mit $2 < \sigma < 4$ erfüllt.

2.3 Freie Energie und Zustandsgleichung

Die freie Energie ist eine wichtige Größe in der statistischen Physik des Gleichgewichts, da sie sämtliche Informationen über die thermodynamischen Eigenschaften des zugrundeliegenden Systems enthält. Sie bildet auch den Ausgangspunkt für die Untersuchung des thermodynamischen Casimir-Effekts, da sich aus ihr gemäß den Gleichungen (1.6, 1.21, 1.22) die Exzess-Freie-Energie und die Casimir-Kraft unmittelbar ergeben. Im Folgenden wird daher zunächst die Herleitung der Gibbsschen freien Energie des *Mean-Sphärischen-Modells* skizziert (siehe z.B. § 3.1 in [57]) und aus dieser eine weitere wichtige Relation abgeleitet — die Zustandsgleichung. Diese beschreibt die Abhängigkeit der Magnetisierung von Temperatur und äußerem Magnetfeld und wird — neben der freien Energie, der Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft — in den folgenden Abschnitten im Hinblick auf ihr asymptotisches Verhalten in der Umgebung des kritischen Punktes untersucht. Dabei kann, legt man bei der statistischen Beschreibung des Modells das kanonische Ensemble zugrunde, die Gibbssche freie Energie F gemäß

$$F = -k_B T \log \mathcal{Z} \quad (2.12)$$

aus dem Logarithmus der kanonischen Zustandssumme erhalten werden. Diese ist durch Integration des Boltzmann-Faktors über alle möglichen Spinkonfigurationen zu berechnen und lautet daher für das in Abschnitt 2.1 definierte *Mean-Sphärische-Modell*

$$\mathcal{Z} = \left[\prod_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} \int_{-\infty}^{\infty} dS(\mathbf{x}) \right] e^{-\mathcal{H}/k_B T} \quad (2.13)$$

mit der in Gleichung (2.3a) angegebenen Hamilton-Funktion $\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}(\{S(\mathbf{x})\})$. Die kanonische Zustandssumme und auch die freie Energie hängen dabei von der Temperatur, dem äußeren Magnetfeld sowie dem sphärischen Feld s ab, dessen Wert so festzulegen ist, dass die Normierungsbedingung der Spinvariablen, Gleichung (2.3b), erfüllt ist. Solange s jedoch ein freier Parameter ist, entspricht die freie Energie, die sich aus den Gleichungen (2.12) und (2.13) ergibt, der freien Energie eines Gaußschen Modells.

Um nun die Zustandssumme \mathcal{Z} zu berechnen, wird von der Ortsraumdarstellung zur Darstellung im Fourierraum übergegangen und die in die Hamilton-Funktion \mathcal{H} eingehenden Spinvariablen $S(\mathbf{x})$ und das Paarpotential $J(\mathbf{x})$ gemäß

$$\tilde{S}(\mathbf{q}) \equiv \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} S(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \quad (2.14)$$

und Gleichung (2.7) durch ihre Gitter-Fouriertransformierten $\tilde{S}(\mathbf{q})$ und $\tilde{J}(\mathbf{q})$ ersetzt. In dieser Darstellung faktorisiert die Zustandssumme und die nun über die Fourierkomponenten $\tilde{S}(\mathbf{q})$ zu erfolgenden Integrationen können analytisch ausgeführt werden. Der Logarithmus der Zustandssumme führt dann zu dem in Gleichung (3.14) in [57] angegebenen Ausdruck für die reduzierte

Gibbssche freie Energie pro Spin $F^{\text{GM}}(K, h, s)/(k_{\text{B}}T|\mathcal{L}|)$ des Gaußschen Modells mit dem in Gleichung (2.9) definierten Parameter $K \propto 1/T$. Das sphärische Feld s ist dabei jedoch keine freie Variable sondern implizit durch die zusätzlich zu berücksichtigende Nebenbedingung (2.3b) festgelegt. Diese impliziert, dass s seinerseits eine Funktion der Temperatur und des äußeren Magnetfeldes ist, und kann mit Hilfe der Ableitung der freien Energie des Gaußschen Modells nach dem sphärischen Feld geschrieben werden als

$$\left. \frac{\partial}{\partial s} \frac{F^{\text{GM}}(K, h, s)}{k_{\text{B}}T|\mathcal{L}|} \right|_{s=s(\varepsilon, K, h)} = \varepsilon \quad (2.15)$$

mit $\varepsilon = 1$. Um die s -Abhängigkeit der freien Energie $F^{\text{GM}}(K, h, s)$ zu eliminieren und sie vollständig auf die Variablen K und h umzuschreiben, wird daher eine Legendre-Transformation bezüglich des sphärischen Feldes durchgeführt und anschließend $\varepsilon = 1$ gesetzt. Dies führt auf

$$F^{\text{SM}}(K, h) \equiv \left[F^{\text{GM}}(K, h, s(\varepsilon, K, h)) - s(\varepsilon, K, h)\varepsilon \right] \Big|_{\varepsilon=1}, \quad (2.16)$$

und definiert die Gibbssche freie Energie des *Mean*-Sphärischen-Modells (siehe Gleichung (3.22) in [57]), die sich für die in Abschnitt 2.1 beschriebene Modellspezifikation mit den Systemlängen $\mathbf{L} \equiv (L_1, \dots, L_d)$ zu

$$\frac{F_{\mathbf{L}}^{\text{SM}}(K, h)}{k_{\text{B}}T|\mathcal{L}|} = \frac{1}{2} \left[\log\left(\frac{K}{2\pi}\right) - \frac{K}{v_2} \right] + \frac{1}{2} \sup_{r>0} \left\{ 2U_{d,\Omega}(r|\mathbf{L}) - Kr - \frac{h^2}{Kr} \right\} \quad (2.17)$$

ergibt, mit der temperaturunabhängigen Konstanten

$$v_2 \equiv - \left. \frac{\partial \log \tilde{J}(\mathbf{q})}{\partial q^2} \right|_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} \quad (2.18)$$

und der Modensumme

$$U_{d,\Omega}(r|\mathbf{L}) = \frac{1}{2|\mathcal{L}|} \sum_{\mathbf{q} \in \text{BZ}_1} \log(r + \Omega(\mathbf{q})) \quad (2.19)$$

mit der in Abschnitt 2.2 eingeführten Funktion $\Omega(\mathbf{q})$. Die Summationen in Gleichung (2.19) erstrecken sich dabei über alle Wellenzahlvektoren $\mathbf{q} \equiv (q_1, \dots, q_d)$ innerhalb der ersten Brillouin-Zone BZ_1 des hyperkubischen Gitters. Für die α -te Komponente des Wellenzahlvektors gilt daher, wie in § 3.1.2 in [57] erörtert, $q_\alpha = 2\pi\nu_\alpha/L_\alpha$ mit $\nu_\alpha \in \{-N_\alpha, -N_\alpha + 1, \dots, N_\alpha\}$ wobei $N_\alpha = (L_\alpha - 1)/2$.

Der in die freie Energie (2.17) des *Mean*-Sphärischen-Modells eingehende Parameter r hängt gemäß

$$r \equiv \frac{1}{K} \left(2s - \frac{K}{v_2} \right) \quad (2.20)$$

unmittelbar vom sphärischen Feld ab, dessen Wert $s = s_{\mathbf{L}}(K, h)$ über die Nebenbedingung (2.15) mit $\varepsilon = 1$ zu bestimmen ist. Der Wert des Parameters $r = r_{\mathbf{L}}(K, h)$, der sich daraus ergibt,

entspricht gerade seinem Wert am Supremum des in geschweiften Klammern befindlichen Ausdrucks auf der rechten Seite von Gleichung (2.17). Die Bestimmungsgleichung für den Parameter $r_{\mathbf{L}}(K, h)$ — und somit für das sphärische Feld $s_{\mathbf{L}}(K, h)$ — kann daher durch Nullsetzen der ersten Ableitung dieses Klammerausdrucks nach r erhalten werden. Dies führt auf

$$K = \frac{h^2}{K r_{\mathbf{L}}^2} + W_{d,\Omega}(r_{\mathbf{L}}|\mathbf{L}) \quad (2.21)$$

mit der Modensumme

$$W_{d,\Omega}(r|\mathbf{L}) = \frac{1}{|\mathcal{L}|} \sum_{\mathbf{q} \in \text{BZ}_1} \frac{1}{r + \Omega(\mathbf{q})}, \quad (2.22)$$

die sich gemäß

$$W_{d,\Omega}(r|\mathbf{L}) = 2 \frac{\partial U_{d,\Omega}(r|\mathbf{L})}{\partial r} \quad (2.23)$$

durch Ableiten der Modensumme $U_{d,\Omega}(r|\mathbf{L})$ ergibt. Eine Integration dieser Gleichung über r liefert die wichtige Relation

$$U_{d,\Omega}(r|\mathbf{L}) = U_{d,\Omega}(0|\mathbf{L}) + \frac{1}{2} \int_0^r dx W_{d,\Omega}(x|\mathbf{L}). \quad (2.24)$$

Unter Verwendung der impliziten Bestimmungsgleichung (2.21) für den Parameter $r_{\mathbf{L}}(K, h)$ kann nun, wie in § 3.1.2 in [57] gezeigt, die Zustandsgleichung des *Mean-Sphärischen-Modells* hergeleitet werden. Dazu wird zunächst durch Ableiten der freien Energie (2.17) nach dem reduzierten äußeren Magnetfeld h die Magnetisierung pro Spin

$$m_{\mathbf{L}}(K, h) = -\frac{\partial}{\partial h} \frac{F_{\mathbf{L}}^{\text{SM}}(K, h)}{k_{\text{B}}T|\mathcal{L}|} = \frac{h}{K r_{\mathbf{L}}(K, h)} \quad (2.25)$$

berechnet. Mittels dieser Identität kann der Parameter $r_{\mathbf{L}}(K, h)$ in Gleichung (2.21) eliminiert, und diese auf die Magnetisierung pro Spin $m_{\mathbf{L}}(K, h)$ umgeschrieben werden. Dies führt auf die ebenfalls in impliziter Form vorliegende Zustandsgleichung $h = h(m_{\mathbf{L}}, K)$ des *Mean-Sphärischen-Modells*

$$(1 - m_{\mathbf{L}}^2)K = W_{d,\Omega}\left(\frac{h}{m_{\mathbf{L}}K} \middle| \mathbf{L}\right). \quad (2.26)$$

Aufgrund des eben erörterten unmittelbaren Zusammenhangs zwischen der Zustandsgleichung und der Bestimmungsgleichung (2.21) für den Parameter $r_{\mathbf{L}}(K, h)$, wird im Folgenden der Begriff „Zustandsgleichung“ auch für letztere synonym verwendet.

Abschließend soll nun noch eine weitere wichtige Relation angegeben werden: Der Zusammenhang zwischen dem Parameter $r_{\mathbf{L}}(K, h)$ und der Suszeptibilität

$$\chi_{\mathbf{L}}(K, h) \equiv \frac{\partial m_{\mathbf{L}}(K, h)}{\partial h} \quad (2.27)$$

in Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes. Dazu wird der Ausdruck für die Magnetisierung pro Spin auf der rechten Seite von Gleichung (2.25) in die Definitionsgleichung (2.27) der Suszeptibilität eingesetzt. Daraus folgt im Fall $h = 0$, dass

$$r_{\mathbf{L}}(K, 0) = \frac{1}{\chi_{\mathbf{L}}(K, 0)K}. \quad (2.28)$$

Der Parameter $r_{\mathbf{L}}$ entspricht somit im feldfreien Fall, bis auf einen Proportionalitätsfaktor, der inversen Nullfeld-Suszeptibilität $\chi_{\mathbf{L}}^{-1}(K, 0)$.

2.4 Lösung der Zustandsgleichung

Im vorangegangenen Abschnitt wurde die Zustandsgleichung (2.21) des in Abschnitt 2.1 beschriebenen allseits endlichen *Mean*-Sphärischen-Modells in impliziter Form hergeleitet. Das asymptotische Verhalten ihrer Lösung in der Umgebung des kritischen Punktes soll nun im Folgenden untersucht werden. Da in dieser Arbeit makroskopische Systeme mit der im Hinblick auf die Untersuchung des Casimir-Effekts wichtigen Filmgeometrie $L \times \infty^{d-1}$ betrachtet werden, wird zunächst auf den dementsprechenden Limes $L_{\alpha} \rightarrow \infty$ für alle $\alpha > 1$ übergegangen und die Filmdicke L_1 auf einen endlichen Wert $L_1 \equiv L$ gesetzt. Der Vektor der Systemlängen \mathbf{L} , der im vorangegangenen Abschnitt formal zur Kennzeichnung der auf das allseits endliche System bezogenen Größen verwendet wurde, wird in diesem Grenzfall durch ein skalares L ersetzt. Für die Modensumme $W_{d,\Omega}$ gelte beispielsweise

$$W_{d,\Omega}(r|L) \equiv \lim_{L_2, \dots, L_d \rightarrow \infty} W_{d,\Omega}(r|\mathbf{L}). \quad (2.29)$$

Entsprechend bezeichne

$$r_L(K, h) \equiv \lim_{L_2, \dots, L_d \rightarrow \infty} r_{\mathbf{L}}(K, h) \quad (2.30)$$

die Lösung der Zustandsgleichung (2.21) in diesem Grenzfall. Das asymptotische Verhalten dieser Lösung in der Umgebung des kritischen Punktes wird nun sowohl im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ als auch für das System mit endlicher Filmdicke $L < \infty$ untersucht.

2.4.1 Die Zustandsgleichung im thermodynamischen Limes

Im thermodynamischen Limes lautet die Zustandsgleichung (2.21)

$$K = \frac{h^2}{Kr_{\infty}^2} + W_{d,\Omega}(r_{\infty}|\infty). \quad (2.31)$$

Ihre Lösung $r_{\infty} \equiv r_{\infty}(K, h)$ verschwindet am kritischen Punkt $(K, h) = (K_{c,L=\infty}, 0)$, da gemäß Gleichung (2.28) der Parameter r_{∞} im feldfreien Fall proportional zur inversen Suszeptibilität χ_{∞}^{-1} ist, und χ_{∞} am kritischen Punkt divergiert. Gleichung (2.31) reduziert sich somit in diesem

Fall auf $K_{c,\infty} = W_{d,\Omega}(0|\infty)$ und definiert den kritischen Wert $K_{c,\infty} \propto T_{c,\infty}^{-1}$ des Parameters K , der sowohl von b als auch allen weiteren Koeffizienten in der Entwicklung (2.10) der Funktion $\Omega(\mathbf{q})$ abhängt. Führt man in der Zustandsgleichung (2.31) nun die linearen Skalenfelder

$$g_t \equiv K_{c,\infty} - K, \quad g_h \equiv h/\sqrt{K}, \quad (2.32)$$

der Temperatur und des äußeren Magnetfeldes ein, die die Abweichung der jeweiligen Größe von ihrem Wert am kritischen Punkt messen, so lautet diese

$$-g_t = \left(\frac{g_h}{r_\infty} \right)^2 + W_{d,\Omega}(r_\infty|\infty) - W_{d,\Omega}(0|\infty). \quad (2.33)$$

Um das asymptotische Verhalten der Lösung dieser Gleichung in der Umgebung des kritischen Punktes bestimmen zu können, ist zunächst das Verhalten der Modensumme $W_{d,\Omega}(r|\infty)$ für kleine Werte ihres Argumentes r zu ermitteln. Man findet, wie in den Gleichungen (A.21b) und (A.22) in Anhang A.2 angegeben, dass im Fall $2 < d < 4$ und $2 < \sigma < 4$ mit $d + \sigma \neq 6$

$$W_{d,\Omega}(r|\infty) - W_{d,\Omega}(0|\infty) \underset{r \rightarrow 0}{\approx} -A_d r^{(d-2)/2} - b B_{d,\sigma} r^{(d+\sigma-4)/2} + (w_d^{(\Lambda)} + b w_{d,\sigma}^{(\Lambda)}) r + O(b^2) \quad (2.34)$$

mit den universellen, d.h. von dem zur Berechnung der Modensumme $W_{d,\Omega}$ eingeführten Abschneideimpuls Λ unabhängigen Konstanten

$$A_d = -\frac{\Gamma(1 - \frac{d}{2})}{(4\pi)^{d/2}} \quad (2.35a)$$

und

$$B_{d,\sigma} = \frac{\pi(d + \sigma - 2)}{2(4\pi)^{d/2} \Gamma(\frac{d}{2}) \sin(\pi \frac{d+\sigma}{2})} \quad (2.35b)$$

mit der Gamma-Funktion $\Gamma(x)$. Die Koeffizienten $w_d^{(\Lambda)}$ und $w_{d,\sigma}^{(\Lambda)}$ hingegen sind nicht-universell, und die mit ihnen einhergehenden Terme entsprechen den führenden Korrekturen zu den Termen $\propto A_d$ und $\propto B_{d,\sigma}$ auf der rechten Seite von Gleichung (2.34).

Die in Gleichung (2.34) angegebene Entwicklung der Modensumme $W_{d,\Omega}(r|\infty)$ kann nun in die *Bulk*-Zustandsgleichung (2.33) eingesetzt und deren Lösung bestimmt werden. Beschränkt man sich dabei zunächst auf den feldfreien Fall $h = 0$, so erhält man

$$r_\infty|_{h=0} \underset{g_t \rightarrow 0}{\approx} \left(\frac{g_t}{A_d} \right)^\gamma \left[1 - \frac{2b B_{d,\sigma}}{(d-2)A_d} \left(\frac{g_t}{A_d} \right)^{\nu\omega_\sigma} + \frac{2(w_d^{(\Lambda)} + b w_{d,\sigma}^{(\Lambda)})}{(d-2)A_d} \left(\frac{g_t}{A_d} \right)^{\nu\omega} \right] \quad (2.36)$$

bis zur ersten Ordnung im Parameter b und den mit den Koeffizienten $w_d^{(\Lambda)}$ und $w_{d,\sigma}^{(\Lambda)}$ verbundenen Korrekturen. Die kritischen Exponenten γ und ν , der Exponent ω_σ der in die Korrektur eingeht die aus dem langreichweitigen Anteil des Paarpotentials resultiert, sowie der Wegner-Exponent ω

nehmen dabei ihre Werte im sphärischen Modell (siehe z.B. Gleichungen (92) und (93) in [88] und Gleichung (1.19) mit $\eta^{\text{SM}} = 0$)

$$\gamma^{\text{SM}} = 2\nu^{\text{SM}} = \frac{2}{d-2}, \quad \omega_\sigma^{\text{SM}} = \sigma - 2, \quad \omega^{\text{SM}} = 4 - d, \quad (2.37)$$

an. Das führende asymptotische Verhalten von $r_\infty|_{h=0}$ findet sich dabei in Übereinstimmung mit der zu erwartenden Divergenz der Nullfeld-Suszeptibilität $\chi_\infty(K, 0) \sim r_\infty^{-1}|_{h=0}$ am kritischen Punkt, in führender Ordnung proportional zu $g_t^{-\gamma}$.

Ausgehend von der in Gleichung (2.36) angegebenen Lösung der *Bulk*-Zustandsgleichung können nun die bislang nicht definierten Skalenfelder des langreichweitigen Anteils des Paarpotentials g_σ und der Wegner-Korrekturen g_ω eingeführt werden. Die Struktur dieser Lösung legt nahe, diese Skalenfelder, die in den Koeffizienten der entsprechenden Korrekturen zum führenden asymptotischen Verhalten auf der rechten Seite von Gleichung (2.36) auftreten, als

$$g_\sigma \equiv b, \quad g_\omega \equiv w_d^{(\Lambda)} + bw_{d,\sigma}^{(\Lambda)}, \quad (2.38)$$

zu definieren. Das Skalenfeld der Wegner-Korrekturen g_ω umfasst daher sowohl die erste Korrektur zum führenden kritischen Verhalten im rein kurzreichweitigen Fall, als auch die erste Korrektur des Terms $\propto b$, der aus dem langreichweitigen Anteil des Paarpotentials resultiert.

Auf der Grundlage dieser Vorüberlegungen kann nun die allgemeine Lösung der *Bulk*-Zustandsgleichung (2.33), die auch den Fall eines nichtverschwindenden äußeren Magnetfeldes berücksichtigt, angegeben werden. Diese genügt in der Umgebung des kritischen Punktes einer Skalenform

$$r_\infty \approx g_t^\gamma \mathcal{R}^{(\infty)}(g_h g_t^{-\Delta}, g_\sigma g_t^{\nu\omega_\sigma}, g_\omega g_t^{\nu\omega}) \quad (2.39a)$$

mit einer gemäß

$$\mathcal{R}^{(\infty)}(x_h, x_\sigma, x_\omega) = \mathcal{R}_0^{(\infty)}(x_h) + x_\sigma \mathcal{R}_\sigma^{(\infty)}(x_h) + x_\omega \mathcal{R}_\omega^{(\infty)}(x_h) + o(x_\sigma, x_\omega) \quad (2.39b)$$

in den Skalenfeldern g_σ und g_ω linearisierten Skalenfunktion und den kritischen Exponenten (2.37) im sphärischen Modell, sowie dem *Gap*-Exponenten $\Delta = \nu(d+2-\eta)/2$, dessen Wert im sphärischen Modell

$$\Delta^{\text{SM}} = \frac{d+2}{2(d-2)}, \quad (2.40)$$

beträgt. Die Funktion $\mathcal{R}_0^{(\infty)}$, die das führende asymptotische Verhalten von r_∞ beschreibt, ist dabei als Lösung der impliziten Gleichung

$$1 + x_h^2 [\mathcal{R}_0^{(\infty)}(x_h)]^{-2} = A_d [\mathcal{R}_0^{(\infty)}(x_h)]^{(d-2)/2} \quad (2.41a)$$

zu ermitteln. Ist die Lösung dieser Gleichung bekannt, können daraus gemäß

$$\mathcal{R}_\sigma^{(\infty)}(x_h) = \frac{-2B_{d,\sigma} [\mathcal{R}_0^{(\infty)}(x_h)]^{(d+\sigma+2)/2}}{(d-2)A_d [\mathcal{R}_0^{(\infty)}(x_h)]^{(d+2)/2} + 4x_h^2} \quad (2.41b)$$

und

$$\mathcal{R}_\omega^{(\infty)}(x_h) = \frac{2[\mathcal{R}_0^{(\infty)}(x_h)]^4}{(d-2)A_d[\mathcal{R}_0^{(\infty)}(x_h)]^{(d+2)/2} + 4x_h^2} \quad (2.41c)$$

die übrigen auf der rechten Seite von Gleichung (2.39b) auftretenden Funktionen erhalten werden. Im feldfreien Fall $g_h = 0$ führen obige Ergebnisse — wie zu erwarten — zu dem bereits in Gleichung (2.36) angegebenen asymptotischen Verhalten von $r_\infty|_{h=0}$.

In den vorangegangenen Ausführungen, die zur Lösung der *Bulk*-Zustandsgleichung geführt haben, ist der Fall $d + \sigma = 6$ der auch den im Hinblick auf reale Systeme wichtigen Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen in drei Dimensionen ($d = \sigma = 3$) einschließt, zunächst ausgenommen worden. Er ist gesondert zu betrachten, da er durch das Auftreten logarithmischer Anomalien sowohl in der Lösung der Zustandsgleichung als auch in der freien Energie und daraus abgeleiteten Größen wie zum Beispiel der Casimir-Kraft gekennzeichnet ist. Diese Anomalien sind sowohl im *Bulk* als auch im Fall endlicher Filmdicke vorhanden und wurden erstmals in [14] in einem System mit Paarpotentialen von der in Abschnitt 2.1 beschriebenen Form mit $d + \sigma = 6$ gefunden. Wie in § IV.B.2 in [39] gezeigt, sind sie (i) auf die im sphärischen Modell im Fall $d + \sigma = 6$ vorliegende Entartung des Wegner-Exponenten $\omega = 4 - d$ und des Exponenten $\omega_\sigma = \sigma - 2$ des langreichweitigen Anteils des Paarpotentials und (ii) auf das Auftreten des Terms $bw_{d,\sigma}^{(\Lambda)}$ im Skalenfeld der Wegner-Korrekturen g_ω zurückzuführen. Ihr mathematischer Ursprung liegt in den Konstanten $B_{d,\sigma}$ und $w_{d,\sigma}^{(\Lambda)}$, die über das asymptotische Verhalten (2.34) der Modensumme $W_{d,\Omega}(r|\infty)$ in die Zustandsgleichung (2.33) eingehen. Obgleich die Konstante $w_{d,\sigma}^{(\Lambda)}$ nicht-universell ist, besitzt sie gemäß

$$w_{d,\sigma}^{(\Lambda)} \underset{\sigma \rightarrow 6-d}{=} \frac{2K_d}{d + \sigma - 6} + w_{d,6-d}^{(\Lambda)\text{reg}} + O(d + \sigma - 6) \quad (2.42)$$

bei $\sigma = 6 - d$ einen universellen, d.h. Λ -unabhängigen Polterm mit dem für $2 < d < 4$ positiven Koeffizienten

$$K_d \equiv \int_{\mathbf{q}}^{(d)} \delta(|\mathbf{q}| - 1) = \frac{2}{(4\pi)^{d/2} \Gamma(\frac{d}{2})} \quad (2.43)$$

mit der Diracschen Delta-Funktion $\delta(x)$, wobei für Impulsraumintegrationen hier und im Folgenden die Notation

$$\int_{\mathbf{q}}^{(d)} \equiv \prod_{\alpha=1}^d \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_\alpha}{2\pi} \quad (2.44)$$

verwendet wird. Der auf der rechten Seite von Gleichung (2.42) im Limes $\sigma \rightarrow 6 - d$ auftretende Polterm kompensiert den in der Entwicklung der Konstanten $B_{d,\sigma}$ gemäß

$$B_{d,\sigma} \underset{\sigma \rightarrow 6-d}{=} \frac{2K_d}{d + \sigma - 6} - \frac{K_d}{2} + O(d + \sigma - 6) \quad (2.45)$$

vorhandenen Pol, der mit entgegengesetztem Vorzeichen in die Entwicklung (2.34) der Modensumme $W_{d,\Omega}(r|\infty)$ eingeht und dort zu einem Beitrag $\propto r \log r$ führt. Diese Entwicklung lautet

daher im Fall $2 < d < 4$ mit $d + \sigma = 6$

$$W_{d,\Omega}(r|\infty) - W_{d,\Omega}(0|\infty) \underset{r \rightarrow 0}{\approx} -A_d r^{(d-2)/2} + bK_d r \log r + (w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)})r + O(b^2) \quad (2.46)$$

mit der nicht-universellen Konstanten $\tilde{w}_d^{(\Lambda)} \equiv K_d/2 + w_{d,6-d}^{(\Lambda)\text{reg}}$. Dieser Ausdruck kann nun in die *Bulk*-Zustandsgleichung (2.33) eingesetzt und das asymptotische Verhalten ihrer Lösung bestimmt werden. Dabei ergibt sich

$$r_\infty \approx g_t^\gamma \left\{ \mathcal{R}_0^{(\infty)}(g_h g_t^{-\Delta}) + g_t^{\nu\omega} \mathcal{R}_\omega^{(\infty)}(g_h g_t^{-\Delta}) \left[w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)} + bK_d \log \left(g_t^\gamma \mathcal{R}_0^{(\infty)}(g_h g_t^{-\Delta}) \right) \right] \right\} \quad (2.47)$$

mit der in Gleichung (2.41c) definierten Funktion $\mathcal{R}_\omega^{(\infty)}$ und der Funktion $\mathcal{R}_0^{(\infty)}$, die als Lösung der impliziten Gleichung (2.41a) zu bestimmen ist. Für die kritischen Exponenten sind wieder ihre in den Gleichungen (2.37) und (2.40) angegebenen Werte im sphärischen Modell einzusetzen. Im feldfreien Fall $g_h = 0$ kann die implizite Gleichung (2.41a) analytisch gelöst werden. Man erhält $\mathcal{R}_0^{(\infty)}(0) = A_d^{2/(2-d)}$ und Gleichung (2.47) reduziert sich damit auf

$$r_\infty|_{h=0} \underset{g_t \rightarrow 0}{\approx} \left(\frac{g_t}{A_d} \right)^\gamma \left\{ 1 + \frac{2}{(d-2)A_d} \left(\frac{g_t}{A_d} \right)^{\nu\omega} \left[w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)} + b \frac{2K_d}{d-2} \log \left(\frac{g_t}{A_d} \right) \right] \right\}. \quad (2.48)$$

Auf ähnliche Weise wie der zu $b \log g_t$ proportionale Term auf der rechten Seite der vorangegangenen Gleichung, kommen auch die logarithmischen Korrekturen zustande, die an der oberen kritischen Dimension $d = d_o^* = 4$ auftreten. Genau wie $w_{d,\sigma}^{(\Lambda)}$ im Fall $\sigma = 6 - d$, weist der in die Entwicklung (2.34) der Modensumme $W_{d,\Omega}(r|\infty)$ eingehende nicht-universelle Koeffizient $w_d^{(\Lambda)}$ in vier Dimensionen einen Polterm auf (siehe § 2.2 in [97]). Dieser ist ebenfalls universell und hebt den in der Entwicklung der Konstanten A_d auftretenden Pol

$$A_d \underset{d \rightarrow 4}{=} -\frac{1}{8\pi^2(d-4)} + O(1) \quad (2.49)$$

auf, so dass die Summe der entsprechenden Terme auf der rechten Seite von Gleichung (2.34) in vier Dimensionen zu einem Beitrag $\propto r \log r$ führt. Für das führende asymptotische Verhalten der Lösung der Zustandsgleichung folgt daraus unmittelbar $r_\infty|_{h=0} \underset{g_t \rightarrow 0}{\sim} g_t/|\log g_t|$. Dieses Ergebnis stimmt überein mit der an der oberen kritischen Dimension zu erwartenden Divergenz der Nullfeld-Suszeptibilität $\chi_\infty(K, 0)$ in führender Ordnung proportional zu $g_t^{-\gamma} |\log g_t|$ am kritischen Punkt (siehe Gleichung (4.18) in [98] im Limes $n \rightarrow \infty$). Der kritische Exponent γ nimmt dabei seinen *Mean-Field*-Wert $\gamma^{\text{MF}} = 1$ an.

2.4.2 Zustandsgleichung des Systems mit endlicher Filmdicke

Ausgehend von der Zustandsgleichung (2.21) des allseits endlichen Systems, ergibt sich die Zustandsgleichung des Systems mit endlicher Filmdicke zu

$$K = \frac{h^2}{Kr_L^2} + W_{d,\Omega}(r_L|L) \quad (2.50)$$

in der vereinbarten Schreibweise. Um das asymptotische Verhalten ihrer Lösung $r_L \equiv r_L(K, h)$ in der Umgebung des kritischen Punktes zu bestimmen, wird zunächst auf beiden Seiten von Gleichung (2.50) der kritische Wert des Parameters K , $K_{c,\infty} = W_{d,\Omega}(0|\infty)$, abgezogen. Führt man nun die in den Gleichungen (2.32) definierten Skalenfelder g_t und g_h ein, lautet die Zustandsgleichung des Systems mit endlicher Filmdicke

$$-g_t = \left(\frac{g_h}{r_L}\right)^2 + W_{d,\Omega}(r_L|L) - W_{d,\Omega}(0|\infty). \quad (2.51)$$

Die hier eingehende Modensumme $W_{d,\Omega}(r|L)$ wird in Anhang A.2 berechnet. Gemäß den Gleichungen (A.19b, A.21b, A.22, A.23, A.26) gilt für ihr asymptotisches Verhalten im Fall $2 < d < 4$ und $2 < \sigma < 4$ mit $d + \sigma \neq 6$ bis zur ersten Ordnung im Parameter b

$$W_{d,\Omega}(r|L) - W_{d,\Omega}(0|\infty) \approx -A_d r^{(d-2)/2} + \frac{2}{rL^d} Q_{d,2}(rL^2) - b \left[B_{d,\sigma} r^{(d+\sigma-4)/2} - 2L^{-(d+\sigma-4)} Q'_{d,\sigma}(rL^2) \right] + (w_d^{(\Lambda)} + b w_{d,\sigma}^{(\Lambda)}) r + O(b^2) \quad (2.52)$$

mit der in Gleichung (A.25) in Anhang A.2 definierten Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ und ihrer ersten Ableitung

$$Q'_{d,\sigma}(y) \equiv \frac{\partial Q_{d,\sigma}(y)}{\partial y}. \quad (2.53)$$

Um die Zustandsgleichung des Systems mit endlicher Filmdicke in ihre *Finite-Size*-Skalenform zu überführen, muss sie auf die Skalenvariablen (1.24) und die skalierte inverse Suszeptibilität $\check{r}_L \equiv r_L L^{\gamma/\nu}$ umgeschrieben werden. Für die Skalenfelder g_t , g_h , g_σ und g_ω gelten dabei ihre in diesem Kapitel getroffenen Definitionen (2.32) und (2.38), und für die kritischen Exponenten sind ihre Werte im sphärischen Modell, Gleichungen (2.37) und (2.40), einzusetzen. Die Zustandsgleichung (2.51) des Systems mit endlicher Filmdicke zusammen mit dem für die Modensumme $W_{d,\Omega}(r|L)$ gefundenen Ausdruck (2.52) geht dann in ihre *Finite-Size*-Skalenform

$$\check{t} \approx - \left(\frac{\check{h}}{\check{r}_L}\right)^2 + A_d \check{r}_L^{(d-2)/2} - \frac{2Q_{d,2}(\check{r}_L)}{\check{r}_L} + \check{g}_\sigma \left[B_{d,\sigma} \check{r}_L^{(d+\sigma-4)/2} - 2Q'_{d,\sigma}(\check{r}_L) \right] - \check{g}_\omega \check{r}_L + o(\check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) \quad (2.54)$$

über. Somit besteht nunmehr keine explizite Abhängigkeit von der Filmdicke L , da jegliche L -Abhängigkeit von den Skalenvariablen getragen wird.

Gleichung (2.54) impliziert dabei, dass die Lösung $r_L \equiv r_L(K, h)$ der Zustandsgleichung des Systems mit endlicher Filmdicke eine *Finite-Size*-Skalenform

$$r_L \approx L^{-\gamma/\nu} \mathcal{R}(\check{t}, \check{h}, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) \quad (2.55a)$$

erfüllt, mit einer in den Skalenvariablen \check{g}_σ und \check{g}_ω zu linearisierenden *Finite-Size*-Skalenfunktion

$$\mathcal{R}(\check{t}, \check{h}, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) = \mathcal{R}_0(\check{t}, \check{h}) + \check{g}_\sigma \mathcal{R}_\sigma(\check{t}, \check{h}) + \check{g}_\omega \mathcal{R}_\omega(\check{t}, \check{h}) + o(\check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) \quad (2.55b)$$

und dem Quotienten der kritischen Exponenten γ/ν , dessen Wert gemäß den Gleichungen (2.37) im sphärischen Modell $\gamma^{\text{SM}}/\nu^{\text{SM}} = 2$ beträgt. Die in Gleichung (2.55b) als Entwicklungskoeffizienten auftretenden Funktionen können durch Einsetzen der Gleichungen (2.55) in die *Finite-Size*-Skalenform (2.54) der Zustandsgleichung des Systems mit endlicher Filmdicke mittels Koeffizientenvergleich bestimmt werden. Der führende Beitrag auf der rechten Seite von Gleichung (2.55b), die Funktion $\mathcal{R}_0 \equiv \mathcal{R}_0(\check{t}, \check{h})$, entspricht dabei der Lösung der impliziten Gleichung

$$\check{t} = - \left(\frac{\check{h}}{\mathcal{R}_0} \right)^2 + A_d \mathcal{R}_0^{(d-2)/2} - \frac{2Q_{d,2}(\mathcal{R}_0)}{\mathcal{R}_0}, \quad (2.56a)$$

mittels derer gemäß

$$\mathcal{R}_\sigma(\check{t}, \check{h}) = \frac{4\mathcal{R}_0^3 Q'_{d,\sigma}(\mathcal{R}_0) - 2B_{d,\sigma} \mathcal{R}_0^{(d+\sigma-2)/2}}{(d-2)A_d \mathcal{R}_0^{(d+2)/2} + \pi^{-1} \mathcal{R}_0^2 Q_{d-2,2}(\mathcal{R}_0) + 4\check{h}^2} \quad (2.56b)$$

und

$$\mathcal{R}_\omega(\check{t}, \check{h}) = \frac{2\mathcal{R}_0^4}{(d-2)A_d \mathcal{R}_0^{(d+2)/2} + \pi^{-1} \mathcal{R}_0^2 Q_{d-2,2}(\mathcal{R}_0) + 4\check{h}^2} \quad (2.56c)$$

die übrigen in der Entwicklung (2.55b) der *Finite-Size*-Skalenfunktion \mathcal{R} auftretenden Funktionen zu berechnen sind. Dabei reduzieren sich sämtliche für das System mit endlicher Filmdicke erhaltenen Ausdrücke im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ auf die entsprechenden *Bulk*-Resultate. Gemäß den Gleichungen (2.39) und (2.55) gilt für die *Finite-Size*-Skalenfunktion \mathcal{R} und ihre Entsprechung im *Bulk*-System, die Skalenfunktion $\mathcal{R}^{(\infty)}$,

$$\lim_{L \rightarrow \infty} L^{-\gamma/\nu} \mathcal{R}(g_t L^{1/\nu}, g_h L^{\Delta/\nu}, g_\sigma L^{-\omega_\sigma}, g_\omega L^{-\omega}) = g_t^\gamma \mathcal{R}^{(\infty)}(g_h g_t^{-\Delta}, g_\sigma g_t^{\nu\omega_\sigma}, g_\omega g_t^{\nu\omega}). \quad (2.57a)$$

Analoge Relationen können für die in den Entwicklungen (2.39b) und (2.55b) der Skalenfunktionen \mathcal{R} und $\mathcal{R}^{(\infty)}$ eingeführten Funktionen \mathcal{R}_i und $\mathcal{R}_i^{(\infty)}$ mit $i = 0, \sigma, \omega$ angegeben werden. Diese lauten

$$\lim_{L \rightarrow \infty} L^{-\gamma/\nu} \mathcal{R}_0(g_t L^{1/\nu}, g_h L^{\Delta/\nu}) = g_t^\gamma \mathcal{R}_0^{(\infty)}(g_h g_t^{-\Delta}), \quad (2.57b)$$

$$\lim_{L \rightarrow \infty} L^{-\gamma/\nu - \omega_\sigma} \mathcal{R}_\sigma(g_t L^{1/\nu}, g_h L^{\Delta/\nu}) = g_t^{\gamma + \nu\omega_\sigma} \mathcal{R}_\sigma^{(\infty)}(g_h g_t^{-\Delta}) \quad (2.57c)$$

und

$$\lim_{L \rightarrow \infty} L^{-\gamma/\nu - \omega} \mathcal{R}_\omega(g_t L^{1/\nu}, g_h L^{\Delta/\nu}) = g_t^{\gamma + \nu\omega} \mathcal{R}_\omega^{(\infty)}(g_h g_t^{-\Delta}). \quad (2.57d)$$

Abschließend bleibt nun der durch das Auftreten logarithmischer Anomalien gekennzeichnete Fall $2 < d < 4$ mit $d + \sigma = 6$ zu untersuchen, und hierfür das asymptotische Verhalten der Lösung der Zustandsgleichung des Systems mit endlicher Filmdicke herzuleiten. Dazu wird in der *Finite-Size*-Skalenform (2.54) der Zustandsgleichung zunächst die Skalenvariable \check{g}_ω der Wegner-Korrekturen den Gleichungen (1.24b) und (2.38) entsprechend durch $(w_d^{(\Lambda)} + b w_{d,\sigma}^{(\Lambda)}) L^{-\omega}$ ersetzt und anschließend der Limes $\sigma \rightarrow 6 - d$ gebildet. Die Polterme der Konstanten $w_{d,\sigma}^{(\Lambda)}$ und $B_{d,\sigma}$, die in diesem

Grenzfall auftreten (siehe Gleichungen (2.42) und (2.45)), heben sich auf, und die *Finite-Size*-Skalenform der Zustandsgleichung geht über in

$$\begin{aligned} \check{t} \approx & - \left(\frac{\check{h}}{\check{r}_L} \right)^2 + A_d \check{r}_L^{(d-2)/2} - \frac{2Q_{d,2}(\check{r}_L)}{\check{r}_L} - \check{g}_\sigma \left[K_d \check{r}_L \log \left(\frac{\check{r}_L}{L^2} \right) + 2Q'_{d,6-d}(\check{r}_L) \right] \\ & - (w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)}) L^{-\omega} \check{r}_L + \dots \end{aligned} \quad (2.58)$$

Die Auslassungspunkte ... stehen dabei für Terme höherer Ordnung und dabei insbesondere Terme von der Ordnung $O(b^2)$, die im Rahmen der zur Berechnung der Modensumme $W_{d,\Omega}(r|L)$ in Anhang A.2 verwendeten Approximation nicht berücksichtigt werden. Die Lösung dieser Gleichung lautet bis zur ersten Ordnung im Parameter b und den mit den Wegner-Korrekturen verbundenen Konstanten $w_d^{(\Lambda)}$ und $\tilde{w}_d^{(\Lambda)}$

$$r_L \approx L^{-2} \left\{ \mathcal{R}_0 + L^{-\omega} \mathcal{R}_\omega \left[w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)} + 2b \frac{Q'_{d,6-d}(\mathcal{R}_0)}{\mathcal{R}_0} + bK_d \log \left(\frac{\mathcal{R}_0}{L^2} \right) \right] \right\} \quad (2.59)$$

mit der in Gleichung (2.56c) definierten Funktion $\mathcal{R}_\omega \equiv \mathcal{R}_\omega(\check{t}, \check{h})$ und der Funktion $\mathcal{R}_0 \equiv \mathcal{R}_0(\check{t}, \check{h})$, die als Lösung der impliziten Gleichung (2.56a) zu ermitteln ist. Die im Fall $d + \sigma = 6$ vorhandenen logarithmischen Anomalien manifestieren sich in den *Finite-Size*-Skalenformen der Zustandsgleichung (2.58) und ihrer Lösung (2.59) durch das Auftreten explizit von der Filmdicke L abhängiger Terme $\propto \log L^2$. Anders als im Fall $d + \sigma \neq 6$ können diese Gleichungen daher nicht ausschließlich in skalierten Größen formuliert werden.

2.4.3 Relation zwischen der inversen *Bulk*-Suszeptibilität und der Suszeptibilität im System mit endlicher Filmdicke

Kombiniert man die Ergebnisse der beiden vorangegangenen Abschnitte, in denen die Lösungen der *Bulk*-Zustandsgleichung und der Zustandsgleichung des Systems mit endlicher Filmdicke berechnet wurden, so lässt sich daraus ein mathematischer Zusammenhang zwischen der inversen Suszeptibilität r_L des Systems mit endlicher Filmdicke und der inversen *Bulk*-Suszeptibilität r_∞ herleiten. Eine solche Relation wird benötigt, um die in der freien Energie f_L des Systems mit endlicher Filmdicke auftretende inverse Suszeptibilität r_L zu eliminieren, und f_L sowie die daraus zu berechnende Exzess-Freie-Energie f_{ex} auf die inverse *Bulk*-Suszeptibilität r_∞ umzuschreiben. Da r_∞ — als Besonderheit des *Mean-Sphärischen-Modells* — gemäß $r_\infty = \xi_\infty^{-2}$ (siehe z.B. [16] und § 3.1.2 in [57]) dem inversen Quadrat der wahren Korrelationslänge [56] entspricht, kann auf diese Weise die Exzess-Freie-Energie als Funktion der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ dargestellt werden.

Um die gewünschte Relation zwischen den inversen Suszeptibilitäten r_L und r_∞ zu erhalten, werden die *Bulk*-Zustandsgleichung (2.33) und die Zustandsgleichung (2.51) des Systems mit endlicher Filmdicke über das auf den linken Seiten beider Gleichungen auftretende Temperaturskalenfeld g_t gleichgesetzt und die Modensummen $W_{d,\Omega}(r|\infty)$ und $W_{d,\Omega}(r|L)$ durch ihr asymptotisches

Verhalten, Gleichungen (2.34) und (2.52), ersetzt. Aufgeschrieben in skalierten Größen lautet die auf diese Weise erhaltene Gleichung im Fall $2 < d < 4$ und $2 < \sigma < 4$ mit $d + \sigma \neq 6$

$$\begin{aligned} - \left(\frac{\check{h}}{\check{r}_L} \right)^2 + A_d \check{r}_L^{(d-2)/2} - \frac{2Q_{d,2}(\check{r}_L)}{\check{r}_L} + \check{g}_\sigma \left[B_{d,\sigma} \check{r}_L^{(d+\sigma-4)/2} - 2Q'_{d,\sigma}(\check{r}_L) \right] - \check{g}_\omega \check{r}_L \\ = - \left(\frac{\check{h}}{\check{r}_\infty} \right)^2 + A_d \check{r}_\infty^{(d-2)/2} + \check{g}_\sigma B_{d,\sigma} \check{r}_\infty^{(d+\sigma-4)/2} - \check{g}_\omega \check{r}_\infty \end{aligned} \quad (2.60)$$

mit den skalierten inversen Suszeptibilitäten $\check{r}_L \equiv r_L L^{\gamma/\nu}$ und $\check{r}_\infty \equiv r_\infty L^{\gamma/\nu}$, dabei ist wiederum $\gamma^{\text{SM}}/\nu^{\text{SM}} = 2$, und den Skalenvariablen (1.24). Ihre Lösung $\check{r}_L = \check{r}_L(\check{r}_\infty, \check{h}, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega)$ kann nun mittels eines Ansatzes von der Form

$$\check{r}_L \approx R_0(\check{r}_\infty, \check{h}) + \check{g}_\sigma R_\sigma(\check{r}_\infty, \check{h}) + \check{g}_\omega R_\omega(\check{r}_\infty, \check{h}) \quad (2.61)$$

bestimmt werden. Ersetzt man \check{r}_L in Gleichung (2.60) demgemäß und entwickelt die resultierenden Ausdrücke bis zur ersten Ordnung in den Skalenvariablen \check{g}_σ und \check{g}_ω , können die Funktionen R_0 , R_σ und R_ω im Rahmen eines Koeffizientenvergleichs bestimmt werden. Dieser ergibt für die Funktion $R_0 \equiv R_0(\check{r}_\infty, \check{h})$ die implizite Bestimmungsgleichung

$$\frac{2Q_{d,2}(R_0)}{R_0} = A_d \left(R_0^{(d-2)/2} - \check{r}_\infty^{(d-2)/2} \right) - \check{h}^2 \left(R_0^{-2} - \check{r}_\infty^{-2} \right), \quad (2.62a)$$

und für die restlichen in Gleichung (2.61) eingeführten Funktionen

$$R_\sigma(\check{r}_\infty, \check{h}) = \frac{2R_0^3 \left[B_{d,\sigma} \left(\check{r}_\infty^{(d+\sigma-4)/2} - R_0^{(d+\sigma-4)/2} \right) + 2Q'_{d,\sigma}(R_0) \right]}{(d-2)A_d R_0^{(d+2)/2} + \pi^{-1} R_0^2 Q_{d-2,2}(R_0) + 4\check{h}^2} \quad (2.62b)$$

und

$$R_\omega(\check{r}_\infty, \check{h}) = \frac{2R_0^3 (R_0 - \check{r}_\infty)}{(d-2)A_d R_0^{(d+2)/2} + \pi^{-1} R_0^2 Q_{d-2,2}(R_0) + 4\check{h}^2}. \quad (2.62c)$$

Um die Lösung von Gleichung (2.60) im Fall $2 < d < 4$ mit $d + \sigma = 6$ zu bestimmen, wird darin zunächst die Skalenvariable \check{g}_ω der Wegner-Korrekturen gemäß den Gleichungen (1.24b) und (2.38) durch $(w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)})L^{-\omega}$ ersetzt. Bildet man nun auf beiden Seiten den Limes $\sigma \rightarrow 6 - d$, heben sich die Polterme der Konstanten $w_{d,\sigma}^{(\Lambda)}$ und $B_{d,\sigma}$ auf, und man erhält

$$\begin{aligned} - \left(\frac{\check{h}}{\check{r}_L} \right)^2 + A_d \check{r}_L^{(d-2)/2} - \frac{2Q_{d,2}(\check{r}_L)}{\check{r}_L} - \check{g}_\sigma \left[K_d \check{r}_L \log \left(\frac{\check{r}_L}{L^2} \right) + 2Q'_{d,6-d}(\check{r}_L) \right] \\ - (w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)})L^{-\omega} \check{r}_L = - \left(\frac{\check{h}}{\check{r}_\infty} \right)^2 + A_d \check{r}_\infty^{(d-2)/2} - \check{g}_\sigma K_d \check{r}_\infty \log \left(\frac{\check{r}_\infty}{L^2} \right) \\ - (w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)})L^{-\omega} \check{r}_\infty. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Um die Lösung dieser Gleichung zu erhalten, die skalierte inverse Suszeptibilität \check{r}_L in Abhängigkeit von \check{r}_∞ , den Skalenvariablen \check{h} , \check{g}_σ und $(w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)})L^{-\omega}$ sowie der Filmdicke L , wird der Ansatz

$$\check{r}_L \approx R_0(\check{r}_\infty, \check{h}) + \check{g}_\sigma R_\sigma(\check{r}_\infty, \check{h}; L) + (w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)})L^{-\omega} R_\omega(\check{r}_\infty, \check{h}) \quad (2.64)$$

aufgestellt und für \check{r}_L auf der linken Seite von Gleichung (2.63) substituiert. Linearisiert man die sich dabei ergebenden Ausdrücke in der Skalenvariablen \check{g}_σ und den Konstanten $w_d^{(\Lambda)}$ und $\tilde{w}_d^{(\Lambda)}$, führt ein Koeffizientenvergleich auf die bereits im Fall $d+\sigma \neq 6$ erhaltene implizite Bestimmungsgleichung (2.62a) für die Funktion R_0 und den in Gleichung (2.62c) angegebenen Ausdruck für die Funktion R_ω . Die als Koeffizient der Skalenvariablen \check{g}_σ in Gleichung (2.64) eingeführte Funktion R_σ hingegen ergibt sich nun zu

$$R_\sigma(\check{r}_\infty, \check{h}; L) = \frac{2R_0^3 \left\{ K_d \left[R_0 \log\left(\frac{R_0}{L^2}\right) - \check{r}_\infty \log\left(\frac{\check{r}_\infty}{L^2}\right) \right] + 2Q'_{d,6-d}(R_0) \right\}}{(d-2)A_d R_0^{(d+2)/2} + \pi^{-1} R_0^2 Q_{d-2,2}(R_0) + 4\check{h}^2}, \quad (2.65)$$

und weist eine explizite Abhängigkeit von der Filmdicke L auf, die auf das Auftreten der logarithmischen Terme $\propto \log L^2$ in Gleichung (2.63) zurückzuführen ist.

Von primärem Interesse in dieser Arbeit ist der dreidimensionale Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen ($d = \sigma = 3$) in Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes, für den nun unter Verwendung der für $2 < d < 4$ und $d + \sigma = 6$ gültigen Gleichungen (2.62a, 2.62c, 2.65) die Skalenfunktionen R_0 , R_σ und R_ω berechnet werden sollen. Für die dazu benötigten Funktionen $Q_{1,2}(y)$, $Q_{3,2}(y)$ und die in Form ihrer Ableitung in die Skalenfunktion R_σ eingehende Funktion $Q_{3,3}(y)$ können, wie in den Anhängen A.4.2 und A.4.3 beschrieben, analytische Ausdrücke gefunden werden. Diese ergeben sich aus Gleichung (A.66) mit $m = 0$ und $m = 1$ zu

$$Q_{1,2}(y) = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{y}}{e^{\sqrt{y}} - 1} \quad (2.66)$$

und

$$Q_{3,2}(y) = -\frac{y}{4\pi} \log\left(1 - e^{-\sqrt{y}}\right), \quad (2.67)$$

und durch Ableiten von Gleichung (A.73) nach y erhält man

$$Q'_{3,3}(y) = \frac{1}{12} + \frac{y}{2\pi^2} \left[\frac{3}{4} - \log\left(\frac{\sqrt{y}}{2\pi}\right) \right] + \frac{3\sqrt{y}}{4\pi} \left\{ \frac{\pi}{4} + \text{Im} \left[\log \Gamma\left(i\frac{\sqrt{y}}{2\pi}\right) + i\frac{\sqrt{y}}{6\pi} \psi\left(i\frac{\sqrt{y}}{2\pi}\right) \right] \right\} \quad (2.68)$$

mit dem Imaginärteil $\text{Im}(\dots)$ und der Digamma-Funktion (siehe z.B. § 8.36 in [99])

$$\psi(x) = \frac{d \log \Gamma(x)}{dx}. \quad (2.69)$$

Der für die Funktion $Q_{3,2}(y)$ erhaltene Ausdruck (2.67) wird nun in die implizite Bestimmungsgleichung der Skalenfunktion R_0 , Gleichung (2.62a) mit $d = 3$ und $A_3 = (4\pi)^{-1}$, eingesetzt. Ihre Lösung kann im feldfreien Fall $\check{h} = 0$ in geschlossen analytischer Form angegeben werden. Sie ergibt sich durch Auflösen nach R_0 zu

$$R_0(\check{r}_\infty, 0) = 4 \operatorname{arccsch}^2\left(2e^{-\sqrt{\check{r}_\infty}/2}\right) \quad (2.70a)$$

$$= 4 \log^2 \left[\frac{1}{2} \left(e^{\sqrt{\check{r}_\infty}/2} + \sqrt{4 + e^{\sqrt{\check{r}_\infty}}} \right) \right] \quad (2.70b)$$

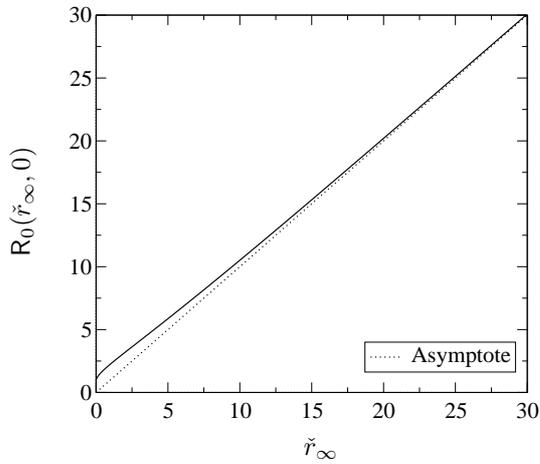


Abbildung 6: Auftragung der Skalenfunktion $R_0(\check{r}_\infty, 0)$ des *Mean*-Sphärischen-Modells über der skalierten inversen *Bulk*-Suszeptibilität \check{r}_∞ im dreidimensionalen Fall ohne äußeres Magnetfeld. Ihre Asymptote $R_0(\check{r}_\infty, 0) \underset{\check{r}_\infty \rightarrow \infty}{\approx} \check{r}_\infty$ (siehe Gleichung (2.71)) ist als punktierte Linie dargestellt.

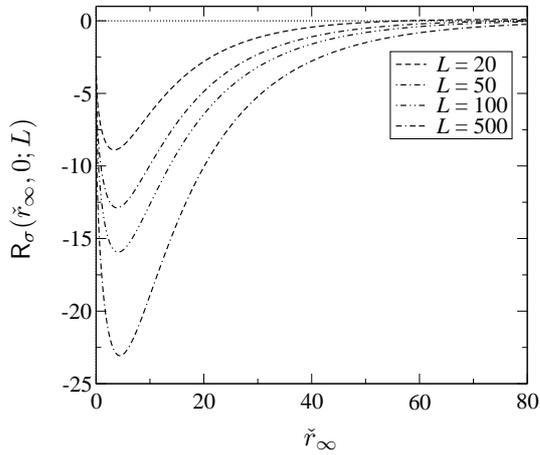


Abbildung 7: Auftragung der Skalenfunktion $R_\sigma(\check{r}_\infty, 0; L)$ des *Mean*-Sphärischen-Modells über der skalierten inversen *Bulk*-Suszeptibilität \check{r}_∞ im dreidimensionalen Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen ($d = \sigma = 3$) in Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes für die Filmdicken $L = 20, 50, 100, 500$.

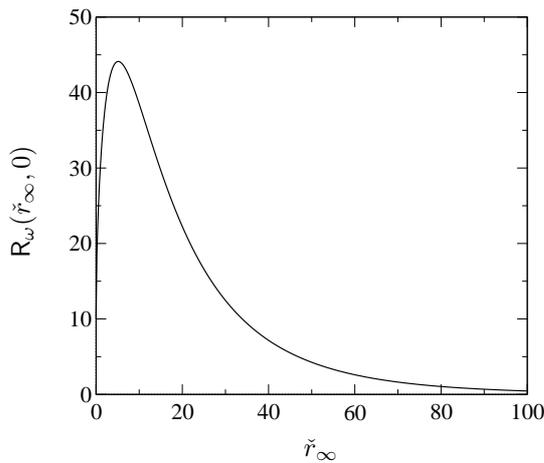


Abbildung 8: Auftragung der Skalenfunktion $R_\omega(\check{r}_\infty, 0)$ des *Mean*-Sphärischen-Modells über der skalierten inversen *Bulk*-Suszeptibilität \check{r}_∞ im dreidimensionalen Fall ohne äußeres Magnetfeld.

und kann nun in die Ausdrücke für die Skalenfunktionen R_σ und R_ω , Gleichungen (2.62c) und (2.65) mit $d = \sigma = 3$, $\check{h} = 0$ und $K_3 = (2\pi^2)^{-1}$, eingesetzt werden. Die auf diese Weise erhaltenen Skalenfunktionen $R_0(\check{r}_\infty, 0)$, $R_\sigma(\check{r}_\infty, 0; L)$ und $R_\omega(\check{r}_\infty, 0)$ sind in den Abbildungen 6–8 dargestellt. Da die inverse Suszeptibilität r_L des Systems mit endlicher Filmdicke im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ in die inverse *Bulk*-Suszeptibilität r_∞ übergeht, folgt daraus für das asymptotische Verhalten der Skalenfunktion R_0 ,

$$R_0(\check{r}_\infty, \check{h}) \underset{\check{r}_\infty \rightarrow \infty}{\approx} \check{r}_\infty \quad (2.71)$$

für $|\check{h}| < \infty$, während die mit den irrelevanten Skalenfeldern g_σ und g_ω einhergehenden Skalenfunktionen R_σ und R_ω in den Gleichungen (2.61) und (2.64) in diesem Grenzfall verschwinden.

2.5 Skalenverhalten der freien Energie, Exzess-Freien-Energie und Casimir-Kraft

In Abschnitt 2.3 ist die freie Energie des d -dimensionalen *Mean*-Sphärischen-Modells auf einem allseits endlichen hyperkubischen Gitter hergeleitet worden. Der dabei erhaltene Ausdruck (2.17) soll nun nach Übergang auf die Filmgeometrie $L \times \infty^{d-1}$ weiter ausgewertet werden. Dazu wird in Gleichung (2.17) zunächst für die Systemlängen L_α mit $\alpha > 1$ der Grenzübergang $L_\alpha \rightarrow \infty$ vollzogen, L_1 auf einen endlichen Wert $L_1 \equiv L$ gesetzt und daraus im Folgenden die freie Energie, die Exzess-Freie-Energie und die Casimir-Kraft einschließlich ihrer aus dem langreichweitigen Anteil des Paarpotentials resultierenden Korrektur sowie der Wegner-Korrekturen hergeleitet. Wie auch schon in den vorangegangenen Abschnitten, sind dabei die beiden Fälle $d + \sigma \neq 6$ und $d + \sigma = 6$ zu unterscheiden.

2.5.1 Freie Energie des Systems mit endlicher Filmdicke und im thermodynamischen Limes

Ausgehend von Gleichung (2.17) ergibt sich die reduzierte freie Energie des *Mean*-Sphärischen-Modells der Geometrie $L \times \infty^{d-1}$ pro Spin und Flächeneinheit der $(d - 1)$ -dimensionalen Querschnittsfläche unendlicher Ausdehnung zu

$$f_L(K, h) = Lf^{(0)}(K) + \frac{L}{2} \sup_{r>0} \left\{ 2 \left[U_{d,\Omega}(r|L) - U_{d,\Omega}(0|\infty) \right] - Kr - \frac{h^2}{Kr} \right\}. \quad (2.72a)$$

Dabei bezeichnet

$$f^{(0)}(K) = \frac{1}{2} \left[\log \left(\frac{K}{2\pi} \right) - \frac{K}{v_2} \right] + U_{d,\Omega}(0|\infty) \quad (2.72b)$$

einen regulären Hintergrundterm, der für das Verhalten der freien Energie in der Umgebung des kritischen Punktes unerheblich ist. Die in Gleichung (2.72a) ebenfalls auftretende Modensumme

$U_{d,\Omega}(r|L)$ wird in Anhang A.2 berechnet. Unter Verwendung der Gleichungen (A.19a, A.21a, A.28–A.36) sowie des Grenzwertes

$$\lim_{y \rightarrow 0} \frac{4\pi Q_{d+2,2}(y)}{y} = -\Delta_{\text{C}}^{\text{GM}}(d) \quad (2.73)$$

und des Zusammenhangs zwischen den Funktionen $Q_{d,\sigma}(y)$ und $Q_{d,\sigma+2}(y)$,

$$-\frac{Q_{d,\sigma+2}(y)}{y} = \Delta_{\sigma,\text{C}}^{\text{GM}}(d, \sigma) + Q_{d,\sigma}(y), \quad (2.74)$$

folgt im Fall $2 < d < 4$ und $2 < \sigma < 4$ mit $d + \sigma \neq 6$,

$$\begin{aligned} U_{d,\Omega}(r|L) - U_{d,\Omega}(0|\infty) &\approx -\frac{A_d}{d} r^{d/2} - \frac{4\pi Q_{d+2,2}(rL^2)}{rL^{d+2}} - b \left[\frac{B_{d,\sigma}}{d + \sigma - 2} r^{(d+\sigma-2)/2} \right. \\ &\quad \left. - \Delta_{\sigma,\text{C}}^{\text{GM}}(d, \sigma) - Q_{d,\sigma}(\check{r}) \right] + \frac{w_d^{(\Lambda)} + bw_{d,\sigma}^{(\Lambda)}}{4} r^2 + \frac{1}{2} W_{d,\Omega}(0|\infty) r \\ &\quad + O(b^2), \end{aligned} \quad (2.75)$$

bis zur ersten Ordnung im Parameter b und den mit den Konstanten $w_d^{(\Lambda)}$ und $w_{d,\sigma}^{(\Lambda)}$ einhergehenden Korrekturen. Die bei der Herleitung dieses Ausdrucks verwendeten Identitäten (2.73) und (2.74) ergeben sich unmittelbar aus der Potenzreihendarstellung der Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$, die in Gleichung (A.59) in Anhang A.4.1 angegeben ist. Dabei entsprechen

$$\Delta_{\text{C}}^{\text{GM}}(d) = -\pi^{-d/2} \Gamma\left(\frac{d}{2}\right) \zeta(d) \quad (2.76a)$$

und

$$\Delta_{\sigma,\text{C}}^{\text{GM}}(d, \sigma) = -\frac{2^{\sigma-2} \Gamma\left(\frac{d+\sigma-2}{2}\right) \zeta(d + \sigma - 2)}{\pi^{d/2} \Gamma\left(1 - \frac{\sigma}{2}\right)} \quad (2.76b)$$

mit der Riemannschen Zeta-Funktion $\zeta(s)$ den Amplituden (1.27a) und (1.27b) im Gaußschen Modell.

Setzt man den für die Modensumme erhaltenen Ausdruck (2.75) nun in Gleichung (2.72a) ein, so kann diese durch Umschreiben auf die skalierte inverse Suszeptibilität \check{r}_L und die Skalenvvariablen (1.24) mit den im Rahmen des *Mean*-Sphärischen-Modells getroffenen Definitionen für die Skalenfelder g_t , g_h , g_σ und g_ω , Gleichungen (2.32) und (2.38), in ihre *Finite-Size*-Skalenform überführt werden. Diese lautet

$$L^{d-1}(f_L - Lf^{(0)}) \approx \Upsilon(\check{t}, \check{h}, \check{r}, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) \Big|_{\check{r}=\check{r}_L} \quad (2.77a)$$

im Fall $2 < d < 4$ und $2 < \sigma < 4$ mit $d + \sigma \neq 6$, mit der Skalenfunktion

$$\begin{aligned} \Upsilon(\check{t}, \check{h}, \check{r}, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) &= \frac{\check{t}}{2} \check{r} - \frac{\check{h}^2}{2\check{r}} - \frac{A_d}{d} \check{r}^{d/2} - \frac{4\pi Q_{d+2,2}(\check{r})}{\check{r}} - \check{g}_\sigma \left[\frac{B_{d,\sigma}}{d + \sigma - 2} \check{r}^{(d+\sigma-2)/2} \right. \\ &\quad \left. - \Delta_{\sigma,\text{C}}^{\text{GM}}(d, \sigma) - Q_{d,\sigma}(\check{r}) \right] + \frac{\check{g}_\omega}{4} \check{r}^2 + o(\check{g}_\sigma, \check{g}_\omega), \end{aligned} \quad (2.77b)$$

wobei der als Argument von Υ auf der rechten Seite von Gleichung (2.77a) auftretende skalierte Parameter \check{r} durch die Lösung \check{r}_L der Zustandsgleichung (2.54) des Systems mit endlicher Filmdicke zu ersetzen ist. Diese entspricht, wie in Abschnitt 2.3 erörtert, dem Supremum $\sup_{r>0}\{\dots\}$ auf der rechten Seite von Gleichung (2.72a) und somit gilt

$$\left. \frac{\partial \Upsilon(\check{t}, \check{h}, \check{r}, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega)}{\partial \check{r}} \right|_{\check{r}=\check{r}_L} = 0. \quad (2.78)$$

Unter Verwendung der Skalenform (2.77a) der freien Energie des Systems mit endlicher Filmdicke zusammen mit dem für die Skalenfunktion Υ erhaltenen Ausdruck kann nun auch die freie Energie pro Volumeneinheit des *Bulk*-Systems berechnet werden. Dazu wird zunächst für die Skalenfunktion Υ auf der rechten Seite der Skalenform (2.77a) gemäß Gleichung (2.77b) substituiert, und die dabei erhaltene Gleichung durch L^d dividiert. Ersetzt man nun die auftretenden Funktionen $Q_{d,\sigma}(y)$ durch die führenden Terme ihrer in Anhang A.4.4 hergeleiteten asymptotischen Entwicklungen für große Werte ihrer Argumente, diese lauten (siehe Gleichungen (A.83a) und (A.88a))

$$Q_{d,2}(y) \underset{y \rightarrow \infty}{=} \frac{y^{(d+1)/4}}{2(2\pi)^{(d-1)/2}} e^{-\sqrt{y}} \left[1 + O(y^{-1/2}) \right] \quad (2.79a)$$

im Fall $\sigma = 2$ und

$$Q_{d,\sigma \neq 2}(y) \underset{y \rightarrow \infty}{=} -\Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d, \sigma) + O(y^{-1}), \quad (2.79b)$$

im Fall $\sigma \neq 2$, kann der thermodynamische Limes $L \rightarrow \infty$ vollzogen werden. Dies ergibt für die freie Energie pro Volumeneinheit des *Bulk*-Systems f_{bk} ,

$$f_{\text{bk}} - f^{(0)} \approx \Upsilon^{(\infty)}(g_t, g_h, r, g_\sigma, g_\omega) \Big|_{r=r_\infty} \quad (2.80a)$$

mit der Funktion

$$\Upsilon^{(\infty)}(g_t, g_h, r, g_\sigma, g_\omega) = \frac{g_t}{2} r - \frac{g_h^2}{2r} - \frac{A_d}{d} r^{d/2} - g_\sigma \frac{B_{d,\sigma}}{d + \sigma - 2} r^{(d+\sigma-2)/2} + \frac{g_\omega}{4} r^2 + o(g_\sigma, g_\omega). \quad (2.80b)$$

Wie in Gleichung (2.80a) angedeutet, ist für den als Argument der Funktion $\Upsilon^{(\infty)}$ auftretenden Parameter r die Lösung r_∞ der *Bulk*-Zustandsgleichung (2.33) einzusetzen, die gemäß

$$\left. \frac{\partial \Upsilon^{(\infty)}(g_t, g_h, r, g_\sigma, g_\omega)}{\partial r} \right|_{r=r_\infty} = 0 \quad (2.81)$$

aus $\Upsilon^{(\infty)}$ erhalten werden kann.

Es bleibt nun der Fall $2 < d < 4$ mit $d + \sigma = 6$ zu betrachten und auch hierfür sowohl die freie Energie des Systems mit endlicher Filmdicke als auch des *Bulk*-Systems zu berechnen. Dazu wird zunächst der für die Skalenfunktion Υ hergeleitete Ausdruck (2.77b) in die Skalenform (2.77a) der freien Energie des Systems mit endlicher Filmdicke eingesetzt und der Limes $\sigma \rightarrow 6 - d$ vollzogen. Die in diesem Grenzfall auftretenden Polterme der Konstanten $B_{d,\sigma}$ und $w_{d,\sigma}^{(\Lambda)}$ (siehe

Gleichungen (2.42) und (2.45)) heben sich auf, und die *Finite-Size*-Skalenform der freien Energie des Systems mit endlicher Filmdicke geht über in

$$L^{d-1}(f_L - Lf^{(0)}) \approx \frac{\check{t}}{2}\check{r}_L - \frac{\check{h}^2}{2\check{r}_L} - \frac{A_d}{d}\check{r}_L^{d/2} - \frac{4\pi Q_{d+2,2}(\check{r}_L)}{\check{r}_L} + \check{g}_\sigma \left[\Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d, 6-d) + Q_{d,6-d}(\check{r}_L) + \frac{K_d}{4}\check{r}_L^2 \log\left(\frac{\check{r}_L}{L^2}\right) \right] + (w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)})L^{-\omega}\frac{\check{r}_L^2}{4} + \dots, \quad (2.82)$$

wobei \check{r}_L der Lösung der Zustandsgleichung (2.58) des Systems mit endlicher Filmdicke im Fall $d + \sigma = 6$ entspricht. Die Auslassungspunkte stehen dabei wiederum für Korrekturen höherer Ordnung, insbesondere Terme von der Ordnung $O(b^2)$, die im Rahmen der Approximation, die bei der Berechnung der Modensumme $U_{d,\Omega}(r|L)$ durchgeführt wird, nicht berücksichtigt werden.

Wie in der Zustandsgleichung (2.58) des Systems mit endlicher Filmdicke im Fall $d + \sigma = 6$ als auch in deren Lösung r_L , Gleichung (2.59), ist auch in dem Ausdruck $\propto \check{g}_\sigma$ auf der rechten Seite von Gleichung (2.82) das Auftreten eines explizit von der Filmdicke L abhängigen Terms $\propto \log L^2$ zu beobachten. Aufgrunddessen kann auch die freie Energie im Fall $d + \sigma = 6$ nicht ausschließlich durch die skalierten Größen ausgedrückt werden.

Dividiert man Gleichung (2.82) durch L^d so kann unter Berücksichtigung des asymptotischen Verhaltens (2.79) der Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ der thermodynamische Limes $L \rightarrow \infty$ vorgenommen werden. Daraus ergibt sich die freie Energie pro Volumeneinheit des *Bulk*-Systems f_{bk} zu

$$f_{\text{bk}} - f^{(0)} \approx \frac{g_t}{2}r_\infty - \frac{g_h^2}{2r_\infty} - \frac{A_d}{d}r_\infty^{d/2} + g_\sigma \frac{K_d}{4}r_\infty^2 \log(r_\infty) + (w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)})\frac{r_\infty^2}{4} + \dots \quad (2.83)$$

mit der Lösung r_∞ der *Bulk*-Zustandsgleichung (2.33) im Fall $2 < d < 4$ mit $d + \sigma = 6$.

2.5.2 Die Exzess-Freie-Energie

Unter Verwendung der im vorangegangenen Abschnitt hergeleiteten Ausdrücke für die freie Energie f_L des Systems mit endlicher Filmdicke und des *Bulk*-Systems f_{bk} , kann nun die in Gleichung (1.21) definierte Exzess-Freie-Energie berechnet und auf die skalierte inverse *Bulk*-Suszeptibilität $\check{r}_\infty \equiv r_\infty L^2$ umgeschrieben werden. Dies ergibt, da wie zu Beginn des Abschnitts 2.4.3 erörtert r_∞ im *Mean*-Sphärischen-Modell dem inversen Quadrat der *Bulk*-Korrelationslänge ξ_∞ entspricht, die Exzess-Freie-Energie in Abhängigkeit von der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ . Wie in den vorangegangenen Abschnitten, wird dabei zunächst der Fall $2 < d < 4$ und $2 < \sigma < 4$ mit $d + \sigma \neq 6$ betrachtet, und dazu die in diesem Fall gültigen Ausdrücke für f_L und f_{bk} , Gleichungen (2.77) und (2.80), in die Definitionsgleichung (1.21) der Exzess-Freien-Energie eingesetzt.

Aufgeschrieben in skalierten Größen lautet diese dann

$$\begin{aligned}
L^{d-1} f_{\text{ex}} \approx & \frac{\check{t}}{2} (\check{r}_L - \check{r}_\infty) - \frac{\check{h}^2}{2} \left(\frac{1}{\check{r}_L} - \frac{1}{\check{r}_\infty} \right) - \frac{A_d}{d} \left(\check{r}_L^{d/2} - \check{r}_\infty^{d/2} \right) - \frac{4\pi Q_{d+2,2}(\check{r}_L)}{\check{r}_L} \\
& - \check{g}_\sigma \left\{ \frac{B_{d,\sigma}}{d+\sigma-2} \left[\check{r}_L^{(d+\sigma-2)/2} - \check{r}_\infty^{(d+\sigma-2)/2} \right] - \Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d, \sigma) - Q_{d,\sigma}(\check{r}_L) \right\} \\
& + \frac{\check{g}_\omega}{4} (\check{r}_L^2 - \check{r}_\infty^2) + o(\check{g}_\sigma, \check{g}_\omega). \tag{2.84}
\end{aligned}$$

Um diesen Ausdruck nun vollständig auf die skalierte inverse *Bulk*-Suszeptibilität \check{r}_∞ umzuschreiben, wird in einem nächsten Schritt die skalierte inverse Suszeptibilität \check{r}_L des Systems mit endlicher Filmdicke unter Verwendung des in Abschnitt 2.4.3 hergeleiteten Zusammenhangs (2.61) zwischen \check{r}_L und \check{r}_∞ ersetzt, und die Temperaturskalenvariable \check{t} mit Hilfe der skalierten *Bulk*-Zustandsgleichung eliminiert. Letztere kann aus Gleichung (2.33) zusammen mit dem für das asymptotische Verhalten der Modensumme $W_{d,\Omega}(r|\infty)$ im Fall $d + \sigma \neq 6$ hergeleiteten Ausdruck (2.34) durch Umschreiben auf die Skalenvariablen (1.24) mit den im Rahmen des *Mean-Sphärischen-Modells* getroffenen Definitionen (2.38) für die Skalenfelder g_σ und g_ω erhalten werden, und lautet

$$\check{t} \approx - \left(\frac{\check{h}}{\check{r}_\infty} \right)^2 + A_d \check{r}_\infty^{(d-2)/2} + \check{g}_\sigma B_{d,\sigma} \check{r}_\infty^{(d+\sigma-4)/2} - \check{g}_\omega \check{r}_\infty + o(\check{g}_\sigma, \check{g}_\omega). \tag{2.85}$$

Führt man diese Ersetzungen auf der rechten Seite von Gleichung (2.84) durch, so ergibt sich daraus, dass die Exzess-Freie-Energie in der Umgebung des kritischen Punktes eine *Finite-Size*-Skalenform

$$f_{\text{ex}} \approx L^{-(d-1)} Y(\check{r}_\infty, \check{h}, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) \tag{2.86a}$$

mit einer Skalenfunktion Y erfüllt, die gemäß

$$Y(\check{r}_\infty, \check{h}, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) = Y_0(\check{r}_\infty, \check{h}) + \check{g}_\sigma Y_\sigma(\check{r}_\infty, \check{h}) + \check{g}_\omega Y_\omega(\check{r}_\infty, \check{h}) + o(\check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) \tag{2.86b}$$

in den Skalenvariablen \check{g}_σ und \check{g}_ω zu linearisieren ist. Die Skalenfunktion Y_0 , die das führende asymptotische Verhalten der Exzess-Freien-Energie im rein kurzreichweitigen Fall beschreibt, ergibt sich dabei zu

$$Y_0(\check{r}_\infty, \check{h}) = - \frac{\check{h}^2}{2} \frac{(R_0 - \check{r}_\infty)^2}{R_0 \check{r}_\infty^2} + \frac{A_d}{2} \check{r}_\infty^{(d-2)/2} (R_0 - \check{r}_\infty) - \frac{A_d}{d} (R_0^{d/2} - \check{r}_\infty^{d/2}) - \frac{4\pi Q_{d+2,2}(R_0)}{R_0} \tag{2.87a}$$

mit der in Abschnitt 2.4.3 eingeführten Skalenfunktion $R_0 \equiv R_0(\check{r}_\infty, \check{h})$, die als Lösung der impliziten Gleichung (2.62a) zu bestimmen ist. Für die Skalenfunktionen Y_σ und Y_ω , die mit der Korrektur aus dem langreichweitigen Anteil des Paarpotentials und den Wegner-Korrekturen einhergehen, erhält man

$$Y_\sigma(\check{r}_\infty, \check{h}) = \Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d, \sigma) + Q_{d,\sigma}(R_0) - B_{d,\sigma} \left[\frac{R_0^{(d+\sigma-2)/2} - \check{r}_\infty^{(d+\sigma-2)/2}}{d+\sigma-2} - \frac{R_0 - \check{r}_\infty}{2} \check{r}_\infty^{(d+\sigma-4)/2} \right] \tag{2.87b}$$

beziehungsweise

$$Y_\omega(\check{r}_\infty, \check{h}) = \frac{1}{4} \left(R_0 - \check{r}_\infty \right)^2. \quad (2.87c)$$

Auf analoge Weise wird nun vorgegangen, um auch den Fall $2 < d < 4$ mit $d + \sigma = 6$ zu behandeln. Setzt man die entsprechenden Ausdrücke für f_L und f_{bk} , Gleichungen (2.82) und (2.83) in die Definitionsgleichung (1.21) der Exzess-Freien-Energie ein, so ergibt sich daraus

$$\begin{aligned} L^{d-1} f_{\text{ex}} \approx & \frac{\check{t}}{2} \left(\check{r}_L - \check{r}_\infty \right) - \frac{\check{h}^2}{2} \left(\frac{1}{\check{r}_L} - \frac{1}{\check{r}_\infty} \right) - \frac{A_d}{d} \left(\check{r}_L^{d/2} - \check{r}_\infty^{d/2} \right) - \frac{4\pi Q_{d+2,2}(\check{r}_L)}{\check{r}_L} \\ & + \check{g}_\sigma \left\{ \Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d, 6-d) + Q_{d,6-d}(\check{r}_L) + \frac{K_d}{4} \left[\check{r}_L^2 \log \left(\frac{\check{r}_L}{L^2} \right) - \check{r}_\infty^2 \log \left(\frac{\check{r}_\infty}{L^2} \right) \right] \right\} \\ & + \frac{w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)}}{4} L^{-\omega} \left(\check{r}_L^2 - \check{r}_\infty^2 \right) + \dots \end{aligned} \quad (2.88)$$

nach Umschreiben auf die skalierten Größen. Die skalierte inverse Suszeptibilität \check{r}_L kann nun unter Verwendung der für den Fall $2 < d < 4$ mit $d + \sigma = 6$ hergeleiteten Relation (2.64) zwischen \check{r}_L und \check{r}_∞ ersetzt werden. Um die Temperaturskalenvariable \check{t} als Funktion von \check{r}_∞ darzustellen, wird wiederum die skalierte *Bulk*-Zustandsgleichung verwendet. Diese folgt unmittelbar durch Einsetzen des Ausdrucks (2.46) für das asymptotische Verhalten der Modensumme $W_{d,\Omega}(r|\infty)$ im Fall $2 < d < 4$ mit $d + \sigma = 6$ in Gleichung (2.33) und Umschreiben auf die Skalenvariablen (1.24) mit der Definition (2.38) des Skalenfeldes g_σ im Rahmen des *Mean*-Sphärischen-Modells. Dies führt auf

$$\check{t} \approx - \left(\frac{\check{h}}{\check{r}_\infty} \right)^2 + A_d \check{r}_\infty^{(d-2)/2} - \check{g}_\sigma K_d \check{r}_\infty \log \left(\frac{\check{r}_\infty}{L^2} \right) - (w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)}) L^{-\omega} \check{r}_\infty + \dots, \quad (2.89)$$

und die rechte Seite dieser Gleichung kann nun in Gleichung (2.88) für die Temperaturskalenvariable \check{t} eingesetzt werden. Linearisiert man den hierbei erhaltenen Ausdruck im Skalenfeld \check{g}_σ und den nicht-universellen Konstanten $w_d^{(\Lambda)}$ und $\tilde{w}_d^{(\Lambda)}$, folgt daraus eine Entwicklung der Exzess-Freien-Energie von der Form

$$L^{d-1} f_{\text{ex}} \approx Y_0(\check{r}_\infty, \check{h}) + \check{g}_\sigma Y_\sigma(\check{r}_\infty, \check{h}; L) + (w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)}) L^{-\omega} Y_\omega(\check{r}_\infty, \check{h}) + \dots \quad (2.90)$$

Für die Skalenfunktionen Y_0 und Y_ω ergeben sich dabei die bereits im Fall $d + \sigma \neq 6$ erhaltenen Ausdrücke (2.87a) und (2.87c), während sich die Skalenfunktion Y_σ zu

$$\begin{aligned} Y_\sigma(\check{r}_\infty, \check{h}; L) = & \Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d, 6-d) + Q_{d,6-d}(R_0) + \frac{K_d}{4} \left[R_0^2 \log \left(\frac{R_0}{L^2} \right) - \check{r}_\infty \left(2R_0 - \check{r}_\infty \right) \times \right. \\ & \left. \times \log \left(\frac{\check{r}_\infty}{L^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.91)$$

ergibt, und damit eine explizite Abhängigkeit von der Filmdicke L in Form von logarithmischen Beiträgen $\propto \log L^2$ besitzt. Auch hier ist $R_0 \equiv R_0(\check{r}_\infty, \check{h})$ die als Lösung der impliziten Gleichung (2.62a) zu ermittelnde Skalenfunktion.

Anhand der expliziten Ausdrücke für die Skalenfunktionen der Exzess-Freien-Energie f_{ex} und ihre führenden Korrekturen, soll nun das Verhalten von f_{ex} auf großen Längenskalen L und zwar sowohl am kritischen Punkt (*bulk critical point*, bcp) $(T, H) = (T_{c,\infty}, 0)$ als auch im Temperaturbereich $T > T_{c,\infty}$, ebenfalls in Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes, untersucht werden. Am kritischen Punkt reduziert sich die skalierte Exzess-Freie-Energie im Fall $2 < d < 4$ und $2 < \sigma < 4$ mit $d + \sigma \neq 6$ auf

$$L^{d-1} f_{\text{ex,bcp}} \underset{L \rightarrow \infty}{\approx} \Delta_{\text{C}}^{\text{SM}}(d) + g_{\sigma} L^{-\omega_{\sigma}} \Delta_{\sigma, \text{C}}^{\text{SM}}(d, \sigma) + g_{\omega} L^{-\omega} \Delta_{\omega, \text{C}}^{\text{SM}}(d) + o(g_{\sigma}, g_{\omega}), \quad (2.92)$$

wobei $\Delta_{\text{C}}^{\text{SM}}(d)$, $\Delta_{\sigma, \text{C}}^{\text{SM}}(d, \sigma)$ und $\Delta_{\omega, \text{C}}^{\text{SM}}(d)$ die Amplituden (1.27) im *Mean-Sphärischen-Modell* bezeichnen. Da die *Bulk-Korrelationslänge* ξ_{∞} am kritischen Punkt divergiert und $r_{\infty} = \xi_{\infty}^{-2}$ ist, verschwindet hier r_{∞} und auch die skalierte inverse Suszeptibilität $\check{r}_{\infty} = r_{\infty} L^2$. Setzt man somit $\check{r}_{\infty} = \check{h} = 0$ in den für die Skalenfunktionen Y_0 , Y_{σ} und Y_{ω} erhaltenen Ausdrücken (2.87), folgt unmittelbar

$$\Delta_{\text{C}}^{\text{SM}}(d) \equiv Y_0(0, 0) = -\frac{A_d}{d} R_{0, \text{bcp}}^{d/2} - \frac{4\pi Q_{d+2,2}(R_{0, \text{bcp}})}{R_{0, \text{bcp}}}, \quad (2.93a)$$

$$\Delta_{\sigma, \text{C}}^{\text{SM}}(d) \equiv Y_{\sigma}(0, 0) = \Delta_{\sigma, \text{C}}^{\text{GM}}(d, \sigma) + Q_{d, \sigma}(R_{0, \text{bcp}}) - \frac{B_{d, \sigma}}{d + \sigma - 2} R_{0, \text{bcp}}^{(d+\sigma-2)/2}, \quad (2.93b)$$

und

$$\Delta_{\omega, \text{C}}^{\text{SM}}(d) \equiv Y_{\omega}(0, 0) = \frac{R_{0, \text{bcp}}^2}{4}. \quad (2.93c)$$

Dabei bezeichnet $R_{0, \text{bcp}} \equiv R_0(0, 0)$ die d -abhängige Lösung der impliziten Gleichung (2.62a) mit $\check{r}_{\infty} = \check{h} = 0$.

Im Fall $2 < d < 4$ mit $d + \sigma = 6$ ergibt sich der Wert der skalierten Exzess-Freien-Energie am kritischen Punkt zu

$$L^{d-1} f_{\text{ex,bcp}} \underset{L \rightarrow \infty}{\approx} \Delta_{\text{C}}^{\text{SM}}(d) + g_{\sigma} L^{-\omega_{\sigma}} Y_{\sigma}(0, 0; L) + (w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)}) L^{-\omega} \Delta_{\omega, \text{C}}^{\text{SM}}(d) + \dots, \quad (2.94)$$

mit den in den Gleichungen (2.93a) und (2.93c) angegebenen Ausdrücken für die Amplituden $\Delta_{\text{C}}^{\text{SM}}(d)$ und $\Delta_{\omega, \text{C}}^{\text{SM}}(d)$. Anstelle der Amplituden $\Delta_{\sigma, \text{C}}^{\text{SM}}(d, \sigma)$ ist der zu der SkalenvARIABLEN $g_{\sigma} L^{-\omega_{\sigma}}$ proportionale Beitrag zur skalierten Exzess-Freien-Energie nun jedoch durch den explizit von der Filmdicke L abhängigen Wert der Skalenfunktion $Y_{\sigma}(\check{r}_{\infty}, \check{h}; L)$ am kritischen Punkt zu ersetzen. Dieser folgt aus Gleichung (2.91) mit $\check{r}_{\infty} = \check{h} = 0$ und lautet

$$Y_{\sigma}(0, 0; L) = \Delta_{\sigma, \text{C}}^{\text{GM}}(d, 6-d) + Q_{d, 6-d}(R_{0, \text{bcp}}) + \frac{K_d}{4} R_{0, \text{bcp}}^2 \log\left(\frac{R_{0, \text{bcp}}}{L^2}\right). \quad (2.95)$$

Die in den Gleichungen (2.92) und (2.94) angegebenen Ausdrücke verdeutlichen, dass sowohl aus der Korrektur, die zu dem Skalinfeld g_{σ} proportional ist und ihren Ursprung im langreichweitigen Anteil des Paarpotentials hat, als auch aus den Wegner-Korrekturen, diese sind $\propto g_{\omega}$ im Fall $d + \sigma \neq 6$ und $\propto (w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)})$ im Fall $d + \sigma = 6$, zusätzliche Beiträge zur skalierten

Exzess-Freien-Energie am kritischen Punkt hervorgehen. Diese Beiträge stellen jedoch Korrekturen zum führenden Term $\Delta_C^{\text{SM}}(d)$, der Casimir-Amplitude des *Mean*-Sphärischen-Modells mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen, dar. Sie verschwinden im Limes $L \rightarrow \infty$ aufgrund der mit den Skalenfeldern g_σ und g_ω beziehungsweise $w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)}$ einhergehenden Potenzen $L^{-\omega_\sigma}$ und $L^{-\omega}$ der Filmdicke L mit $\omega_\sigma > 0$ und $\omega > 0$, und sind daher für hinreichend große Werte von L zu vernachlässigen.

Neben dem Wert der Exzess-Freien-Energie am kritischen Punkt soll nun auch ihr Verhalten auf großen Längenskalen L im Temperaturbereich $T > T_{c,\infty}$ und wiederum in Abwesenheit eines externen Magnetfeldes untersucht werden. Dazu ist das asymptotische Verhalten der Skalenfunktionen Y_0 , Y_σ und Y_ω im Grenzfall $\check{r}_\infty \rightarrow \infty$ zu bestimmen, da die skalierte inverse *Bulk*-Suszeptibilität \check{r}_∞ bei fester Temperatur $T > T_{c,\infty}$ im Grenzfall $L \rightarrow \infty$ divergiert. Dies erfordert zunächst die Berechnung des asymptotischen Verhaltens der Skalenfunktion R_0 , da diese in sämtliche Skalenfunktionen der Exzess-Freien-Energie eingeht. Wie in Abschnitt 2.4.3 erörtert, ergibt sich das führende asymptotische Verhalten dieser Skalenfunktion zu $R_0(\check{r}_\infty, \check{h}) \underset{\check{r}_\infty \rightarrow \infty}{\approx} \check{r}_\infty$ für $|\check{h}| < \infty$. In ihrer impliziten Bestimmungsgleichung (2.62a) kann daher, um den nächsten Term in der asymptotischen Entwicklung der Skalenfunktion R_0 herzuleiten, in der Funktion $Q_{d,2}(R_0)$ zunächst R_0 durch \check{r}_∞ und die Funktion $Q_{d,2}$ durch ihre asymptotische Entwicklung (2.79a) ersetzt werden. Löst man nun nach R_0 auf, ergibt sich daraus das führende asymptotische Verhalten der Skalenfunktion $R_0(\check{r}_\infty, \check{h})$ im Fall $\check{h} = 0$ einschließlich der ersten Korrektur zu

$$R_0(\check{r}_\infty, 0) \underset{\check{r}_\infty \rightarrow \infty}{=} \check{r}_\infty + \frac{2(2\pi)^{(1-d)/2}}{(d-2)A_d} \check{r}_\infty^{(5-d)/4} e^{-\sqrt{\check{r}_\infty}} \left[1 + O(\check{r}_\infty^{-1/2}) \right]. \quad (2.96)$$

Diese Entwicklung kann nun anstelle von R_0 in die Ausdrücke für die Skalenfunktionen Y_0 und Y_ω , Gleichungen (2.87a) und (2.87c), eingesetzt werden. Zusammen mit dem in Gleichung (2.79a) angegebenen asymptotischen Verhalten der Funktion $Q_{d,2}(y)$ folgt daraus

$$Y_0(\check{r}_\infty, 0) \underset{\check{r}_\infty \rightarrow \infty}{=} -(2\pi)^{(1-d)/2} \check{r}_\infty^{(d-1)/4} e^{-\sqrt{\check{r}_\infty}} \left[1 + O(\check{r}_\infty^{-1/2}) \right] \quad (2.97a)$$

für die Skalenfunktion Y_0 , und

$$Y_\omega(\check{r}_\infty, 0) \underset{\check{r}_\infty \rightarrow \infty}{=} \frac{(2\pi)^{1-d}}{(d-2)^2 A_d^2} \check{r}_\infty^{(5-d)/2} e^{-2\sqrt{\check{r}_\infty}} \left[1 + O(\check{r}_\infty^{-1/2}) \right] \quad (2.97b)$$

für die Skalenfunktion Y_ω . Um das asymptotische Verhalten der Skalenfunktion Y_σ herzuleiten, benötigt man das asymptotische Verhalten der Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ mit $\sigma \neq 2$ im Limes $y \rightarrow \infty$. Dieses wird in Anhang A.4.4 berechnet und lautet (siehe Gleichungen (A.88a) und (A.89a))

$$Q_{d,\sigma \neq 2}(y) \underset{y \rightarrow \infty}{=} -\Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d, \sigma) - \frac{D(d, \sigma)}{y} + O(y^{-2}) \quad (2.98)$$

mit der in Gleichung (2.76b) definierten Amplituden $\Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d, \sigma)$ des Gaußschen Modells und dem Koeffizienten

$$D(d, \sigma) = \frac{2^\sigma \Gamma\left(\frac{d+\sigma}{2}\right) \zeta(d+\sigma)}{\pi^{d/2} \Gamma\left(-\frac{\sigma}{2}\right)}. \quad (2.99)$$

Die in den Ausdrücken für die Skalenfunktion Y_σ in den Fällen $d + \sigma \neq 6$ und $d + \sigma = 6$, Gleichungen (2.87b) und (2.91), auftretende Funktion $Q_{d,\sigma}$ kann nun demgemäß durch ihre Asymptotik ersetzt und das asymptotische Verhalten dieser Skalenfunktionen bestimmt werden. Dieses ergibt sich dabei sowohl im Fall $d + \sigma \neq 6$ als auch im Fall $d + \sigma = 6$ zu

$$Y_\sigma(\check{r}_\infty, 0) \Big|_{\check{r}_\infty \rightarrow \infty} \equiv -\frac{D(d, \sigma)}{\check{r}_\infty} + O(\check{r}_\infty^{-2}), \quad (2.100)$$

wobei im letztgenannten Fall die Filmdicke L zu den Argumenten der Skalenfunktion Y_σ auf der linken Seite dieser Gleichung formal hinzuzufügen ist.

Im Gegensatz zu den Skalenfunktionen $Y_0(\check{r}_\infty, 0)$ und $Y_\omega(\check{r}_\infty, 0)$, die im Limes $\check{r}_\infty \rightarrow \infty$ beide exponentiell abfallen, weisen die Skalenfunktionen $Y_\sigma(\check{r}_\infty, 0)$ und $Y_\sigma(\check{r}_\infty, 0; L)$ einen algebraischen Abfall auf. Als Folge davon sind diese langsam abfallenden Beiträge, die ihren Ursprung im langreichweitigen Anteil des Paarpotentials haben, maßgeblich für das Verhalten der Exzess-Freien-Energie im Temperaturbereich $T > T_{c,\infty}$ auf großen Längenskalen L . Dabei gilt

$$f_{\text{ex}} \Big|_{b>0} \Big|_{L \rightarrow \infty} \approx -g_\sigma \frac{D(d, \sigma)}{r_\infty} L^{-(d+\sigma-1)} \quad (2.101a)$$

$$\approx -g_\sigma D(d, \sigma) \left(\frac{gt}{A_d} \right)^{-\gamma} L^{-(d+\sigma-1)} \quad (2.101b)$$

sobald der Wert des Parameters b , der dem Skalenfeld g_σ entspricht und die Stärke des langreichweitigen Anteils des Paarpotentials modelliert, von null verschieden ist. Die zweite Zeile folgt dabei durch Ersetzung von r_∞ in der ersten Zeile durch die Lösung (2.36) der *Bulk*-Zustandsgleichung im feldfreien Fall. Dieses Resultat findet sich in Übereinstimmung mit der in Abschnitt 1.4 auf phänomenologischem Wege hergeleiteten Asymptoten der Exzess-Freien-Energie im langreichweitigen Fall, Gleichung (1.34).

Ist der Wert des Parameters b hingegen gleich null, und das Paarpotential somit rein kurzreichweitig, lautet das führende asymptotische Verhalten

$$f_{\text{ex}} \Big|_{b=0} \Big|_{L \rightarrow \infty} \approx -(2\pi L)^{-(d-1)/2} r_\infty^{(d-1)/4} e^{-L\sqrt{r_\infty}} \quad (2.101c)$$

$$\approx -(2\pi L)^{-(d-1)/2} \left(\frac{gt}{A_d} \right)^{(d-1)\gamma/4} e^{-L(gt/A_d)^\nu}, \quad (2.101d)$$

d.h. die Exzess-Freie-Energie zerfällt exponentiell bei einer Zunahme der Filmdicke L . Für die kritischen Exponenten γ und ν in den Gleichungen (2.101b) und (2.101d) sind dabei ihre Werte (2.37) im sphärischen Modell einzusetzen.

Im letzten Teil dieses Abschnitts sollen nun die für die Exzess-Freie-Energie erhaltenen Ergebnisse für den Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen in drei Dimensionen ($d = \sigma = 3$) ausgewertet und grafisch dargestellt werden. Lässt man dabei das äußere Magnetfeld außer Acht ($h = 0$), so erfordert dies die Berechnung der Skalenfunktionen $Y_0(\check{r}_\infty, 0)$, $Y_\sigma(\check{r}_\infty, 0; L)$ und $Y_\omega(\check{r}_\infty, 0)$ gemäß den Gleichungen (2.87a), (2.91) und (2.87c) mit $d = \sigma = 3$.

Hierzu benötigt man zum einen die Skalenfunktion $R_0(\check{r}_\infty, 0)$, für die sich in drei Dimensionen — wie in Abschnitt 2.4.3 beschrieben — der in den Gleichungen (2.70) angegebene analytische Ausdruck ergibt, und zum anderen die Funktionen $Q_{5,2}(y)$ und $Q_{3,3}(y)$. Auch diese können, wie in Anhang A.4 gezeigt, in geschlossen analytischer Form dargestellt werden. Dabei folgt aus Gleichung (A.66) in Anhang A.4.2 mit $m = 2$, dass

$$Q_{5,2}(y) = \frac{y}{8\pi^2} \left[\text{Li}_3\left(e^{-\sqrt{y}}\right) + \sqrt{y} \text{Li}_2\left(e^{-\sqrt{y}}\right) \right] \quad (2.102)$$

mit der Polylogarithmus-Funktion $\text{Li}_p(z)$, und für die Funktion $Q_{3,3}(y)$ erhält man den in Anhang A.4.3 hergeleiteten Ausdruck

$$Q_{3,3}(y) = \frac{y}{12} + \frac{y^2}{4\pi^2} \left[1 - \log\left(\frac{\sqrt{y}}{2\pi}\right) \right] + \frac{y^{3/2}}{2\pi} \left\{ \frac{\pi}{4} + \text{Im} \left[\log \Gamma\left(i \frac{\sqrt{y}}{2\pi}\right) \right] \right\}. \quad (2.103)$$

Diese Resultate können nun zusammen mit dem Wert $\Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(3, 3) = \pi^2/90$ der Amplituden (2.76b) und der Konstanten $K_3 = (2\pi^2)^{-1}$ in die Ausdrücke für die Skalenfunktionen Y_0 , Y_σ und Y_ω , Gleichungen (2.87a), (2.91) und (2.87c) mit $d = \sigma = 3$ und $\check{h} = 0$, eingesetzt werden. Die auf diese Weise analytisch berechneten Skalenfunktionen $Y_0(\check{r}_\infty, 0)$, $Y_\sigma(\check{r}_\infty, 0; L)$ und $Y_\omega(\check{r}_\infty, 0)$ sind in den Abbildungen 9–11 dargestellt. Der Wert der Skalenfunktion $Y_\sigma(\check{r}_\infty, 0; L)$ bei $\check{r}_\infty = 0$ hängt dabei explizit von der Filmdicke L ab, während sich die Skalenfunktionen $Y_0(\check{r}_\infty, 0)$ und $Y_\omega(\check{r}_\infty, 0)$ an diesem Punkt auf die Casimir-Amplituden $\Delta_C^{\text{SM}}(3)$ und $\Delta_{\omega,C}^{\text{SM}}(3)$ reduzieren. Diese ergeben sich durch Einsetzen des kritischen Wertes der Skalenfunktion R_0 aus Gleichung (2.70),

$$R_{0,\text{bcp}} \equiv R_0(0, 0) = 4 \log^2\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right), \quad (2.104)$$

in die Gleichungen (2.93a) und (2.93c) mit $d = 3$ und $A_3 = (4\pi)^{-1}$ zu [64]

$$\Delta_C^{\text{SM}}(3) = -\frac{2}{3\pi} \log^3\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right) - \frac{1}{2\pi} \left[\text{Li}_3\left(\frac{2}{3+\sqrt{5}}\right) + 2 \log\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right) \text{Li}_2\left(\frac{2}{3+\sqrt{5}}\right) \right] \quad (2.105a)$$

$$= -\frac{2\zeta(3)}{5\pi} = -0.153050 \dots \quad (2.105b)$$

und

$$\Delta_{\omega,C}^{\text{SM}}(3) = 4 \log^4\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right) = 0.214489 \dots \quad (2.106)$$

Der in der zweiten Zeile der Gleichungen (2.105) aufgeführte Ausdruck für die Casimir-Amplitude des dreidimensionalen *Mean*-Sphärischen-Modells mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen folgt dabei aus Gleichung (2.105a) mittels einer in [100] hergeleiteten Identität für die Polylogarithmus-Funktion.

Mit Hilfe der analytisch berechneten Skalenfunktionen Y_0 , Y_σ und Y_ω kann nun auch die skalierte Exzess-Freie-Energie $L^{d-1} f_{\text{ex}}$ für den dreidimensionalen Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen ($d = \sigma = 3$) in Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes ($h = 0$) gemäß Gleichung (2.90) berechnet und grafisch dargestellt werden. In den Abbildungen 12(a) und

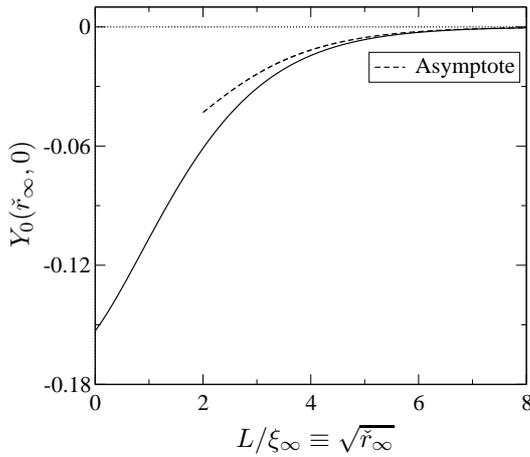


Abbildung 9: Auftragung der Skalenfunktion $Y_0(\check{r}_\infty, 0)$ des *Mean-Sphärischen-Modells* über der *Finite-Size-Skalenvariablen* $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{\check{r}_\infty}$ im dreidimensionalen Fall ohne äußeres Magnetfeld. Ihre Asymptote im Grenzfall $\check{r}_\infty \rightarrow \infty$, Gleichung (2.97a) mit $d = 3$, ist als strichlierte Linie dargestellt. Am kritischen Punkt $L/\xi_\infty = 0$ reduziert sich die Skalenfunktion $Y_0(\check{r}_\infty, 0)$ auf die Casimir-Amplitude $\Delta_C^{\text{SM}}(d) \equiv Y_0(0, 0)$ des *Mean-Sphärischen-Modells* mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen, deren Wert in drei Dimensionen $\Delta_C^{\text{SM}}(3) = -2\zeta(3)/(5\pi) = -0.153050 \dots$ beträgt.

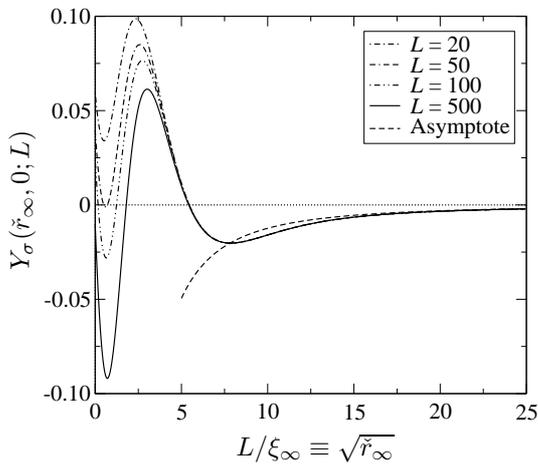


Abbildung 10: Auftragung der Skalenfunktion $Y_\sigma(\check{r}_\infty, 0; L)$ des *Mean-Sphärischen-Modells* über der *Finite-Size-Skalenvariablen* $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{\check{r}_\infty}$ im Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen in drei Dimensionen ($d = \sigma = 3$) ohne äußeres Magnetfeld für die Filmdicken $L = 20, 50, 100, 500$. Die von der Filmdicke L unabhängige Asymptote der Skalenfunktion $Y_\sigma(\check{r}_\infty, 0; L)$ im Grenzfall $\check{r}_\infty \rightarrow \infty$, Gleichung (2.100) mit $d = \sigma = 3$ und $D(3, 3) = 4\pi^4/315$, ist als strichlierte Linie dargestellt. Am kritischen Punkt $L/\xi_\infty = 0$ reduziert sich die Skalenfunktion $Y_\sigma(\check{r}_\infty, 0; L)$ auf den explizit L -abhängigen Wert (2.95) mit $d = 3$ und $R_{0, \text{bcp}}$ aus Gleichung (2.104).

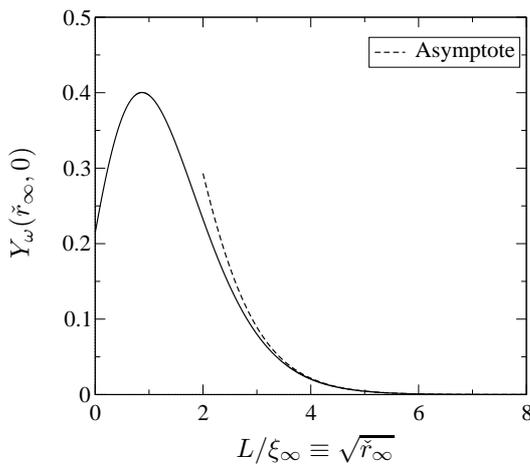


Abbildung 11: Auftragung der Skalenfunktion $Y_\omega(\check{r}_\infty, 0)$ des *Mean-Sphärischen-Modells* über der *Finite-Size-Skalenvariablen* $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{\check{r}_\infty}$ im dreidimensionalen Fall ohne äußeres Magnetfeld (durchgezogene Linie) und ihrer Asymptoten (2.97b) im Grenzfall $\check{r}_\infty \rightarrow \infty$ (strichlierte Linie). Der Wert der Skalenfunktion $Y_\omega(\check{r}_\infty, 0)$ am kritischen Punkt entspricht der Casimir-Amplituden $\Delta_{\omega, C}^{\text{SM}}(d) \equiv Y_\omega(0, 0)$ des *Mean-Sphärischen-Modells*, deren Wert sich im dreidimensionalen Fall zu $\Delta_{\omega, C}^{\text{SM}}(3) = 4 \log^4\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right) = 0.214489 \dots$ ergibt.

12(b) finden sich dazu Auftragungen der skalierten Exzess-Freien-Energie über der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ , sowohl für den Fall rein kurzreichweitiger Wechselwirkungen $b = 0$ als auch den langreichweitigen van-der-Waals-Fall exemplarisch mit $b = 2/3$. Die Filmdicke L wurde dabei auf $L = 50$ und die nicht-universellen Konstanten $w_{d=3}^{(\Lambda)}$ und $\tilde{w}_{d=3}^{(\Lambda)}$, die in dem Koeffizienten der Skalenfunktion Y_ω in Gleichung (2.90) auftreten, auf den Wert $w_{d=3}^{(\Lambda)} = \tilde{w}_{d=3}^{(\Lambda)} = 1$ gesetzt. In der linearen Auftragung der skalierten Exzess-Freien-Energie über der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ (Abbildung 12(a)) macht sich dabei die Anwesenheit der langreichweitigen van der Waals-Wechselwirkung lediglich in einer geringfügigen Verschiebung der Kurve gegenüber dem rein kurzreichweitigen Fall $b = 0$ bemerkbar. In doppellogarithmischer Auftragung (Abbildung 12(b)) ist jedoch der qualitative Unterschied im Verhalten der skalierten Exzess-Freien-Energie in diesen beiden Fällen deutlich zu erkennen. Während die skalierte Exzess-Freie-Energie im rein kurzreichweitigen Fall bei großen Werten von L/ξ_∞ exponentiell abfällt, ist in Anwesenheit der langreichweitigen van der Waals-Wechselwirkung ein in führender Ordnung zu $(L/\xi_\infty)^{-2}$ proportionaler Abfall zu beobachten. In der gewählten doppellogarithmischen Auftragung entspricht dieses in Gleichung (2.101a) spezifizierte asymptotische Verhalten einer Geraden mit der negativen Steigung -2 . Diese ist in Abbildung 12(b) als punktierte Linie dargestellt. In den Bereichen, in denen das Verhalten der skalierten Exzess-Freien-Energie durch diese Asymptote beschrieben werden kann, sind die aus dem langreichweitigen Anteil des Paarpotentials resultierenden Beiträge somit ausschlaggebend und dominant, obgleich sie im Sinne der Renormierungsgruppentheorie als irrelevante Korrekturen zu klassifizieren sind.

Um die Abhängigkeit der skalierten Exzess-Freien-Energie von der Filmdicke L im langreichweitigen Fall zu veranschaulichen, sind in den Abbildungen 13(a) und 13(b) sowohl lineare als auch doppellogarithmische Auftragungen der skalierten Exzess-Freien-Energie über der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ für verschiedene Werte von L dargestellt. Die hierbei erhaltenen Kurven konvergieren mit zunehmender Filmdicke gegen die Skalenfunktion Y_0 , die das führende Verhalten im Fall rein kurzreichweitiger Wechselwirkungen beschreibt. Grund hierfür ist, dass die Wegner-Korrekturen zur skalierten Exzess-Freien-Energie und auch die Korrektur von dem langreichweitigen Anteil des Paarpotentials im Limes $L \rightarrow \infty$ bei konstant gehaltenem Wert der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ verschwinden.

2.5.3 Die Casimir-Kraft

Der nun folgende letzte Abschnitt dieses Kapitels über das *Mean*-Sphärische-Modell widmet sich der Casimir-Kraft \mathcal{F}_C und der Untersuchung ihres Verhaltens auf großen Längenskalen L . Um \mathcal{F}_C zu berechnen ist dabei, ihrer Definitionsgleichung (1.22) entsprechend, lediglich die Ableitung der Exzess-Freien-Energie f_{ex} nach der Filmdicke L zu bilden. Das *Finite-Size*-Skalenverhalten der Casimir-Kraft kann daher unmittelbar aus den im vorangegangenen Abschnitt angegebenen *Finite-Size*-Skalenrelationen der Exzess-Freien-Energie in den Fällen $d + \sigma \neq 6$ und $d + \sigma = 6$,

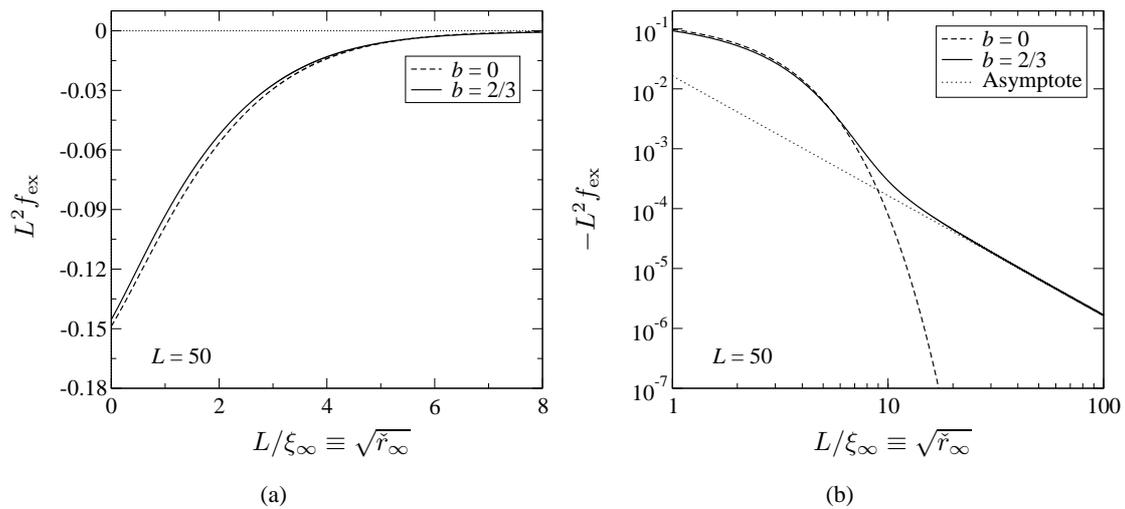


Abbildung 12: Auftragung der skalierten Exzess-Freien-Energie $L^{d-1} f_{\text{ex}}$ des dreidimensionalen *Mean-Sphärischen-Modells* über der *Finite-Size-Skalenvariablen* $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{\tilde{r}_\infty}$ bei einer Filmdicke von $L = 50$ in Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes (a). Die durchgezogene Linie entspricht dabei dem Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen ($\sigma = 3$) mit $b = 2/3$. Die im rein kurzreichweitigen Fall $b = 0$ erhaltene Kurve ist zum Vergleich als strichlierte Linie dargestellt. Abbildung (b) zeigt eine doppellogarithmische Auftragung der auf der linken Seite dargestellten Verläufe. In dieser Auftragung entspricht die als punktierte Linie eingezeichnete Asymptote (2.101a) einer Geraden mit der Steigung -2 .

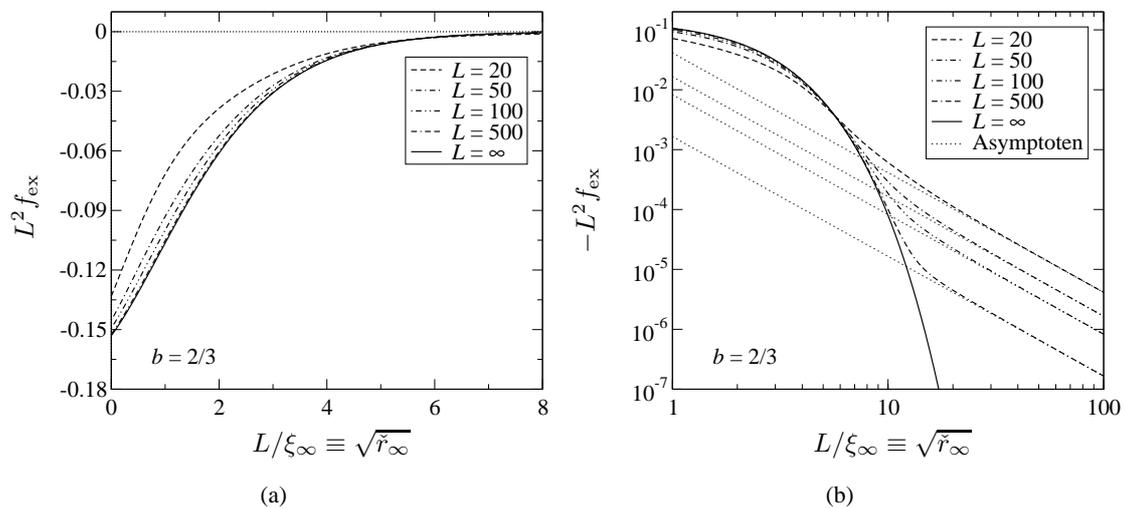


Abbildung 13: Auftragung der skalierten Exzess-Freien-Energie $L^{d-1} f_{\text{ex}}$ des dreidimensionalen *Mean-Sphärischen-Modells* im Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen ($\sigma = 3$) mit $b = 2/3$ über der *Finite-Size-Skalenvariablen* $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{\tilde{r}_\infty}$ für die Filmdicken $L = 20, 50, 100, 500$ und im Limes $L \rightarrow \infty$ in Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes (a). In Abbildung (b) sind dieselben Verläufe in doppellogarithmischer Auftragung dargestellt. Die sich aus Gleichung (2.101a) für die verschiedenen Filmdicken L ergebenden Asymptoten sind als punktierte Linien eingezeichnet.

zusammen mit den für die Skalenfunktionen Y_0 , Y_σ und Y_ω erhaltenen Ausdrücken, hergeleitet werden. Im Fall $2 < d < 4$ und $2 < \sigma < 4$ mit $d + \sigma \neq 6$ ergibt sich daraus, dass die Casimir-Kraft in der Umgebung des kritischen Punktes eine *Finite-Size*-Skalenform

$$\frac{\mathcal{F}_C}{k_B T} \approx L^{-d} \vartheta(\check{r}_\infty, \check{h}, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) \quad (2.107a)$$

mit einer gemäß

$$\vartheta(\check{r}_\infty, \check{h}, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) = \vartheta_0(\check{r}_\infty, \check{h}) + \check{g}_\sigma \vartheta_\sigma(\check{r}_\infty, \check{h}) + \check{g}_\omega \vartheta_\omega(\check{r}_\infty, \check{h}) + o(\check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) \quad (2.107b)$$

in den Skalenvariablen \check{g}_σ und \check{g}_ω linearisierten Skalenfunktion ϑ . Setzt man in die *Finite-Size*-Skalenrelation (2.86a) der Exzess-Freien-Energie im Fall $d + \sigma \neq 6$ die linearisierte Form (2.86b) der Skalenfunktion Y ein, so können daraus durch Ableiten nach der Filmdicke L und anschließenden Koeffizientenvergleich mit der *Finite-Size*-Skalenrelation der Casimir-Kraft und der Skalenfunktion ϑ in linearisierter Form, Gleichungen (2.107), die Skalenfunktionen ϑ_0 , ϑ_σ und ϑ_ω durch die Skalenfunktionen Y_0 , Y_σ und Y_ω der Exzess-Freien-Energie ausgedrückt werden. Dies führt auf

$$\vartheta_0(\check{r}_\infty, \check{h}) = \left(d - 1 - 2\check{r}_\infty \frac{\partial}{\partial \check{r}_\infty} - \frac{\Delta}{\nu} \check{h} \frac{\partial}{\partial \check{h}} \right) Y_0(\check{r}_\infty, \check{h}), \quad (2.108a)$$

$$\vartheta_\sigma(\check{r}_\infty, \check{h}) = \left(d + \omega_\sigma - 1 - 2\check{r}_\infty \frac{\partial}{\partial \check{r}_\infty} - \frac{\Delta}{\nu} \check{h} \frac{\partial}{\partial \check{h}} \right) Y_\sigma(\check{r}_\infty, \check{h}) \quad (2.108b)$$

und

$$\vartheta_\omega(\check{r}_\infty, \check{h}) = \left(d + \omega - 1 - 2\check{r}_\infty \frac{\partial}{\partial \check{r}_\infty} - \frac{\Delta}{\nu} \check{h} \frac{\partial}{\partial \check{h}} \right) Y_\omega(\check{r}_\infty, \check{h}), \quad (2.108c)$$

wobei für die kritischen Exponenten ν , Δ , ω_σ und ω wieder ihre in den Gleichungen (2.37) und (2.40) angegebenen Werte im sphärischen Modell einzusetzen sind.

Der Fall $2 < d < 4$ mit $d + \sigma = 6$ ist auf entsprechende Weise zu behandeln. Für die Casimir-Kraft gilt dann

$$\frac{L^d \mathcal{F}_C}{k_B T} \approx \vartheta_0(\check{r}_\infty, \check{h}) + \check{g}_\sigma \vartheta_\sigma(\check{r}_\infty, \check{h}; L) + (w_d^{(\Lambda)} + b\tilde{w}_d^{(\Lambda)}) L^{-\omega} \vartheta_\omega(\check{r}_\infty, \check{h}) + \dots, \quad (2.109)$$

wobei sich für die Skalenfunktionen $\vartheta_0(\check{r}_\infty, \check{h})$ und $\vartheta_\omega(\check{r}_\infty, \check{h})$ wiederum die in den Gleichungen (2.108a) und (2.108c) angegebenen Relationen ergeben. Im Unterschied zu dem im Fall $d + \sigma \neq 6$ erhaltenen Ausdruck (2.108b) für die Skalenfunktion $\vartheta_\sigma(\check{r}_\infty, \check{h})$, kommt im Fall $d + \sigma = 6$ jedoch noch ein weiterer Term hinzu, der seinen Ursprung in der expliziten L -Abhängigkeit der Skalenfunktion $Y_\sigma(\check{r}_\infty, \check{h}; L)$ hat. Anstelle von Gleichung (2.108b) gilt daher in diesem Fall

$$\vartheta_\sigma(\check{r}_\infty, \check{h}; L) = \left(d + \omega_\sigma - 1 - 2\check{r}_\infty \frac{\partial}{\partial \check{r}_\infty} - \frac{\Delta}{\nu} \check{h} \frac{\partial}{\partial \check{h}} - L \frac{\partial}{\partial L} \right) Y_\sigma(\check{r}_\infty, \check{h}; L). \quad (2.110)$$

Um nun die Werte der Skalenfunktionen ϑ_0 , ϑ_σ und ϑ_ω am kritischen Punkt $\check{r}_\infty = \check{h} = 0$ zu bestimmen, ist zunächst das Verhalten der Skalenfunktion R_0 , die der Lösung der impliziten Gleichung (2.62a) entspricht, in der Umgebung des kritischen Punktes zu untersuchen. Dabei findet man, dass

$$R_0(\check{r}_\infty, \check{h}) \underset{\check{r}_\infty, \check{h} \rightarrow 0}{=} R_{0,\text{bcp}} + o(\check{r}_\infty, \check{h}). \quad (2.111)$$

Für die Skalenfunktionen Y_i ($i = 0, \sigma, \omega$) der Exzess-Freien-Energie, in die die Skalenfunktion R_0 gemäß den Gleichungen (2.87) und (2.91) unmittelbar eingeht, ergibt sich daraus ein analoges Verhalten,

$$Y_i(\check{r}_\infty, \check{h}) \underset{\check{r}_\infty, \check{h} \rightarrow 0}{=} Y_i(0, 0) + o(\check{r}_\infty, \check{h}). \quad (2.112)$$

Infolgedessen verschwinden die Terme in den Ausdrücken (2.108) und (2.110) für die Skalenfunktionen der Casimir-Kraft, in denen die Ableitungen der Skalenfunktionen Y_i nach \check{r}_∞ und \check{h} auftreten, im Grenzfall $(\check{r}_\infty, \check{h}) \rightarrow (0, 0)$. Zusammen mit den Definitionsgleichungen (2.93) der Amplituden $\Delta_{\text{C}}^{\text{SM}}$, $\Delta_{\sigma, \text{C}}^{\text{SM}}$ und $\Delta_{\omega, \text{C}}^{\text{SM}}$ ergeben sich daher die Werte der Skalenfunktionen (2.108) am kritischen Punkt zu

$$\vartheta_0(0, 0) = (d - 1)\Delta_{\text{C}}^{\text{SM}}(d), \quad (2.113a)$$

$$\vartheta_\sigma(0, 0) = (d + \omega_\sigma - 1)\Delta_{\sigma, \text{C}}^{\text{SM}}(d, \sigma), \quad (2.113b)$$

$$\vartheta_\omega(0, 0) = (d + \omega - 1)\Delta_{\omega, \text{C}}^{\text{SM}}(d), \quad (2.113c)$$

und für die im Fall $d + \sigma = 6$ explizit von der Filmdicke L abhängige Skalenfunktion ϑ_σ , Gleichung (2.110), folgt

$$\vartheta_\sigma(0, 0; L) = 3 \left[\Delta_{\sigma, \text{C}}^{\text{GM}}(d, 6 - d) + Q_{d, 6-d}(R_{0,\text{bcp}}) \right] + \frac{K_d}{4} R_{0,\text{bcp}}^2 \left[2 + 3 \log \left(\frac{R_{0,\text{bcp}}}{L^2} \right) \right]. \quad (2.114)$$

Ersetzt man die Skalenfunktionen ϑ_i ($i = 0, \sigma, \omega$) in den Ausdrücken (2.107) und (2.109) für die Casimir-Kraft in den Fällen $d + \sigma \neq 6$ und $d + \sigma = 6$ durch diese Werte, so ergeben sich daraus schließlich die kritischen Casimir-Kräfte.

Zu untersuchen bleibt nun das Verhalten der Casimir-Kraft auf großen Längenskalen L im Temperaturbereich $T > T_{c,\infty}$ und in Abwesenheit eines externen Magnetfeldes. Hierzu ist das asymptotische Verhalten der Skalenfunktionen ϑ_i ($i = 0, \sigma, \omega$) im Grenzfall $\check{r}_\infty \rightarrow \infty$ zu bestimmen. Setzt man die Asymptoten (2.97) und (2.100) der Skalenfunktionen Y_i ($i = 0, \sigma, \omega$) in die Gleichungen (2.108) und (2.110) ein, folgt daraus für das führende asymptotische Verhalten der Skalenfunktionen ϑ_0 und ϑ_ω ,

$$\vartheta_0(\check{r}_\infty, 0) \underset{\check{r}_\infty \rightarrow \infty}{=} -(2\pi)^{(1-d)/2} \check{r}_\infty^{(d+1)/4} e^{-\sqrt{\check{r}_\infty}} \left[1 + O(\check{r}_\infty^{-1/2}) \right] \quad (2.115a)$$

und

$$\vartheta_\omega(\check{r}_\infty, 0) \underset{\check{r}_\infty \rightarrow \infty}{=} \frac{2(2\pi)^{1-d}}{(d-2)^2 A_d^2} \check{r}_\infty^{3-d/2} e^{-2\sqrt{\check{r}_\infty}} \left[1 + O(\check{r}_\infty^{-1/2}) \right], \quad (2.115b)$$

und

$$\vartheta_\sigma(\check{r}_\infty, 0) \Big|_{\check{r}_\infty \rightarrow \infty} = -(d + \sigma - 1) \frac{D(d, \sigma)}{\check{r}_\infty} + O(\check{r}_\infty^{-2}) \quad (2.115c)$$

für die Skalenfunktion ϑ_σ . Gleichung (2.115c) gilt dabei sowohl im Fall $d + \sigma \neq 6$ als auch im Fall $d + \sigma = 6$, obgleich im letztgenannten Fall die Filmdicke L formal zu den Argumenten der Skalenfunktion ϑ_σ hinzuzufügen ist. Ist der Wert des Parameters $g_\sigma \equiv b$ von null verschieden und somit langreichweitige Wechselwirkungen im System vorhanden, resultiert der führende Beitrag zur Casimir-Kraft im Temperaturbereich $T > T_{c,\infty}$ auf großen Längenskalen L aus der Skalenfunktion ϑ_σ . Das asymptotische Verhalten der Casimir-Kraft in diesem Regime lautet damit

$$\frac{\mathcal{F}_C}{k_B T} \Big|_{b>0} \Big|_{L \rightarrow \infty} \approx -g_\sigma (d + \sigma - 1) \frac{D(d, \sigma)}{r_\infty} L^{-(d+\sigma)}, \quad (2.116a)$$

$$\approx -g_\sigma (d + \sigma - 1) D(d, \sigma) \left(\frac{g_t}{A_d} \right)^{-\gamma} L^{-(d+\sigma)}. \quad (2.116b)$$

Sie weist somit einen in führender Ordnung zu $L^{-(d+\sigma)}$ proportionalen algebraischen Abfall auf, in Übereinstimmung mit der in Abschnitt 1.4 auf phänomenologischem Wege hergeleiteten Asymptoten der thermodynamischen Casimir-Kraft im langreichweitigen Fall, Gleichung (1.34).

Im rein kurzreichweitigen Fall $b = 0$ hingegen bestimmt die Skalenfunktion ϑ_0 das führende asymptotische Verhalten der Casimir-Kraft. Man erhält

$$\frac{\mathcal{F}_C}{k_B T} \Big|_{b=0} \Big|_{L \rightarrow \infty} \approx -(2\pi L)^{-(d-1)/2} r_\infty^{(d+1)/4} e^{-L\sqrt{r_\infty}}, \quad (2.116c)$$

$$\approx -(2\pi L)^{-(d-1)/2} \left(\frac{g_t}{A_d} \right)^{(d+1)\gamma/4} e^{-L(g_t/A_d)^\nu}, \quad (2.116d)$$

und somit in führender Ordnung eine exponentielle Abnahme der Casimir-Kraft mit zunehmender Filmdicke L . Für die kritischen Exponenten γ und ν in den Gleichungen (2.116) sind wieder ihre Werte (2.37) im sphärischen Modell einzusetzen. Die Asymptoten der Casimir-Kraft können dabei auch unmittelbar durch Ableiten der Asymptoten der Exzess-Freien-Energie, Gleichungen (2.101), nach der Filmdicke L erhalten werden.

Abschließend soll die skalierte Casimir-Kraft nun gemäß Gleichung (2.109) für den Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen in drei Dimensionen ($d = \sigma = 3$) berechnet und grafisch dargestellt werden. Beschränkt man sich dabei wiederum auf den feldfreien Fall $h = 0$, so erfordert dies zunächst die Berechnung der Skalenfunktionen $\vartheta_0(\check{r}_\infty, 0)$, $\vartheta_\sigma(\check{r}_\infty, 0; L)$ und $\vartheta_\omega(\check{r}_\infty, 0)$. Dazu werden die Skalenfunktionen der Exzess-Freien-Energie $Y_0(\check{r}_\infty, 0)$, $Y_\sigma(\check{r}_\infty, 0; L)$ und $Y_\omega(\check{r}_\infty, 0)$ im Fall $d = \sigma = 3$, die im vorangegangenen Abschnitt hergeleitet und in den Abbildungen 9–11 über $\sqrt{\check{r}_\infty}$ aufgetragen wurden, in die Gleichungen (2.108a), (2.108c) und (2.110) eingesetzt. Auf diese Weise können auch für die Skalenfunktionen der Casimir-Kraft im Fall $d = \sigma = 3$ analytische Ausdrücke erhalten werden. Auftragungen dieser Funktionen zusammen mit ihren Asymptoten (2.115) im Limes $\check{r}_\infty \rightarrow \infty$ sind in den Abbildungen 14–16 dargestellt.

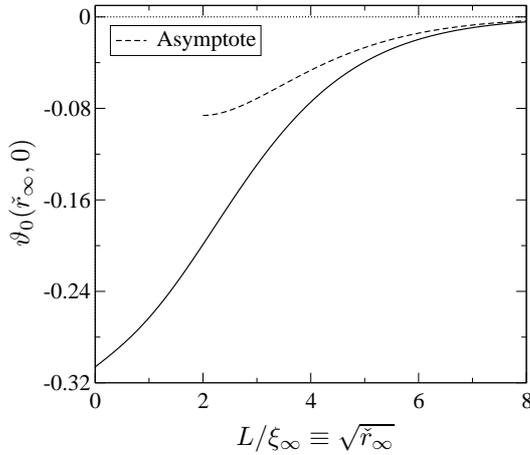


Abbildung 14: Auftragung der Skalenfunktion $\vartheta_0(\check{r}_\infty, 0)$ des *Mean-Sphärischen-Modells* über der *Finite-Size-Skalenvariablen* $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{\check{r}_\infty}$ im dreidimensionalen Fall ohne äußeres Magnetfeld. Ihre in Gleichung (2.115a) angegebene Asymptote im Grenzfall $\check{r}_\infty \rightarrow \infty$ ist als strichlierte Linie dargestellt. Die Skalenfunktion $\vartheta_0(\check{r}_\infty, 0)$ nimmt dabei am kritischen Punkt $L/\xi_\infty = 0$ den Wert $\vartheta_0(0, 0) = (d-1)\Delta_C^{SM}(d)$ an, wobei in drei Dimensionen $\Delta_C^{SM}(3) = -2\zeta(3)/(5\pi) = -0.153050\dots$, und somit $\vartheta_0(0, 0) = -0.306101\dots$ ist.

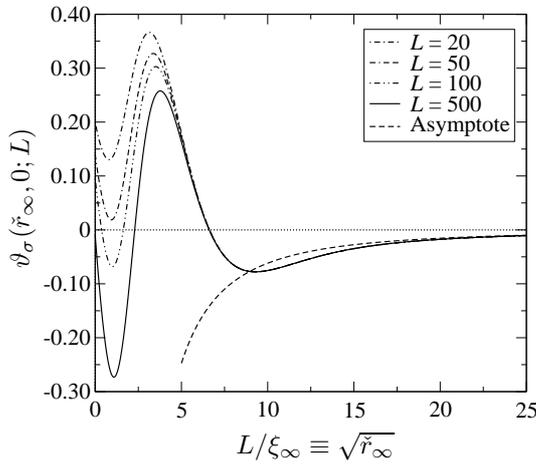


Abbildung 15: Auftragung der Skalenfunktion $\vartheta_\sigma(\check{r}_\infty, 0; L)$ des *Mean-Sphärischen-Modells* über der *Finite-Size-Skalenvariablen* $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{\check{r}_\infty}$ im Fall $d = \sigma = 3$ nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen in drei Dimensionen ohne äußeres Magnetfeld für die Filmdicken $L = 20, 50, 100, 500$. Die in Gleichung (2.115c) angegebene L -unabhängige Asymptote der Skalenfunktion $\vartheta_\sigma(\check{r}_\infty, 0; L)$ im Grenzfall $\check{r}_\infty \rightarrow \infty$ mit $d = \sigma = 3$ und $D(3, 3) = 4\pi^4/315$, ist als strichlierte Linie dargestellt. Am kritischen Punkt $L/\xi_\infty = 0$ reduziert sich die Skalenfunktion $\vartheta_\sigma(\check{r}_\infty, 0; L)$ auf den explizit von der Filmdicke L abhängigen Wert (2.114) mit $d = 3$ und $R_{0,bcp}$ aus Gleichung (2.104).

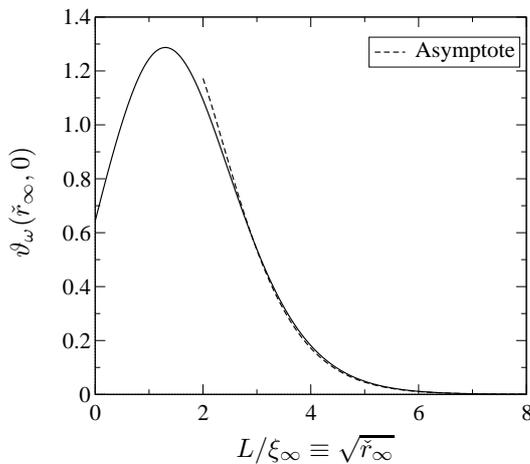


Abbildung 16: Auftragung der Skalenfunktion $\vartheta_\omega(\check{r}_\infty, 0)$ des *Mean-Sphärischen-Modells* über der *Finite-Size-Skalenvariablen* $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{\check{r}_\infty}$ im dreidimensionalen Fall ohne äußeres Magnetfeld (durchgezogene Linie) und ihrer Asymptoten (2.115b) im Grenzfall $\check{r}_\infty \rightarrow \infty$ (strichlierte Linie). Ihr Wert am kritischen Punkt beträgt $\vartheta_\omega(0, 0) = (d + \omega - 1)\Delta_{\omega,C}^{SM}(d)$, wobei in drei Dimensionen $\omega = 1$ und $\Delta_{\omega,C}^{SM}(3) = 0.214489\dots$, und somit $\vartheta_\omega(0, 0) = 0.643467\dots$ ist.

Setzt man diese Skalenfunktionen nun in Gleichung (2.109) ein, so lässt sich hieraus die skalierte Casimir-Kraft $L^d \mathcal{F}_C / k_B T$ in Abhängigkeit von der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ , der Filmdicke L und dem Parameter b berechnen. Die nicht-universellen Konstanten $w_{d=3}^{(\Lambda)}$ und $\tilde{w}_{d=3}^{(\Lambda)}$ in dem Koeffizienten der Skalenfunktion ϑ_ω in Gleichung (2.109) werden dabei — wie auch schon zur grafischen Darstellung der Exzess-Freien-Energie im Fall $d = \sigma = 3$ im vorangegangenen Abschnitt — auf den Wert $w_{d=3}^{(\Lambda)} = \tilde{w}_{d=3}^{(\Lambda)} = 1$ gesetzt. Die auf diesem Wege erhaltene skalierte Casimir-Kraft ist in den Abbildungen 17(a) und 17(b) sowohl für den Fall rein kurzreichweitiger Wechselwirkungen $b = 0$ als auch den langreichweitigen van-der-Waals-Fall mit exemplarisch $b = 2/3$ über der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ aufgetragen. Die Filmdicke L wurde dabei auf den Wert $L = 50$ gesetzt.

In qualitativer Übereinstimmung mit dem Verhalten der in den Abbildungen 12(a) und 12(b) dargestellten skalierten Exzess-Freien-Energie im Fall $d = \sigma = 3$, äußert sich die Anwesenheit der langreichweitigen van der Waals-Wechselwirkung auch bei der skalierten Casimir-Kraft in linearer Auftragung (Abbildung 17(a)) lediglich in einer geringfügigen Verschiebung der Kurve gegenüber dem rein kurzreichweitigen Fall $b = 0$. Der qualitative Unterschied in ihrem asymptotischen Verhalten für große Werte von L/ξ_∞ in diesen beiden Fällen, macht sich jedoch in doppellogarithmischer Auftragung bemerkbar (Abbildung 17(b)), da auch die skalierte Casimir-Kraft im rein kurzreichweitigen Fall exponentiell und in Anwesenheit der van der Waals-Wechselwirkung algebraisch und dabei in führender Ordnung proportional zu $(L/\xi_\infty)^{-2}$ abfällt. Ihre Asymptote (2.116a), die in doppellogarithmischer Auftragung einer Geraden mit negativer Steigung -2 entspricht, ist dabei als punktierte Linie eingezeichnet. Um die Abhängigkeit der skalierten Casimir-Kraft von der Filmdicke L im langreichweitigen Fall zu illustrieren, finden sich in den Abbildungen 18(a) und 18(b) für verschiedene Werte von L sowohl lineare als auch doppellogarithmische Auftragnungen der skalierten Casimir-Kraft über der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ . Die dargestellten Kurven konvergieren dabei, qualitativ übereinstimmend mit dem Verhalten der skalierten Exzess-Freien-Energie in den Abbildungen 13(a) und 13(b), mit zunehmender Filmdicke gegen die Skalenfunktion ϑ_0 , da sowohl der aus der van der Waals-Wechselwirkung resultierende Beitrag zur skalierten Casimir-Kraft als auch die Wegner-Korrekturen im Limes $L \rightarrow \infty$ bei konstant gehaltenem Wert der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ verschwinden.

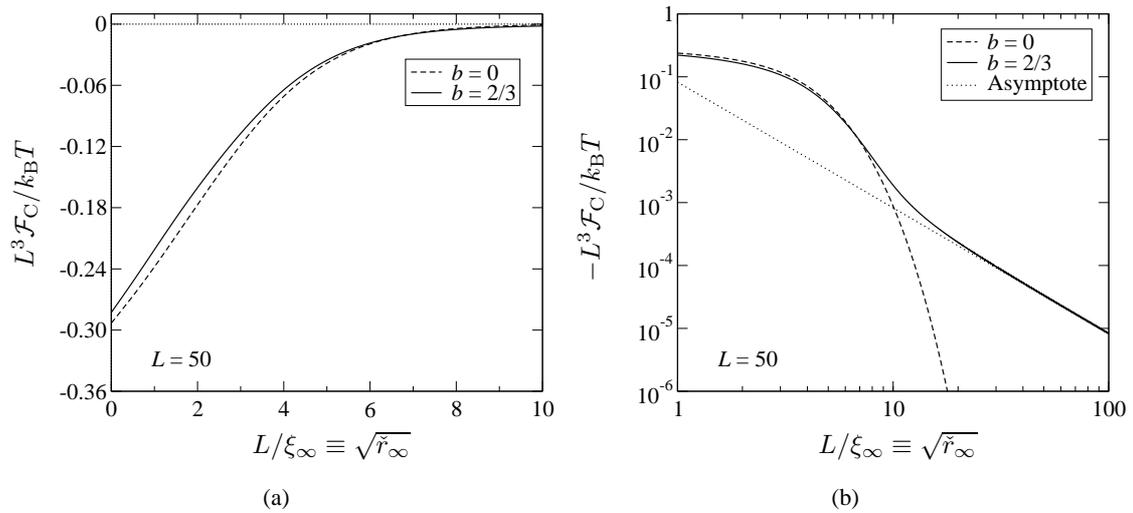


Abbildung 17: Auftragung der skalierten Casimir-Kraft $L^d \mathcal{F}_C / k_B T$ des dreidimensionalen *Mean-Sphärischen-Modells* über der *Finite-Size-Skalenvariablen* $L / \xi_\infty \equiv \sqrt{\tilde{r}_\infty}$ bei einer Filmdicke von $L = 50$ in Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes (a). Dargestellt ist dabei sowohl der Verlauf für den Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen ($\sigma = 3$) mit $b = 2/3$ (durchgezogene Linie) als auch für den rein kurzreichweitigen Fall $b = 0$ (strichlierte Linie). Abbildung (b) zeigt die in (a) dargestellten Kurven in doppellogarithmischer Auftragung. Die sich aus dem asymptotischen Verhalten der Skalenfunktion $\vartheta_\sigma(\tilde{r}_\infty, 0; L)$ ergebende Asymptote (2.116a), die in dieser Auftragung einer Geraden mit der Steigung -2 entspricht, ist als punktierte Linie dargestellt.

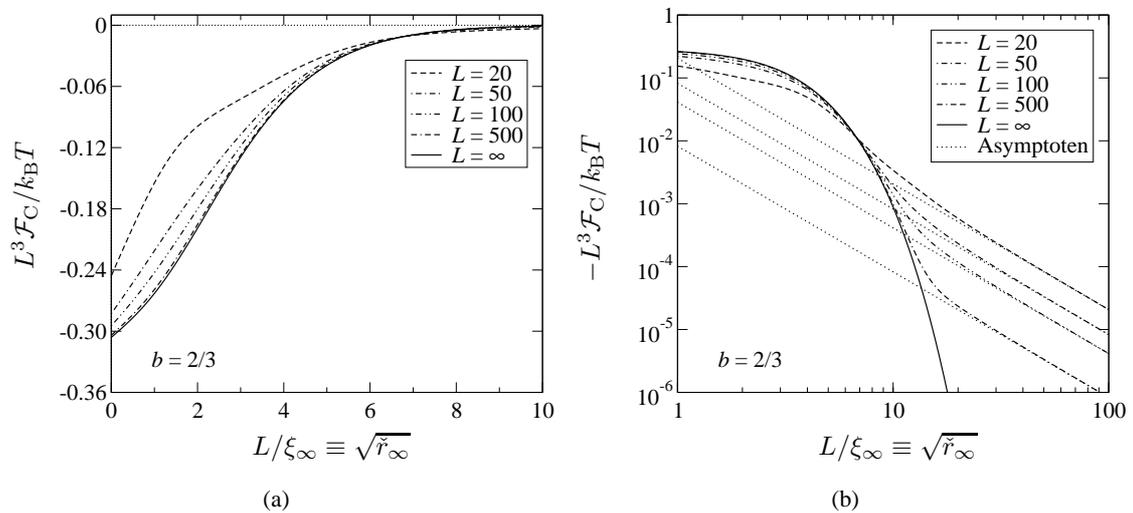


Abbildung 18: Auftragung der skalierten Casimir-Kraft $L^d \mathcal{F}_C / k_B T$ des dreidimensionalen *Mean-Sphärischen-Modells* im Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen ($\sigma = 3$) über der *Finite-Size-Skalenvariablen* $L / \xi_\infty \equiv \sqrt{\tilde{r}_\infty}$ für die Filmdicken $L = 20, 50, 100, 500$ und im Limes $L \rightarrow \infty$ in Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes (a). Der Parameter b , der die Stärke des van-der-Waals-Anteils des Paarpotentials bestimmt, und auch in den Koeffizienten der Skalenfunktion ϑ_ω in Gleichung (2.109) mit eingeht, wurde dabei exemplarisch auf den Wert $b = 2/3$ gesetzt. In Abbildung (b) sind dieselben Kurven wie auf der linken Seite dargestellt, jedoch in doppellogarithmischer Auftragung. Die Asymptoten, die sich aus Gleichung (2.116a) für die verschiedenen Filmdicken L ergeben, entsprechen dabei den punktierten Linien.

3 Renormierungsgruppenverbesserte Störungstheorie für das ϕ^4 -Modell

Für den Grenzfall $n \rightarrow \infty$ in $2 < d < 4$ Dimensionen konnten im vorangegangenen Kapitel durch Untersuchung eines geeigneten *Mean-Sphärischen-Modells*, exakte Ergebnisse für die *Finite-Size-Skalenfunktionen* der Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft und ihre führenden Korrekturen erhalten werden. Eine entsprechende Vorgehensweise ist im Fall endlicher Anzahl von Komponenten des Ordnungsparameters $n < \infty$ jedoch nicht möglich. Dieser gestattet in $2 < d < 4$ Dimensionen keine exakten Lösungen und muss daher approximativ behandelt werden. Die Umsetzung eines solchen Verfahrens ist Gegenstand dieses Kapitels. Dazu wird, unter Berücksichtigung einer langreichweitigen Wechselwirkung der in Gleichung (1.1) angegebenen Form, ein geeignetes feldtheoretisches ϕ^4 -Kontinuumsmodell mit $L \times \infty^{d-1}$ Filmgeometrie aufgestellt, das — wie auch das in Kapitel 2 betrachtete *Mean-Sphärische-Modell* für den Grenzfall $n \rightarrow \infty$ — ein Repräsentant der Universalitätsklasse der $O(n)$ -symmetrischen Modelle ist. Die freie Energie dieses Modells wird im Rahmen der renormierungsgruppenverbesserten Störungstheorie in Zweischleifennäherung berechnet, und daraus die *Finite-Size-Skalenfunktionen* der Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft sowie ihre führenden Korrekturen hergeleitet.

Mit dem thermodynamischen Casimir-Effekt in $O(n)$ -symmetrischen Systemen mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen hingegen, haben sich bereits zahlreiche feldtheoretische Arbeiten beschäftigt. Die bislang umfassendsten gehen dabei auf Krech und Dietrich [29, 30] zurück. Die grundlegende Arbeit von Symanzik [58] erweiternd, in der der kritische Wert der Casimir-Kraft für den Fall eines einkomponentigen Ordnungsparameters mit Dirichlet-Randbedingungen an den Oberflächen des Films angegeben worden ist, betrachteten sie n -komponentige ϕ^4 -Modelle mit $L \times \infty^{d-1}$ Filmgeometrie, und führten in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen unter Beschränkung auf den Temperaturbereich $T \geq T_{c,\infty}$ für verschiedene Randbedingungen Rechnungen in Zweischleifennäherung durch. Neben periodischen und antiperiodischen Randbedingungen untersuchten sie Dirichlet-Randbedingungen (D-D) und die sogenannten speziellen Randbedingungen¹ (sp-sp) an

¹Die spezielle Randbedingung liegt vor, wenn die Wechselwirkungen an der begrenzenden Oberfläche kritisch verstärkt werden. Dies ist der Fall an dem aus der Theorie der oberflächenkritischen Phänomene bekannten speziellen Übergang [31, 32].

den Oberflächen des Films, sowie die Kombination dieser beiden (D-sp), und berechneten hierfür im Rahmen einer Epsilon-Entwicklung die *Finite-Size*-Skalenfunktionen der Exzess-Freien-Energie bis zur ersten Ordnung in ϵ . Für die Beschränkung auf den Bereich $T \geq T_{c,\infty}$ gab es dabei mehrere Gründe. Neben dem in Abschnitt 1.3 angesprochenen Problem, in $O(n)$ -symmetrischen Systemen mit $n \geq 2$ auf der Koexistenzkurve ($T < T_{c,\infty}, H = 0$) eine geeignete *Finite-Size*-Skalenvariable zu definieren, begründet sich eine weitere Schwierigkeit in dem Verhalten der freien Energie des Systems mit endlicher Filmdicke ($L < \infty$) im Temperaturbereich $T < T_{c,\infty}$. Wird die Temperatur von Werten oberhalb der kritischen Temperatur her kommend verringert, so zeigt das System bei einer Temperatur $T_{c,L} < T_{c,\infty}$, die der kritischen Temperatur des Systems mit endlicher Filmdicke entspricht, einen Phasenübergang mit $(d-1)$ -dimensionalem kritischem Verhalten² (siehe z.B. [102]). Dieser Übergang von d -dimensionalem zu $(d-1)$ -dimensionalem kritischem Verhalten wird als *dimensioneller Crossover* bezeichnet, und ist im Rahmen der Epsilon-Entwicklung nicht handhabbar (siehe z.B. [33, 103]). Darüber hinaus ist — wie erstmals in Referenz [33] heraus gestellt — bei $T = T_{c,\infty}$ ein Zusammenbruch der Störungstheorie für die freie Energie zu beobachten, der immer dann auftritt, wenn das durch die Randbedingungen festgelegte Spektrum der Fourier-Moden des Ordnungsparameters entlang der Richtung senkrecht zu den Oberflächen des Films die Nullmode $q_{\perp} = 0$ beinhaltet. Er ist darauf zurückzuführen, dass die Landau-Theorie in diesem Fall für das *Bulk*-System und das System mit endlicher Filmdicke einen Phasenübergang bei derselben Temperatur $T = T_{c,\infty}$ prognostiziert.

Diese Problematik betrifft sowohl sp-sp als auch periodische Randbedingungen, und führt im Fall $L < \infty$ oberhalb der Zweischleifennäherung zu Infrarotdivergenzen bei $T = T_{c,\infty}$, und bereits in Zweischleifennäherung zu einer Änderung der Analytizitätseigenschaften der freien Energie. Im thermodynamischen Limes gilt für den singulären Anteil der freien Energie pro Volumeneinheit (siehe z.B. Gleichung (4.9) in [30])

$$f_{\text{bk}}^{\text{sing}}(T, H = 0) \underset{t \rightarrow 0_{\pm}}{\approx} -\frac{\mathcal{A}_{\pm}|t|^{2-\alpha}}{\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)} \quad (3.1)$$

mit dem kritischen Exponenten α und den nicht-universellen Amplituden \mathcal{A}_{\pm} . Die freie Energie f_{bk} weist somit am kritischen Punkt $T = T_{c,\infty}$ eine nichtanalytische Abhängigkeit von der reduzierten Temperatur t auf, die — was unmittelbar durch zweimaliges Ableiten von Gleichung (3.1) nach t folgt — ursächlich ist für die Divergenz der spezifischen Wärmekapazität $\sim |t|^{-\alpha}$ am kritischen Punkt. Im Fall $L < \infty$ jedoch ist diese Nichtanalytizität bei $T = T_{c,\infty}$ nicht vorhanden, da dies nicht der *wahre* kritische Punkt des Systems mit endlicher Filmdicke ist. Die in Glei-

²Voraussetzung für das Auftreten dieses Phasenübergangs ist, dass das System in der um eins verringerten Dimensionen überhaupt einen Phasenübergang zweiter Ordnung aufweist. In dem in Kapitel 2 dieser Arbeit untersuchten *Mean-Sphärischen-Modell* ist dies in $d-1 = 2$ Dimensionen nicht der Fall. Ein Phasenübergang im Film ($L < \infty$) bei einer kritischen Temperatur $T_{c,L} > 0$ tritt in diesem Modell nur in $d > 3$ Dimensionen auf, während in drei Dimensionen $T_{c,L} = 0$ ist (siehe z.B. [101]).

chung (1.14) definierte freie Energie pro Flächeneinheit $f_L(T, H = 0)$ ist daher für $L < \infty$ eine bei $T = T_{c,\infty}$ analytische Funktion von der reduzierten Temperatur t .

Dieses Verhalten der freien Energie wird im Rahmen der von Krech und Dietrich zusammen mit der Epsilon-Entwicklung verwendeten Störungstheorie in Zweischleifennäherung im Fall von sp-sp und periodischen Randbedingungen nicht reproduziert. Sie haben angeführt, dass ihre für diese Randbedingungen erhaltenen $O(\epsilon)$ -Resultate nicht in Einklang stehen mit der Forderung, dass $f_L(T, H = 0)$ im Fall $L < \infty$ eine bei $T = T_{c,\infty}$ analytische Funktion von t ist (siehe § VII. in [30]). Dennoch haben sie ihre für diese — und auch alle weiteren — Randbedingungen erhaltenen Ergebnisse gegen $\epsilon = 1$ extrapoliert, um die *Finite-Size*-Skalenfunktionen der Exzess-Freien-Energie und die Casimir-Amplituden, die den Werten der Skalenfunktionen bei $L/\xi_\infty = 0$ entsprechen, in drei Dimensionen zu berechnen.

In einer Arbeit von Diehl, Grüneberg und Shpot [33] wurde der im Fall von sp-sp und periodischen Randbedingungen auftretende Zusammenbruch der Störungstheorie bei $T = T_{c,\infty}$ erneut aufgegriffen, und dabei heraus gestellt, dass er durch eine Umordnung der Störungstheorie vermieden werden kann. Im Rahmen dieser Umordnung wird die bei diesen Randbedingungen vorhandene ($q_\perp = 0$)-Mode des Ordnungsparameters abgespalten, und — vor dem Hintergrund der ($q_\perp \neq 0$)-Moden — separat behandelt. Ausgewertet bei $T = T_{c,\infty}$, führt dies auf wohldefinierte Epsilon-Entwicklungen der Casimir-Amplituden, die neben ganzzahligen Potenzen von ϵ auch halbzahlige Potenzen $\epsilon^{k/2}$ mit $k \geq 3$ sowie Potenzen von $\log \epsilon$ aufweisen.

Dass die Nullmode des Ordnungsparameters bei der Untersuchung von *Finite-Size*-Effekten eine besondere Rolle spielen kann und gesondert zu behandeln ist, hat sich bereits in anderen Arbeiten gezeigt, die sich mit allseits endlichen beziehungsweise mit Ausnahme einer Dimension endlichen Systemen beschäftigt haben [104–110]. Diese unterscheiden sich jedoch von den in dieser Arbeit betrachteten Systemen der Geometrie $L \times \infty^{d-1}$ insofern, als dass sie — außer im thermodynamischen Limes — bei $T > 0$ keine scharfen Phasenübergänge aufweisen.

In den verbleibenden Abschnitten dieses Kapitels wird nun zunächst die Störungstheorie für die freie Energie und deren in [33] vorgeschlagene Umordnung rekapituliert, um mit Hilfe dieses Verfahrens dann — im Rahmen der renormierungsgruppenverbesserten Störungstheorie in $4 - \epsilon$ Dimensionen — die *Finite-Size*-Skalenfunktionen der Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft und ihre führenden Korrekturen im Temperaturbereich $T \geq T_{c,\infty}$ in Zweischleifennäherung zu berechnen. Die Ergebnisse werden daran anschließend mit Monte Carlo-Resultaten und — im Rahmen der Epsilon-Entwicklung — mit den exakten Ergebnissen für das *Mean-Sphärische*-Modell verglichen. Zunächst wird jedoch das in diesem Kapitel betrachtete ϕ^4 -Modell eingeführt.

3.1 Definition des Modells

Grundlage für die in diesem Kapitel vorgenommene feldtheoretische Beschreibung des universellen kritischen Verhaltens im $O(n)$ -symmetrischen Fall, ist das ϕ^4 -Kontinuumsmodell in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen mit einer langreichweitigen Wechselwirkung (siehe z.B. [14, 22, 111]).

Sei $\phi(\mathbf{x}) = (\phi_1(\mathbf{x}), \phi_2(\mathbf{x}), \dots, \phi_n(\mathbf{x}))$ ein n -komponentiges Ordnungsparameterfeld mit reellwertigen Komponenten $\phi_\alpha(\mathbf{x}) \in (-\infty, \infty)$ ($\alpha = 1, \dots, n$), und das System auf ein zunächst allseits endliches d -dimensionales Volumen der Geometrie $L_1 \times L_2 \times \dots \times L_d$ beschränkt, so wird das im Folgenden betrachtete Modell durch den Hamiltonian

$$\mathcal{H}[\phi] = \mathcal{H}_0[\phi] + \mathcal{H}_1[\phi] \quad (3.2a)$$

beschrieben, mit dem freien Anteil

$$\mathcal{H}_0[\phi] = \int_{\mathfrak{V}_L} d^d \mathbf{x} \left[\frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{\hat{\tau}}{2} \phi^2 - \frac{\hat{b}}{2} \phi (-\Delta)^{\sigma/2} \phi \right] \quad (3.2b)$$

und dem Wechselwirkungsanteil

$$\mathcal{H}_1[\phi] = \frac{\hat{u}}{4!} \int_{\mathfrak{V}_L} d^d \mathbf{x} |\phi|^4 \quad (3.2c)$$

in Ortsraumdarstellung. Die über $\mathbf{x} \equiv (x_1, \dots, x_d)$ auszuführenden Integrationen in $\mathcal{H}_0[\phi]$ und $\mathcal{H}_1[\phi]$ erstrecken sich dabei über das Volumen $\mathfrak{V}_L = [-L_1/2, L_1/2] \times \dots \times [-L_d/2, L_d/2]$, wobei entlang aller d Hauptrichtungen periodische Randbedingungen angenommen werden. Für das Ordnungsparameterfeld $\phi(\mathbf{x})$ gilt daher $\phi(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x} + L_i \hat{e}_i)$ für alle $i = 1, \dots, d$, wobei \hat{e}_i den Einheitsvektor entlang der i -ten Hauptrichtung bezeichnet. Es ist somit invariant unter der räumlichen Translation $x_i \mapsto x_i + L_i \forall i$.

Die in das Modell eingehenden Variablen $\hat{\tau}$, \hat{b} und die Kopplungskonstante $\hat{u} \geq 0$ sind phänomenologische Parameter. Dabei misst $\hat{\tau} \propto (T - T_0)$ die Abweichung der Temperatur von einer Referenztemperatur T_0 , die in der Störungstheorie unter Verwendung von dimensioneller Regularisierung und der Epsilon-Entwicklung mit der kritischen Temperatur $T_{c,\infty}$ zusammenfällt. Der kritische Wert von $\hat{\tau}$ beträgt daher im Folgenden $\hat{\tau}_{c,\infty} = 0$. Der zu \hat{b} proportionale Operator auf der rechten Seite von Gleichung (3.2b) berücksichtigt den langreichweitigen Anteil (1.1) des Paarpotentials, wobei der Parameter $\hat{b} \geq 0$ dessen Stärke modelliert und der Wert von σ , wie auch bei der Untersuchung des *Mean-Sphärischen-Modells* im vorangegangenen Kapitel, auf das Intervall $2 < \sigma < 4$ beschränkt ist. Der Ausdruck $\phi(-\Delta)^{\sigma/2} \phi$ ist dabei über seine Fouriertransformierte definiert und so konstruiert, dass er den in Abschnitt 2.2 diskutierten nichtanalytischen Beitrag $\sim q^\sigma$ in der Fouriertransformierten des langreichweitigen Paarpotentials reproduziert.

Der freie Anteil des Hamiltonians (3.2) lässt sich im Impulsraum durch Entwicklung von ϕ nach geeigneten Eigenfunktionen diagonalisieren. Bezeichnet $\mathbf{q} \equiv (q_1, \dots, q_d)$ den Vektor der zu den

Ortskoordinaten \mathbf{x} konjugierten Impulse, so lauten diese im Fall periodischer Randbedingungen entlang der i -ten Hauptrichtung $\langle x_i | m_i \rangle = e^{iq_i m_i x_i} / \sqrt{L_i}$ mit den erlaubten Impulsen $q_{i,m_i} = 2\pi m_i / L_i$ ($m_i \in \mathbb{Z}$). Verallgemeinert auf den hier zu betrachtenden d -dimensionalen Fall, führt dies auf die Eigenfunktionen

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{m} \rangle \equiv \prod_{i=1}^d \langle x_i | m_i \rangle, \quad (3.3a)$$

mit dem Vektor der Modenindizes $\mathbf{m} \equiv (m_1, \dots, m_d)$. Diese bilden gemäß

$$\sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^d} \langle \mathbf{x} | \mathbf{m} \rangle \langle \mathbf{m} | \mathbf{x}' \rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \mathfrak{V}_L \quad (3.3b)$$

und

$$\int_{\mathfrak{V}_L} d^d \mathbf{x} \langle \mathbf{m} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{m}' \rangle = \prod_{i=1}^d \delta_{m_i, m'_i} \equiv \delta_{\mathbf{m}, \mathbf{m}'} \quad (3.3c)$$

ein vollständiges orthonormales Funktionensystem, und hiernach entwickelt ergibt sich das Ordnungparameterfeld zu

$$\phi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^d}^< \langle \mathbf{x} | \mathbf{m} \rangle \tilde{\phi}_{\mathbf{m}} \quad (3.4)$$

mit den n -komponentigen Entwicklungskoeffizienten $\tilde{\phi}_{\mathbf{m}} \equiv (\tilde{\phi}_{\mathbf{m},1}, \dots, \tilde{\phi}_{\mathbf{m},n})$. Die Notation $\sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^d}^<$ bedeutet, dass sich die Summationen über alle $\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^d$ erstrecken, für die $|q_{\mathbf{m}}| \leq \Lambda$ ist. Dabei bezeichnet Λ einen Abschneideimpuls, der durch das Inverse der charakteristischen mikroskopischen Längenskala innerhalb des Systems festgelegt ist. Dieser wird im Folgenden jedoch nach unendlich verschoben und sämtliche ultraviolett(UV)-divergenten Ausdrücke unter Verwendung von dimensioneller Regularisierung ausgewertet (siehe z.B. § 8-3 in [112] und Abschnitt 3.3.1 dieser Arbeit).

Ersetzt man ϕ nun im freien Anteil (3.2b) des Hamiltonians durch die Entwicklung (3.4), so geht dieser unter Verwendung der Orthonormierungsbedingung (3.3c) über in

$$\mathcal{H}_0[\phi] = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^d} (\dot{\tau} + q_{\mathbf{m}}^2 - \mathring{b} q_{\mathbf{m}}^\sigma) \tilde{\phi}_{\mathbf{m}} \cdot \tilde{\phi}_{-\mathbf{m}}, \quad (3.5)$$

mit dem Impulsvektor $\mathbf{q}_{\mathbf{m}} \equiv (q_{1,m_1}, \dots, q_{d,m_d})$ und dessen Betrag $q_{\mathbf{m}} \equiv |\mathbf{q}_{\mathbf{m}}|$. Im Gegensatz zum freien Anteil, zerfällt der Wechselwirkungsanteil des Hamiltonians im Impulsraum nicht in eine Summe unabhängiger Terme. Er ist störungstheoretisch zu behandeln. Diese Störungstheorie soll nun für die freie Energie und auch die Zweipunktkorrelationsfunktion erörtert werden, bevor daran anschließend auf die in [33] vorgeschlagene Umordnung der Störungstheorie zur Vermeidung ihres Zusammenbruchs bei $T = T_{c,\infty}$ eingegangen wird.

3.2 Freie Energie und Zweipunktkorrelationsfunktion

3.2.1 Die Schleifenentwicklung der freien Energie

Den Ausgangspunkt für die Berechnung der freien Energie bildet wiederum die kanonische Zustandssumme, die gemäß

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[\phi] e^{-\mathcal{H}[\phi]} \quad (3.6)$$

durch Funktionalintegration des Boltzmann-Faktors $e^{-\mathcal{H}[\phi]}$ mit dem Hamiltonian (3.2) über alle Realisationen des Ordnungsparameterfeldes $\phi(\mathbf{x})$ zu erhalten ist. Der im Exponenten auftretende Faktor $1/k_B T$ ist dabei bereits durch entsprechende Reskalierung des Feldes ϕ in die phänomenologischen Parameter des Hamiltonians miteinbezogen worden.

Die freie Energie

$$F_{\mathbf{L}} = -k_B T \log \text{Sp}_{\phi} \left(e^{-\mathcal{H}[\phi]} \right) \quad (3.7)$$

des im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen allseits endlichen Systems mit den Systemlängen $\mathbf{L} \equiv (L_1, \dots, L_d)$ und periodischen Randbedingungen, soll nun unter Beschränkung auf die ungeordnete Phase ($T \geq T_{c,\infty}$) berechnet werden; hier und im Folgenden wird dabei die Notation $\text{Sp}_{\phi}(\dots) \equiv \int \mathcal{D}[\phi](\dots)$ verwendet. Der zu der Kopplungskonstanten \hat{u} proportionale Wechselwirkungsanteil des Hamiltonians wird dabei als Störung der freien Theorie aufgefasst, und die freie Energie aus diesem Grund um $\hat{u} = 0$ entwickelt. Dies führt auf eine Entwicklung von $F_{\mathbf{L}}$ nach Potenzen der Kopplungskonstanten, die im Folgenden bis zur ersten Ordnung hergeleitet wird. Dazu wird zunächst der Hamiltonian auf der rechten Seite von Gleichung (3.7) in seinen freien Anteil $\mathcal{H}_0[\phi]$ und den Wechselwirkungsanteil $\mathcal{H}_1[\phi]$ aufgespalten. Auch die freie Energie kann dann gemäß

$$-\frac{F_{\mathbf{L}}}{k_B T} = \log \text{Sp}_{\phi} \left(e^{-\mathcal{H}_0[\phi]} \right) + \log \left\langle e^{-\mathcal{H}_1[\phi]} \right\rangle_0 \quad (3.8)$$

mit dem Erwartungswert bezüglich der freien Theorie

$$\langle \dots \rangle_0 \equiv \frac{\text{Sp}_{\phi}(\dots e^{-\mathcal{H}_0[\phi]})}{\text{Sp}_{\phi}(e^{-\mathcal{H}_0[\phi]})} \quad (3.9)$$

in zwei Beiträge aufgespalten werden, die nun weiter ausgewertet werden sollen. Dazu wird zunächst der erste Term auf der rechten Seite von Gleichung (3.8) betrachtet. Ersetzt man in $\text{Sp}_{\phi}(e^{-\mathcal{H}_0[\phi]})$ den freien Anteil $\mathcal{H}_0[\phi]$ durch seine Impulsraumdarstellung (3.5), so kann dieser Ausdruck nach Aufspaltung der vektorwertigen Entwicklungskoeffizienten $\tilde{\phi}_{\mathbf{m}}$ in ihre Komponenten $\tilde{\phi}_{\mathbf{m},\alpha}$ ($\alpha = 1, \dots, n$) geschrieben werden als

$$\text{Sp}_{\phi} \left(e^{-\mathcal{H}_0[\phi]} \right) = \prod_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^d} \prod_{\alpha=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{\phi}_{\mathbf{m},\alpha} \exp \left[-\frac{1}{2} (\hat{\tau} + q_{\mathbf{m}}^2 - \hat{b} q_{\mathbf{m}}^{\sigma}) \tilde{\phi}_{\mathbf{m},\alpha} \tilde{\phi}_{-\mathbf{m},\alpha} \right]. \quad (3.10)$$

Unter Verwendung von $\tilde{\phi}_{\mathbf{m},\alpha}\tilde{\phi}_{-\mathbf{m},\alpha} = |\tilde{\phi}_{\mathbf{m},\alpha}|^2 = \text{Re}(\tilde{\phi}_{\mathbf{m},\alpha})^2 + \text{Im}(\tilde{\phi}_{\mathbf{m},\alpha})^2$ können nun die Integration über die $\tilde{\phi}_{\mathbf{m},\alpha}$ mit $\mathbf{m} \neq \mathbf{0}$ auf Gaußsche Integrationen über deren Real- und Imaginärteile $\text{Re}(\tilde{\phi}_{\mathbf{m},\alpha})$ beziehungsweise $\text{Im}(\tilde{\phi}_{\mathbf{m},\alpha})$ umgeschrieben, und mit Hilfe der Identität

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (\text{Re}(a) > 0) \quad (3.11)$$

analytisch ausgeführt werden. Dabei gilt es jedoch zu berücksichtigen, dass die Komponenten $\tilde{\phi}_{\mathbf{m},\alpha}$ und $\tilde{\phi}_{-\mathbf{m},\alpha}$ der Entwicklungskoeffizienten $\tilde{\phi}_{\mathbf{m}}$ nicht unabhängig voneinander sind, sondern $\text{Re}(\tilde{\phi}_{\mathbf{m},\alpha}) = \text{Re}(\tilde{\phi}_{-\mathbf{m},\alpha})$ und $\text{Im}(\tilde{\phi}_{\mathbf{m},\alpha}) = -\text{Im}(\tilde{\phi}_{-\mathbf{m},\alpha})$ ist. Um eine Doppelzählung zu vermeiden, ist daher nach Umschreiben der Integrationen auf $\text{Re}(\tilde{\phi}_{\mathbf{m},\alpha})$ und $\text{Im}(\tilde{\phi}_{\mathbf{m},\alpha})$ das Produkt über die Terme mit $\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^d \setminus \{\mathbf{0}\}$ in Gleichung (3.10) für einen der Indizes m_i ($i = 1, \dots, d$) durch ein Produkt über $m_i \in \mathbb{N}$ zu ersetzen (siehe z.B. § 5.7.2 in [113]). Letztendlich erhält man

$$\text{Sp}_{\phi} \left(e^{-\mathcal{H}_0[\phi]} \right) = \prod_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^d} \left(\frac{2\pi}{\hat{\tau} + q_{\mathbf{m}}^2 - \hat{b}q_{\mathbf{m}}^{\sigma}} \right)^{n/2}, \quad (3.12)$$

und durch Logarithmieren dieses Ausdrucks

$$\log \text{Sp}_{\phi} \left(e^{-\mathcal{H}_0[\phi]} \right) = -\frac{n}{2} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^d} \log \left(\frac{\hat{\tau} + q_{\mathbf{m}}^2 - \hat{b}q_{\mathbf{m}}^{\sigma}}{2\pi} \right). \quad (3.13)$$

Zur Auswertung des zweiten Terms auf der rechten Seite von Gleichung (3.8), wird für den Wechselwirkungsanteil $\mathcal{H}_1[\phi]$ seine Ortsraumdarstellung (3.2c) eingesetzt, und die Exponentialfunktion um $\hat{u} = 0$ bis zur ersten Ordnung entwickelt. Dies ergibt

$$\left\langle e^{-\mathcal{H}_1[\phi]} \right\rangle_0 = 1 - \frac{\hat{u}}{4!} \int_{\mathfrak{X}_L} d^d \mathbf{x} \langle |\phi(\mathbf{x})|^4 \rangle_0 + O(\hat{u}^2), \quad (3.14)$$

und $|\phi|^4$ soll nun durch die Komponenten des Ordnungsparameterfeldes ϕ_i ($i = 1, \dots, n$) ausgedrückt werden. Dabei ist

$$\int_{\mathfrak{X}_L} d^d \mathbf{x} \langle |\phi(\mathbf{x})|^4 \rangle_0 = \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} S_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \int_{\mathfrak{X}_L} d^d \mathbf{x} \langle \phi_{\alpha}(\mathbf{x}) \phi_{\beta}(\mathbf{x}) \phi_{\gamma}(\mathbf{x}) \phi_{\delta}(\mathbf{x}) \rangle_0 \quad (3.15)$$

in bezüglich der Indizes $\alpha, \beta, \gamma, \delta \in \{1, \dots, n\}$ symmetrischer Form, mit den Komponenten des vollkommen symmetrischen Tensors vierter Stufe

$$S_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} = \frac{1}{3} (\delta_{\alpha, \beta} \delta_{\gamma, \delta} + \delta_{\alpha, \gamma} \delta_{\beta, \delta} + \delta_{\alpha, \delta} \delta_{\beta, \gamma}). \quad (3.16)$$

Die Vierpunktfunktion $\langle \phi_{\alpha} \phi_{\beta} \phi_{\gamma} \phi_{\delta} \rangle_0$ auf der rechten Seite von Gleichung (3.15) kann durch Anwendung des Wick'schen Theorems auf Produkte von Zweipunktfunktionen umgeschrieben werden. Durch Summation über die drei möglichen Kontraktionen $\overline{\phi_{\alpha} \phi_{\beta} \phi_{\gamma} \phi_{\delta}}$, $\overline{\phi_{\alpha} \phi_{\beta} \phi_{\gamma} \phi_{\delta}}$ und $\overline{\phi_{\alpha} \phi_{\beta} \phi_{\gamma} \phi_{\delta}}$ folgt dabei unter Ausnutzung der Symmetrie bezüglich der Indizes

$$\int_{\mathfrak{X}_L} d^d \mathbf{x} \langle |\phi(\mathbf{x})|^4 \rangle_0 = 3 \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} S_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \int_{\mathfrak{X}_L} d^d \mathbf{x} \langle \phi_{\alpha}(\mathbf{x}) \phi_{\beta}(\mathbf{x}) \rangle_0 \langle \phi_{\gamma}(\mathbf{x}) \phi_{\delta}(\mathbf{x}) \rangle_0. \quad (3.17)$$

Für die Zweipunktfunktionen bezüglich der freien Theorie gilt in der ungeordneten Phase

$$\langle \phi_\alpha(\mathbf{x}) \phi_\beta(\mathbf{x}') \rangle_0 \equiv \delta_{\alpha,\beta} \mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}' | \dot{\tau}, \dot{b}) \quad (3.18)$$

mit dem freien Propagator $\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}' | \dot{\tau}, \dot{b})$. Schreibt man hiermit nun in Gleichung (3.17) die Zweipunktfunktionen auf den freien Propagator um, so geht diese über in

$$\int_{\mathfrak{A}_L} d^d \mathbf{x} \langle |\phi(\mathbf{x})|^4 \rangle_0 = 3 \sum_{\alpha,\gamma} S_{\alpha,\alpha,\gamma,\gamma} \int_{\mathfrak{A}_L} d^d \mathbf{x} \left[\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \dot{\tau}, \dot{b}) \right]^2. \quad (3.19)$$

Da $\sum_{\alpha,\gamma} S_{\alpha,\alpha,\gamma,\gamma} = n(n+2)/3$, folgt letztendlich durch Einsetzen dieses Ausdrucks in Gleichung (3.14) und anschließendes Logarithmieren

$$\log \langle e^{-\mathcal{H}_1[\phi]} \rangle_0 = -\dot{u} \frac{n(n+2)}{4!} \int_{\mathfrak{A}_L} d^d \mathbf{x} \left[\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \dot{\tau}, \dot{b}) \right]^2 + O(\dot{u}^2). \quad (3.20)$$

Damit sind nun die beiden ersten Terme in der Schleifenentwicklung der freien Energie hergeleitet worden. Diese Entwicklung kann auch diagrammatisch mit Hilfe von Feynman-Graphen dargestellt werden. Dabei gilt für die freie Energie bis zu der hier betrachteten Ordnung

$$\frac{F_L}{k_B T} = \bigcirc - \bigcirc\bigcirc + O(3 \text{ Schleifen}), \quad (3.21a)$$

mit dem Einschleifenbeitrag

$$\bigcirc = \frac{n}{2} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^d} \log \left(\frac{\dot{\tau} + q_{\mathbf{m}}^2 - \dot{b} q_{\mathbf{m}}^\sigma}{2\pi} \right), \quad (3.21b)$$

der der reduzierten freien Energie des wechselwirkungsfreien Systems entspricht, und dem Zweischleifenbeitrag

$$\bigcirc\bigcirc = -\dot{u} \frac{n(n+2)}{4!} \int_{\mathfrak{A}_L} d^d \mathbf{x} \left[\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \dot{\tau}, \dot{b}) \right]^2, \quad (3.21c)$$

der die in der Kopplungskonstanten lineare Korrektur dazu repräsentiert. Jede Linie in dem Zweischleifengraphen $\bigcirc\bigcirc$ entspricht dabei einem freien Propagator $\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}' | \dot{\tau}, \dot{b})$, den es nun zu berechnen gilt. Dazu wird zunächst der freie Anteil (3.2b) des Hamiltonians in Ortsraumdarstellung umgeschrieben in

$$\mathcal{H}_0[\phi] = \frac{1}{2} \int_{\mathfrak{A}_L} d^d \mathbf{x} \int_{\mathfrak{A}_L} d^d \mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}) \hat{K}(\mathbf{x}; \mathbf{x}' | \dot{\tau}, \dot{b}) \phi(\mathbf{x}') \quad (3.22)$$

mit dem Operatorkern

$$\hat{K}(\mathbf{x}; \mathbf{x}' | \dot{\tau}, \dot{b}) = \left[\dot{\tau} - \Delta - \dot{b}(-\Delta)^{\sigma/2} \right] \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (3.23)$$

Der freie Propagator kann dann als Lösung von (siehe z.B. § 5.2 in [114])

$$\int_{\mathfrak{A}_L} d^d \mathbf{z} \mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{z} | \dot{\tau}, \dot{b}) \hat{K}(\mathbf{z}; \mathbf{x}' | \dot{\tau}, \dot{b}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (3.24)$$

ermittelt werden, d.h. der freie Propagator entspricht dem Inversen von \hat{K} im Operatorsinne. Ersetzt man hier nun den Operatorkern gemäß Gleichung (3.23) und die auf beiden Seiten auftretenden Delta-Funktionen durch ihre in Gleichung (3.3b) angegebene Darstellung, so führt dies zusammen mit der Eigenfunktionendarstellung des freien Propagators

$$\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}' | \hat{\tau}, \hat{b}) = \langle \mathbf{x} | \tilde{\mathcal{G}}^{(d)}(\hat{\tau}, \hat{b}) | \mathbf{x}' \rangle \quad (3.25a)$$

mit

$$\tilde{\mathcal{G}}^{(d)}(\hat{\tau}, \hat{b}) = \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{m}' \in \mathbb{Z}^d} |\mathbf{m}\rangle \langle \mathbf{m}'| \tilde{\mathcal{G}}_{\mathbf{m}, \mathbf{m}'}(\hat{\tau}, \hat{b}) \quad (3.25b)$$

auf eine Bestimmungsgleichung für die Entwicklungskoeffizienten $\tilde{\mathcal{G}}_{\mathbf{m}, \mathbf{m}'}(\hat{\tau}, \hat{b})$. Diese lautet

$$\sum_{\mathbf{m}, \mathbf{m}' \in \mathbb{Z}^d} \langle \mathbf{x} | \mathbf{m}\rangle \langle \mathbf{m}' | \mathbf{x}' \rangle (\hat{\tau} + q_{\mathbf{m}'}^2 - \hat{b} q_{\mathbf{m}'}^\sigma) \tilde{\mathcal{G}}_{\mathbf{m}, \mathbf{m}'}(\hat{\tau}, \hat{b}) = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^d} \langle \mathbf{x} | \mathbf{m}\rangle \langle \mathbf{m} | \mathbf{x}' \rangle \quad (3.26)$$

und wird gelöst durch

$$\tilde{\mathcal{G}}_{\mathbf{m}, \mathbf{m}'}(\hat{\tau}, \hat{b}) = \frac{\delta_{\mathbf{m}, \mathbf{m}'}}{\hat{\tau} + q_{\mathbf{m}}^2 - \hat{b} q_{\mathbf{m}}^\sigma}. \quad (3.27)$$

Zusammen mit den Gleichungen (3.25) ergibt dies letztendlich

$$\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}' | \hat{\tau}, \hat{b}) = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^d} \frac{\langle \mathbf{x} | \mathbf{m}\rangle \langle \mathbf{m} | \mathbf{x}' \rangle}{\hat{\tau} + q_{\mathbf{m}}^2 - \hat{b} q_{\mathbf{m}}^\sigma}. \quad (3.28)$$

3.2.2 Störungstheorie der Zweipunktkorrelationsfunktion in Einschleifenordnung

Neben der Störungstheorie der freien Energie soll nun auch die Störungstheorie der Zweipunktkorrelationsfunktion

$$G_L^{(2)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}' | \hat{\tau}, \hat{b}, \hat{u}) \equiv \frac{1}{n} \langle \phi(\mathbf{x}) \cdot \phi(\mathbf{x}') \rangle = \frac{1}{n} \sum_{\mu} \frac{\text{Sp}_{\phi}(\phi_{\mu}(\mathbf{x}) \phi_{\mu}(\mathbf{x}') e^{-\mathcal{H}[\phi]})}{\text{Sp}_{\phi}(e^{-\mathcal{H}[\phi]})} \quad (3.29)$$

angegeben werden, da die Korrelationslänge, die bei der Herleitung der *Finite-Size*-Skalenfunktionen von der Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft mit eingeht, im Rahmen dieser Arbeit über das zweite Moment von $G_L^{(2)}$ definiert wird.

Dividiert man Zähler und Nenner in dem Bruch auf der rechten Seite von Gleichung (3.29) durch $\text{Sp}_{\phi}(e^{-\mathcal{H}_0[\phi]})$, folgt daraus durch Entwicklung um $\hat{u} = 0$ bis zur ersten Ordnung

$$\begin{aligned} \frac{\langle \phi_{\mu}(\mathbf{x}) \phi_{\mu}(\mathbf{x}') e^{-\mathcal{H}_1[\phi]} \rangle_0}{\langle e^{-\mathcal{H}_1[\phi]} \rangle_0} &= \langle \phi_{\mu}(\mathbf{x}) \phi_{\mu}(\mathbf{x}') \rangle_0 \left[1 + \frac{\hat{u}}{4!} \int_{\mathfrak{X}_L} d^d \mathbf{x}'' \langle |\phi(\mathbf{x}'')|^4 \rangle_0 \right] \\ &\quad - \frac{\hat{u}}{4!} \int_{\mathfrak{X}_L} d^d \mathbf{x}'' \langle \phi_{\mu}(\mathbf{x}) \phi_{\mu}(\mathbf{x}') |\phi(\mathbf{x}'')|^4 \rangle_0 + O(\hat{u}^2). \end{aligned} \quad (3.30)$$

$|\phi|^4$ kann nun wiederum durch die Komponenten des Ordnungsparameterfeldes ϕ_α ($\alpha = 1, \dots, n$) ausgedrückt, und die resultierenden Sechspunktfunktionen $\langle \phi_\mu \phi_\mu \phi_\alpha \phi_\beta \phi_\gamma \phi_\delta \rangle_0$ mit Hilfe des Wick'schen Theorems auf Produkte von Zweipunktfunktionen umgeschrieben werden. Dies führt letztendlich auf (siehe z.B. § 5.2.2 in [115])

$$G_L^{(2)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}' | \overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{b}, \overset{\circ}{u}) = \text{---} + \text{---} + O(2 \text{ Schleifen}), \quad (3.31a)$$

mit dem freien Propagator zwischen den Punkten \mathbf{x} und \mathbf{x}'

$$\text{---} = \mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}' | \overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{b}) \quad (3.31b)$$

und dem Einschleifenbeitrag

$$\text{---} = -\overset{\circ}{u} \frac{n+2}{6} \int_{\mathfrak{V}_L} d^d \mathbf{x}'' \mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}'' | \overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{b}) \mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}''; \mathbf{x}'' | \overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{b}) \mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}''; \mathbf{x}' | \overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{b}). \quad (3.31c)$$

3.2.3 Umordnung der Störungstheorie

Die in Abschnitt 3.2.1 in Zweischleifenordnung hergeleitete Störungstheorie für die freie Energie des allseits endlichen Systems der Geometrie $L_1 \times \dots \times L_d$ soll nun, wie in [33] vorgeschlagen, umgeordnet werden. Dabei wird zuvor jedoch auf die zur Untersuchung des Casimir-Effekts zu betrachtende Filmgeometrie $L \times \infty^{d-1}$ übergegangen, und dazu bei konstant gehaltenem Wert der Filmdicke $L_1 \equiv L$ der Grenzübergang $L_\alpha \rightarrow \infty$ für alle $\alpha > 1$ vollzogen. Der Vektor \mathbf{L} , der in den vorangegangenen Abschnitten formal zur Kennzeichnung der auf das allseits endliche System bezogenen Größen verwendet wurde, wird in diesem Grenzfall wiederum durch ein skalares L ersetzt. Dementsprechend geht das in der Ortsraumdarstellung (3.2) des Hamiltonians $\mathcal{H}[\phi]$ eingeführte Integrationsvolumen \mathfrak{V}_L über in $\mathfrak{V}_L = [-L/2, L/2] \times \mathbb{R}^{d-1}$.

Die Notwendigkeit, diese Umordnung der Störungstheorie vorzunehmen, wird in Dreischleifenordnung evident. Die Beiträge der Nullmode zu den Ein- und Zweischleifengraphen in der Schleifenentwicklung (3.21a) der freien Energie, die im Fall der Filmgeometrie $L \times \infty^{d-1}$ auf dem freien Propagator³

$$\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}' | \overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{b}) = \sum_{m_1=-\infty}^{\infty} \int_{\mathbf{q}_\parallel}^{(d-1)} \frac{\langle z | m_1 \rangle \langle m_1 | z' \rangle}{\overset{\circ}{\tau} + q^2 - \overset{\circ}{b} q^\sigma} e^{i\mathbf{q}_\parallel \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (3.32)$$

basiert, sind proportional zu positiven Potenzen der Temperaturvariablen $\overset{\circ}{\tau}$, und verschwinden daher am kritischen Punkt $\overset{\circ}{\tau}_{c,\infty} = 0$. Dies gilt jedoch nicht für den in Dreischleifenordnung auftretenden Graphen . Wie in [33] diskutiert, verhält sich der Beitrag von der Nullmode zu dem inneren Subgraphen  proportional zu $\overset{\circ}{\tau}^{-(1+\epsilon)/2}$ in $4 - \epsilon$ Dimensionen, und ergibt — zusammen

³Dieser ergibt sich mit $L_1 \equiv L$ und dem Grenzübergang $L_\alpha \rightarrow \infty$ für alle $\alpha > 1$ unmittelbar aus dem freien Propagator (3.28) im allseits endlichen System.

mit den äußeren Schleifen — einen im Limes $\dot{\tau} \rightarrow 0$ divergierenden Beitrag. Diese Infrarotdivergenzen treten immer dann auf, wenn das durch die Randbedingungen festgelegte Spektrum der Fourier-Moden des Ordnungsparameters entlang der Richtung senkrecht zu den Oberflächen des Films die Nullmode beinhaltet. Wie bereits zu Beginn dieses Kapitels angeführt, liegt die Ursache für diese Problematik darin, dass die Landau-Theorie in diesem Fall für das *Bulk*-System und das System mit endlicher Filmdicke einen Phasenübergang bei derselben Temperatur $T = T_{c,\infty}$ prognostiziert. Dies wird durch die im Folgenden beschriebene Umordnung der Störungstheorie vermieden. Die im Fall periodischer Randbedingungen auftretende Nullmode des Ordnungsparameterfeldes ϕ wird dabei abgespalten, und hierfür durch Ausintegration der übrigen Moden eine effektive Feldtheorie hergeleitet. Die Nullmode wird dabei — als Folge der Kopplung an die übrigen Moden — massiv bei $T = T_{c,\infty}$ im Fall $L < \infty$.

Bezeichnet $z \equiv x_1$ die Koordinate, entlang derer die Ausdehnung des Systems beschränkt ist, und $q_\perp \equiv q_1 = 2\pi m_1/L$ den dazu konjugierten Impuls, so wird als wesentlicher Schritt zur Umformulierung der Störungstheorie, das Ordnungsparameterfeld gemäß

$$\phi(\mathbf{x}) = \sum_{m_1=-\infty}^{\infty} \langle z|m_1 \rangle \tilde{\phi}_{m_1}(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) + \psi(z, \mathbf{r}) \quad (3.33)$$

mit $\mathbf{r} \equiv (x_2, \dots, x_d)$ in seinen Anteil $\varphi(\mathbf{r}) = \tilde{\phi}_0(\mathbf{r})/\sqrt{L}$ von der ($q_1 = 0$)-Mode, der von der Koordinate z unabhängig ist, und den dazu orthogonalen Beitrag $\psi(z, \mathbf{r})$ von den ($q_1 \neq 0$)-Moden mit der Eigenschaft

$$\int_{-L/2}^{L/2} dz \psi(z, \mathbf{r}) = \mathbf{0} \quad (3.34)$$

zerlegt. Ersetzt man nun in der Ortsraumdarstellung (3.2) des Hamiltonians $\mathcal{H}[\phi]$ das Ordnungsparameterfeld ϕ durch $\varphi + \psi$, so lässt sich dieser unter Verwendung der vorangegangenen Gleichung gemäß

$$\mathcal{H}[\varphi + \psi] = \mathcal{H}[\varphi] + \mathcal{H}[\psi] + \mathcal{H}_{\text{int}}[\varphi, \psi] \quad (3.35)$$

in drei Beiträge aufspalten. Letzterer ergibt sich dabei zu

$$\mathcal{H}_{\text{int}}[\varphi, \psi] = \int_{\mathfrak{X}_L} d^d \mathbf{x} \left[\frac{\dot{u}}{4} \varphi^2 \psi^2 + \frac{\dot{u}}{6} (\varphi \cdot \psi) \psi^2 \right] \quad (3.36)$$

und umfasst ausschließlich die Terme, die eine Kopplung der Anteile φ und ψ bewirken. Der Hamiltonian $\mathcal{H}[\varphi]$ lautet in Ortsraumdarstellung

$$\mathcal{H}[\varphi] = L \int_{\mathbb{R}^{d-1}} d^{d-1} \mathbf{r} \left[\frac{1}{2} (\nabla \varphi)^2 + \frac{\dot{\tau}}{2} \varphi^2 - \frac{\dot{b}}{2} \varphi (-\Delta)^{\sigma/2} \varphi + \frac{\dot{u}}{4!} |\varphi|^4 \right], \quad (3.37)$$

da der Beitrag φ nicht von der Koordinate z abhängt, und die Integration hierüber direkt ausgeführt werden kann. Dies ergibt den konstanten Faktor L in $\mathcal{H}[\varphi]$.

Wird nun der Beitrag ψ von den ($q_1 \neq 0$)-Moden ausintegriert, so führt dies gemäß

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi] = -\log \text{Sp}_{\psi} \left(e^{-\mathcal{H}[\varphi+\psi]} \right), \quad (3.38)$$

auf eine effektive ($d-1$)-dimensionale Feldtheorie, beschrieben durch den Hamiltonian $\mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi]$, der sich unter Verwendung der in Gleichung (3.35) angegebenen Zerlegung von $\mathcal{H}[\varphi+\psi]$ zu

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi] = \mathcal{H}[\varphi] - \log \text{Sp}_{\psi} \left(e^{-\mathcal{H}[\psi]} \right) - \log \left\langle e^{-\mathcal{H}_{\text{int}}[\varphi,\psi]} \right\rangle_{\psi} \quad (3.39)$$

ergibt, mit dem als

$$\langle \dots \rangle_{\psi} \equiv \frac{\text{Sp}_{\psi} (\dots e^{-\mathcal{H}[\psi]})}{\text{Sp}_{\psi} (e^{-\mathcal{H}[\psi]})} \quad (3.40)$$

definierten Erwartungswert bezüglich ψ .

Ausgehend von dem für den Hamiltonian $\mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi]$ erhaltenen Ausdruck (3.39), kann nun durch Ausintegration von φ gemäß

$$F_L = -k_B T \log \text{Sp}_{\varphi} \left(e^{-\mathcal{H}_{\text{eff}}[\varphi]} \right) = F_{\psi,L} + F_{\varphi,L} \quad (3.41)$$

die freie Energie des Systems berechnet werden. Dabei ist

$$F_{\psi,L} = -k_B T \log \text{Sp}_{\psi} \left(e^{-\mathcal{H}[\psi]} \right), \quad (3.42)$$

während der Beitrag $F_{\varphi,L}$ aus $\mathcal{H}[\varphi]$ und dem letzten Term in Gleichung (3.39) hervorgeht.

Diese beiden Beiträge zur freien Energie sollen nun störungstheoretisch in Zweischleifenordnung ausgewertet werden. Um $F_{\psi,L}$ herzuleiten, können dabei unmittelbar die in Abschnitt 3.2.1 bei der Störungstheorie für die freie Energie F_L des allseits endlichen Systems erhaltenen Ergebnisse verwendet werden. Hierzu sind die Ausdrücke (3.21b) und (3.21c) für den Ein- und Zweischleifenbeitrag zu F_L lediglich durch die ($d-1$)-dimensionale Querschnittfläche $\prod_{\alpha=2}^d L_{\alpha}$ zu dividieren, um daran anschließend den Limes $L_{\alpha} \rightarrow \infty$ für alle $\alpha > 1$ bei konstant gehaltener Filmdicke $L_1 \equiv L$ zu vollziehen. Die Terme mit $m_1 = 0$ sind dabei aus den Summationen auszunehmen, da ψ keine ($q_1 = 0$)-Mode enthält. Für den Einschleifenbeitrag in der Schleifenentwicklung

$$f_{\psi,L} = f_{\psi,L}^{[1]} + f_{\psi,L}^{[2]} + O(3 \text{ Schleifen}) \quad (3.43)$$

der im Folgenden als $f_{\psi,L}$ bezeichneten freien Energie $F_{\psi,L}$ pro Flächeneinheit, folgt daraus

$$f_{\psi,L}^{[1]} = \lim_{L_2, \dots, L_d \rightarrow \infty} \frac{1}{\prod_{\alpha=2}^d L_{\alpha}} \frac{n}{2} \sum'_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^d} \log \left(\frac{\hat{\tau} + q_{\mathbf{m}}^2 - \hat{b} q_{\mathbf{m}}^{\sigma}}{2\pi} \right), \quad (3.44)$$

wobei hier und im Folgenden die Notation \sum' bedeutet, dass der Term mit $m_1 = 0$ bei der Summation ausgelassen wird. Nach Anwendung der Poissonschen Summationsformel (A.6) auf

die Summationen über m_2, \dots, m_d kann in Gleichung (3.44) der Limes $L_\alpha \rightarrow \infty$ für alle $\alpha > 1$ vollzogen werden, und man erhält letztendlich

$$f_{\psi,L}^{[1]} = \frac{n}{2} \sum'_{m_1=-\infty}^{\infty} \int_{\mathbf{q}_{\parallel}}^{(d-1)} \log \left(\frac{\dot{\tau} + q^2 - \dot{b}q^\sigma}{2\pi} \right) \quad (3.45)$$

mit $\mathbf{q} = (2\pi m_1/L, \mathbf{q}_{\parallel})$ und $\mathbf{q}_{\parallel} \equiv (q_2, \dots, q_d)$.

Um den Zweischleifenbeitrag $f_{\psi,L}^{[2]}$ zu berechnen, wird der für den Zweischleifenbeitrag zur freien Energie F_L erhaltene Ausdruck (3.21c) zunächst durch $\prod_{\alpha=2}^d L_\alpha$ dividiert, und der freie Propagator gemäß Gleichung (3.28) ersetzt. Da $\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \dot{\tau}, \dot{b})$ in dem hier betrachteten Fall periodischer Randbedingungen keine \mathbf{x} -Abhängigkeit besitzt, können die Ortsraumintegrationen unmittelbar ausgeführt werden. Auf die Summationen über m_2, \dots, m_d wird nun wiederum die Poissonsche Summationsformel (A.6) angewendet, und anschließend der Limes $L_\alpha \rightarrow \infty$ für alle $\alpha > 1$ vollzogen. Unter Auslassung der Terme mit $m_1 = 0$ erhält man schließlich

$$f_{\psi,L}^{[2]} = \dot{u}L \frac{n(n+2)}{4!} \left[\mathcal{G}_{\psi,L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \dot{\tau}, \dot{b}) \right]^2 \quad (3.46)$$

mit dem freien ψ -Propagator

$$\mathcal{G}_{\psi,L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}' | \dot{\tau}, \dot{b}) = \sum'_{m_1=-\infty}^{\infty} \int_{\mathbf{q}_{\parallel}}^{(d-1)} \frac{\langle z | m_1 \rangle \langle m_1 | z' \rangle}{\dot{\tau} + q^2 - \dot{b}q^\sigma} e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}. \quad (3.47)$$

Es bleibt nun der Beitrag $F_{\varphi,L}$ zur freien Energie zu betrachten, in den der Hamiltonian der Nullmode $\mathcal{H}[\varphi]$ und der letzte Term in Gleichung (3.39) eingeht, der gemäß

$$-\log \left\langle e^{-\mathcal{H}_{\text{int}}[\varphi, \psi]} \right\rangle_{\psi} = \sum_{l=1}^{\infty} \mathcal{H}_{\text{eff}}^{[l]}[\varphi] \quad (3.48)$$

Schleifenkorrekturen zu $\mathcal{H}[\varphi]$ beiträgt. Diese ergeben sich mit $\mathcal{H}_{\text{int}}[\varphi, \psi]$ aus Gleichung (3.36) in Einschleifenordnung zu (siehe auch [33])

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{[1]}[\varphi] = -\varphi \overbrace{\text{---}}^{\text{---}} \varphi - \varphi \text{---} \varphi + \dots, \quad (3.49)$$

wobei die strichlierten Linien freien ψ -Propagatoren entsprechen, und die grauen Linien φ -Beinchen repräsentieren. In linearer Ordnung in der Kopplungskonstanten gilt daher

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{[1]}[\varphi] = \dot{u} \frac{n+2}{12} \int_{\mathfrak{V}_L} d^d \mathbf{x} \mathcal{G}_{\psi,L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \dot{\tau}, \dot{b}) \varphi^2(\mathbf{r}) + O(\dot{u}^2). \quad (3.50)$$

Terme in $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{[1]}[\varphi]$ von höherer als linearer Ordnung in der Kopplungskonstanten sowie Schleifenkorrekturen $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{[l]}[\varphi]$ mit $l > 1$ brauchen dabei im Rahmen der hier vorgenommenen Zweischleifenrechnung für die freie Energie nicht berücksichtigt zu werden, da sie bis zu dieser Ordnung nicht beitragen.

Addiert man diesen Term nun zu dem in Gleichung (3.37) angegebenen Hamiltonian $\mathcal{H}[\varphi]$, so führt dies gemäß $\hat{\tau} \mapsto \hat{\tau}_L \equiv \hat{\tau} + \delta\hat{\tau}_L$ mit

$$\delta\hat{\tau}_L = \dot{u} \frac{n+2}{6} \mathcal{G}_{\psi,L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\hat{\tau}, \hat{b}) + O(\dot{u}^2) \quad (3.51)$$

zu einer Verschiebung der Temperatur. Diese hängt explizit von der Filmdicke L ab, und hat ihren Ursprung in der Kopplung der ($q_1 = 0$)-Mode φ an die ($q_1 \neq 0$)-Moden ψ . Sie bewirkt, dass die Nullmode im Fall $L < \infty$ bei $T = T_{c,\infty}$ massiv wird, und somit die Temperatur, bei der das System mit endlicher Filmdicke kritisch wird, nicht mit der kritischen Temperatur des *Bulk*-Systems zusammenfällt.

Durch Ausintegration von φ gemäß

$$F_{\varphi,L} = -k_B T \log \text{Sp}_{\varphi} \left(e^{-\mathcal{H}[\varphi] - \sum_{i=1}^{\infty} \mathcal{H}_{\text{eff}}^{[i]}[\varphi]} \right) \quad (3.52)$$

kann nun die im Folgenden als $f_{\varphi,L}$ notierte freie Energie $F_{\varphi,L}$ pro Flächeneinheit hergeleitet werden. In Zweischleifenordnung gilt dabei

$$f_{\varphi,L} = f_{\varphi,L}^{[1]} + f_{\varphi,L}^{[2]} + O(3 \text{ Schleifen}), \quad (3.53)$$

und zur Auswertung der Ein- und Zweischleifenbeiträge $f_{\varphi,L}^{[1]}$ und $f_{\varphi,L}^{[2]}$ können wiederum die in Abschnitt 3.2.1 erhaltenen Ausdrücke für die Terme in der Schleifenentwicklung der freien Energie F_L herangezogen werden. Dazu ist in diesen Ausdrücken — da der Hamiltonian $\mathcal{H}[\varphi]$ ein effektiv $(d-1)$ -dimensionales *Bulk*-System beschreibt — lediglich von d nach $d-1$ überzugehen, und nach Division durch das $(d-1)$ -dimensionale Systemvolumen der thermodynamische Limes zu vollziehen. Es bleibt nun noch $\hat{\tau}$ durch die verschobene Temperatur $\hat{\tau}_L$, und — aufgrund des in $\mathcal{H}[\varphi]$ auftretenden konstanten Vorfaktors L — die Kopplungskonstante \dot{u} durch \dot{u}/L zu ersetzen⁴. Die Ein- und Zweischleifenbeiträge von $f_{\varphi,L}$ ergeben sich dabei letztlich zu

$$f_{\varphi,L}^{[1]} = \frac{n}{2} \int_{\mathbf{q}}^{(d-1)} \log \left(\frac{\hat{\tau}_L + q^2 - \hat{b}q^\sigma}{2\pi} \right) \quad (3.54)$$

beziehungsweise

$$f_{\varphi,L}^{[2]} = \frac{\dot{u}}{L} \frac{n(n+2)}{4!} \left[\mathcal{G}_{\infty}^{(d-1)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\hat{\tau}_L, \hat{b}) \right]^2, \quad (3.55)$$

mit dem freien *Bulk*-Propagator

$$\mathcal{G}_{\infty}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}'|\hat{\tau}, \hat{b}) = \int_{\mathbf{q}}^{(d)} \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}}{\hat{\tau} + q^2 - \hat{b}q^\sigma}. \quad (3.56)$$

⁴Dies folgt unmittelbar aus einer Reskalierung des Feldes in $\mathcal{H}[\varphi]$ gemäß $\varphi \mapsto \varphi/\sqrt{L}$.

3.2.4 Die Korrelationslänge

Zur Herleitung der *Finite-Size*-Skalenfunktionen von der Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft wird — neben der im vorangegangenen Abschnitt als Funktion der Parameter $\hat{\tau}$, \hat{b} und \hat{u} berechneten freien Energie — ein Zusammenhang zwischen der Temperaturvariablen $\hat{\tau}$ und der *Bulk*-Korrelationslänge ξ_∞ sowie ihrem Pendant ξ_L im System mit endlicher Filmdicke benötigt, um damit letztendlich die Exzess-Freie-Energie und die Casimir-Kraft auf die *Finite-Size*-Skalenvariable L/ξ_∞ umzuschreiben. Die *Bulk*-Korrelationslänge wird dabei im Rahmen dieser Arbeit gemäß (siehe z.B. [56, 103])

$$\xi_\infty^2 \equiv \frac{1}{2d} \frac{\int_{\mathbb{R}^d} d^d \mathbf{x} \mathbf{x}^2 G_\infty^{(2)}(\mathbf{x}; 0 | \hat{\tau}, \hat{b}, \hat{u})}{\int_{\mathbb{R}^d} d^d \mathbf{x} G_\infty^{(2)}(\mathbf{x}; 0 | \hat{\tau}, \hat{b}, \hat{u})} \quad (3.57)$$

über das zweite Moment der *Bulk*-Zweipunktkorrelationsfunktion $G_\infty^{(2)}(\mathbf{x}; 0 | \hat{\tau}, \hat{b}, \hat{u})$ definiert, die, ausgehend von der in Abschnitt 3.2.2 betrachteten Zweipunktkorrelationsfunktion des allseits endlichen Systems, durch Vollziehen des thermodynamischen Limes $L_\alpha \rightarrow \infty$ ($\alpha = 1, \dots, d$) erhalten werden kann.

Schreibt man nun in Gleichung (3.57) die *Bulk*-Zweipunktkorrelationsfunktion unter Verwendung von

$$G_\infty^{(2)}(\mathbf{x}; 0 | \hat{\tau}, \hat{b}, \hat{u}) = \int_{\mathbf{q}}^{(d)} \tilde{G}_\infty^{(2)}(\mathbf{q} | \hat{\tau}, \hat{b}, \hat{u}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \quad (3.58)$$

auf ihre Fouriertransformierte um, so folgt daraus nach einigen elementaren Umformungen

$$\xi_\infty^2 = \left[\frac{\partial}{\partial q^2} \log \tilde{G}_\infty^{(2)}(\mathbf{q} | \hat{\tau}, \hat{b}, \hat{u})^{-1} \right] \Big|_{\mathbf{q}=\mathbf{0}}, \quad (3.59)$$

wobei $\tilde{G}_\infty^{(2)}(\mathbf{q} | \hat{\tau}, \hat{b}, \hat{u})$ nur vom Betrag des Impulses $q \equiv |\mathbf{q}|$ abhängt. Dazu analog wird die Korrelationslänge im System mit endlicher Filmdicke über

$$\xi_L^2 \equiv \left[\frac{\partial}{\partial q^2} \log \tilde{G}_L^{(2)}(\mathbf{q} | \hat{\tau}, \hat{b}, \hat{u})^{-1} \right] \Big|_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} \quad (3.60)$$

definiert, wobei sich $\tilde{G}_L^{(2)}(\mathbf{q} | \hat{\tau}, \hat{b}, \hat{u})$ durch Rücktransformation gemäß

$$\tilde{G}_L^{(2)}(\mathbf{q} | \hat{\tau}, \hat{b}, \hat{u}) = \int_{\mathfrak{W}_L} d^d \mathbf{x} G_L^{(2)}(\mathbf{x}; 0 | \hat{\tau}, \hat{b}, \hat{u}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \quad (3.61)$$

aus der Zweipunktkorrelationsfunktion im System mit endlicher Filmdicke ergibt. Diese folgt aus der in den Gleichungen (3.31) angegebenen Zweipunktkorrelationsfunktion im allseits endlichen System durch Übergang auf den Limes $L_\alpha \rightarrow \infty$ für alle $\alpha = 2, \dots, d$ bei konstant gehaltener Filmdicke $L_1 \equiv L$. Setzt man den auf diese Weise erhaltenen Ausdruck für $G_L^{(2)}(\mathbf{x}; 0 | \hat{\tau}, \hat{b}, \hat{u})$ in Gleichung (3.61) ein und bildet den Kehrwert, so erhält man

$$\tilde{G}_L^{(2)}(\mathbf{q} | \hat{\tau}, \hat{b}, \hat{u})^{-1} = \hat{\tau} + q^2 - \hat{b}q^\sigma + \hat{u} \frac{n+2}{6} \mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \hat{\tau}, \hat{b}) + O(\hat{u}^2), \quad (3.62)$$

mit dem freien Propagator (3.32), der im Fall $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$ keine \mathbf{x} -Abhängigkeit besitzt. Durch Einsetzen der rechten Seite von Gleichung (3.62) in die Definitionsgleichung (3.60) von $\xi_L^{\circ 2}$ folgt für deren Inverses $\mathring{r}_L \equiv \xi_L^{\circ -2}$ unter der Annahme $\sigma > 2$,

$$\mathring{r}_L = \mathring{\tau} + \mathring{u} \frac{n+2}{6} \mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \mathring{\tau}, \mathring{b}) + O(\mathring{u}^2). \quad (3.63)$$

Ein entsprechender Ausdruck für das Quadrat der inversen *Bulk*-Korrelationslänge $\mathring{r}_\infty \equiv \xi_\infty^{\circ -2}$ kann hieraus durch Übergang auf den thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ erhalten werden, und lautet

$$\mathring{r}_\infty = \mathring{\tau} + \mathring{u} \frac{n+2}{6} \mathcal{G}_\infty^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \mathring{\tau}, \mathring{b}) + O(\mathring{u}^2), \quad (3.64)$$

mit dem freien *Bulk*-Propagator (3.56). Ausgewertet am kritischen Punkt des *Bulk*-Systems, an dem \mathring{r}_∞ verschwindet und die Temperaturvariable $\mathring{\tau}$ ihren kritischen Wert $\mathring{\tau}_{c,\infty}$ annimmt, folgt aus Gleichung (3.64), dass

$$\mathring{\tau}_{c,\infty} + \mathring{u} \frac{n+2}{6} \mathcal{G}_\infty^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \mathring{\tau}_{c,\infty}, \mathring{b}) + O(\mathring{u}^2) = 0, \quad (3.65)$$

und sich somit der Wert von $\mathring{\tau}$ am kritischen Punkt des *Bulk*-Systems zu

$$\mathring{\tau}_{c,\infty} = -\mathring{u} \frac{n+2}{6} \mathcal{G}_\infty^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | 0, \mathring{b}) + o(\mathring{u}) \quad (3.66)$$

ergibt. Da der freie *Bulk*-Propagator $\mathcal{G}_\infty^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \mathring{\tau}, \mathring{b})$, auf den sich der in Anhang A.3 unter Verwendung von dimensioneller Regularisierung berechnete freie Propagator $\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \mathring{\tau}, \mathring{b})$ im Limes $L \rightarrow \infty$ reduziert, im Rahmen der Epsilon-Entwicklung um $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen bei $\mathring{\tau} = 0$ verschwindet, verschwindet auch $\mathring{\tau}_{c,\infty}$ in niedrigster Ordnung der Kopplungskonstanten.

Gemäß Gleichung (3.63) ist $\mathring{r}_L = \mathring{\tau} + O(\mathring{u})$, und somit kann $\mathring{\tau}$ im Argument des freien Propagators in dieser Gleichung durch \mathring{r}_L ersetzt werden. Umstellen nach $\mathring{\tau}$ liefert schließlich den benötigten Zusammenhang

$$\mathring{\tau} = \mathring{r}_L - \mathring{u} \frac{n+2}{6} \mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \mathring{r}_L, \mathring{b}) + o(\mathring{u}), \quad (3.67a)$$

der im Limes $L \rightarrow \infty$ in eine entsprechende Relation zwischen $\mathring{\tau}$ und \mathring{r}_∞ ,

$$\mathring{\tau} = \mathring{r}_\infty - \mathring{u} \frac{n+2}{6} \mathcal{G}_\infty^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \mathring{r}_\infty, \mathring{b}) + o(\mathring{u}), \quad (3.67b)$$

übergeht.

3.3 Skalenverhalten der freien Energie, Exzess-Freien-Energie und Casimir-Kraft

Unter Verwendung der in Abschnitt 3.2.3 im Rahmen der Störungstheorie in Zweischleifenordnung hergeleiteten Ausdrücke für die Beiträge $f_{\psi,L}$ und $f_{\varphi,L}$ zur freien Energie pro Flächeneinheit, sollen nun die *Finite-Size*-Skalenfunktionen der Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft sowie ihre führenden Korrekturen hergeleitet werden. Die Impulsraumsummen und -integra-

le in den dabei zu berechnenden Feynman-Diagrammen sind jedoch durch das Auftreten von Ultraviolettdivergenzen gekennzeichnet, die daraus resultieren, dass der im System vorhandene Abschneideimpuls Λ nach unendlich verschoben wurde (vgl. Abschnitt 3.1), und somit die Summationen beziehungsweise Integrationen über die Impulse q_i ($i = 1, \dots, d$) bis $q_i \rightarrow \pm\infty$ ausgeführt werden. Da bei der Untersuchung kritischer Phänomene ohnehin das Infrarotverhalten der Theorie, d.h. ihr Verhalten im Grenzfall $q_i/\Lambda \rightarrow 0$ ausschlaggebend ist, ist dies ein sinnvoller Limes. Um dennoch eine UV-endliche Theorie zu erhalten, müssen die Ultraviolettdivergenzen beseitigt werden. Dies geschieht mittels Renormierung (siehe z.B. [112, 114, 115]). Dazu werden die UV-divergenten Ausdrücke zunächst regularisiert und die Ultraviolettdivergenzen anschließend, im Rahmen sogenannter Reparametrisierungen, durch eine Umdefinition der in das Modell eingehenden Parameter absorbiert. Die auf diese Weise renormierte Theorie bildet schließlich den Ausgangspunkt für die Anwendung der Renormierungsgruppentheorie (siehe z.B. § 7 in [115]). Dabei macht man sich die Invarianz der *nackten* (unrenormierten) Theorie unter einer Variation der im Rahmen der Reparametrisierungen einzuführenden beliebigen Impulsskala zunutze. Dies führt auf die sogenannten Renormierungsgruppengleichungen, bei denen es sich um lineare partielle Differentialgleichungen erster Ordnung handelt. Ein Standardverfahren zur Lösung dieser Gleichungen ist die Methode der Charakteristiken, bei der die renormierten Modellparameter durch sogenannte fließende Parameter ersetzt werden. Deren Verhalten unter einer Variation der Impulsskala wird dabei durch ein System linearer Differentialgleichungen erster Ordnung beschrieben, den charakteristischen Gleichungen. Mit Hilfe der Lösungen dieser Gleichungen können schließlich auch die Lösungen der Renormierungsgruppengleichungen hergeleitet werden, anhand derer das asymptotisch kritische Verhalten der Theorie herausgearbeitet werden kann, wenn die β -Funktion, die den Fluss der Kopplungskonstanten beschreibt, eine Nullstelle mit gewissen Eigenschaften besitzt. Auf die wesentlichen Grundlagen dieser Methoden soll nun zunächst eingegangen werden, um im Anschluss daran im Rahmen der renormierungsgruppenverbesserten Störungstheorie in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen unter Verwendung der störungstheoretischen Resultate der vorangegangenen Abschnitte die *Finite-Size*-Skalenfunktionen der Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft und ihre führenden Korrekturen herzuleiten. Dabei werden Doppelentwicklungen in der renormierten Kopplungskonstanten und ϵ als kleinem Parameter durchgeführt.

3.3.1 Renormierung und Renormierungsgruppentheorie

Voraussetzung dafür, eine UV-endliche Feldtheorie erhalten zu können, ist deren Renormierbarkeit. Renormierbare Feldtheorien sind dadurch gekennzeichnet, dass im Prinzip lediglich eine endliche Anzahl von in das Modell eingehenden Parametern abgeändert werden muss, um sämtliche Ultraviolettdivergenzen zu absorbieren (siehe z.B. § 6.1.1 in [115]). In der ϕ^4 -Theorie (3.2), die Gegenstand dieses Kapitels ist, sind dies das Ordnungsparameterfeld ϕ sowie die mit einem hochgestellten Kreis versehenen nackten Modellparameter $\hat{\tau}$, \hat{b} und \hat{u} , die unter Verwendung der

Reparametrisierungen

$$\phi = Z_\phi^{1/2} \phi^{\text{ren}} \quad (3.68a)$$

$$\dot{\tau} - \dot{\tau}_{c,\infty} = \mu^2 Z_\tau \tau \quad (3.68b)$$

$$\dot{b} = \mu^{2-\sigma} Z_b b \quad (3.68c)$$

$$\dot{u} = (4\pi)^{d/2} \mu^{4-d} Z_u u \quad (3.68d)$$

auf das renormierte Ordnungsparameterfeld ϕ^{ren} , die renormierte Temperaturvariable τ , den renormierten Parameter b sowie die renormierte Kopplungskonstante u umgeschrieben werden⁵. Dies wird als *multiplikative* Renormierung bezeichnet und beseitigt die UV-Divergenzen der N -Punkt-Kumulanten

$$G_{\alpha_1, \dots, \alpha_N}^{(N)}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \left\langle \prod_{i=1}^N \phi_{\alpha_i}(\mathbf{x}_i) \right\rangle_{\text{kum}}. \quad (3.69)$$

μ ist dabei eine beliebige Impulsskala, und die Z_i ($i = \phi, \tau, b, u$), die in den Reparametrisierungen (3.68) als Koeffizienten der renormierten Parameter auftreten, sind die sogenannten Renormierungsgruppenfaktoren. Diese nehmen letztlich die UV-divergenten Beiträge auf und sind durch die Eigenschaften des *Bulk*-Systems festgelegt. Ihre Form ist abhängig von der Regularisierungsmethode, die zur Handhabung der UV-divergenten Integrale und Identifikation der divergenten Beiträge verwendet wird. Gebräuchliche Verfahren, die auch an anderen Stellen dieser Arbeit verwendet werden, sind die Regularisierung durch Einführen eines Abschneideimpulses, bei der die Impulsraumintegrationen auf eine Hypersphäre mit Radius Λ beschränkt werden, und auch die dimensionelle Regularisierung (siehe z.B. § 8-3 in [112]). Bei Letzterer wird die in die Impulsraumintegrale eingehende Dimensionalität d als im Allgemeinen komplexwertige Größe aufgefasst und die Integrale im Sinne einer analytischen Fortsetzung in d ausgewertet, anstatt bei fester ganzzahliger Raumdimension zu rechnen. In $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen treten die logarithmischen UV-Divergenzen $\sim \log \Lambda$ nach Entwicklung um $\epsilon = 0$ dann als $1/\epsilon$ -Pole in Erscheinung, die von den Renormierungsgruppenfaktoren aufgenommen werden, während es für die nicht-logarithmischen Divergenzen in der dimensionell regularisierten Theorie keine Entsprechung gibt. Diese Vorgehensweise wird als *minimale Subtraktion* bezeichnet, und führt auf Entwicklungen der Renormierungsgruppenfaktoren Z_i ($i = \phi, \tau, b, u$) nach Potenzen der renormierten Kopplungskonstanten von der Form

$$Z_i = 1 + \sum_{l=1}^{\infty} Z_i^{[l]}(\epsilon, n) u^l, \quad (3.70a)$$

mit Entwicklungskoeffizienten $Z_i^{[l]}(\epsilon, n)$, die ihrerseits gemäß

$$Z_i^{[l]}(\epsilon, n) = \sum_{m=1}^l \frac{a_m(n)}{\epsilon^m}, \quad (3.70b)$$

⁵Der auf der rechten Seite von Gleichung (3.68d) auftretende Faktor $(4\pi)^{d/2}$ folgt der in Referenz [30] getroffenen Konvention.

durch Laurent-Reihen um $\epsilon = 0$ dargestellt sind. Legt man die Reparametrisierungen (3.68) zugrunde, so lauten diese Entwicklungen der Renormierungsgruppenfaktoren Z_i ($i = \phi, \tau, u$) bis zur ersten Ordnung in der renormierten Kopplungskonstanten (siehe z.B. Gleichungen (3.42) in [31])

$$Z_\phi = 1 + O(u^2) \quad (3.71a)$$

$$Z_\tau = 1 + \frac{n+2}{3\epsilon}u + O(u^2) \quad (3.71b)$$

$$Z_u = 1 + \frac{n+8}{3\epsilon}u + O(u^2). \quad (3.71c)$$

Für den Renormierungsgruppenfaktor Z_b , der in die Reparametrisierung (3.68c) des Parameters \mathring{b} eingeht, folgt dabei im Rahmen der in \mathring{b} linearisierten Theorie, dass $Z_b = Z_\phi^{-1}$ ist, wenn sich der Wert des Parameters σ — wie auch in dieser Arbeit der Fall — auf das Intervall $2 < \sigma < 4$ beschränkt. Für diese Werte von σ treten keine \mathring{b} -abhängigen UV-Divergenzen auf, so dass in dieser Ordnung ein weiterer, von den Z_i mit $i = \phi, \tau, u$ unabhängiger Renormierungsgruppenfaktor nicht benötigt wird.

Neben den UV-Divergenzen, die durch die multiplikative Renormierung der Modellparameter mittels der Reparametrisierungen (3.68b–3.68d) beseitigt werden, treten bei der freien Energie F und der sich daraus ableitenden inneren Energie $\propto \frac{\partial F}{\partial \tau}$ sowie der spezifischen Wärmekapazität $\propto \frac{\partial^2 F}{\partial \tau^2}$ weitere UV-Divergenzen auf, die bereits im *Bulk*-Fall vorhanden sind, und hierdurch nicht erfasst werden. Diese Größen erfordern zusätzlich eine additive Renormierung (siehe z.B. § III in [30] und § III.B.12 in [31]). Dies kann umgesetzt werden, indem zur Definition der dimensionslosen renormierten freien Energiedichte $f_{\text{bk}}^{\text{ren}}(\tau, b, u; \mu)$ des *Bulk*-Systems gemäß

$$\mu^{-d} f_{\text{bk}}^{\text{ren}}(\tau, b, u; \mu) = f_{\text{bk}}(\mathring{\tau}, \mathring{b}, \mathring{u}) - \sum_{m=0}^2 \frac{(\mathring{\tau} - \mathring{\tau}_1)^m}{m!} \left. \frac{\partial^m f_{\text{bk}}}{\partial \mathring{\tau}^m} \right|_{\mathring{\tau}=\mathring{\tau}_1} \quad (3.72)$$

von der freien Energiedichte f_{bk} ihre Taylor-Entwicklung zweiter Ordnung um eine Referenztemperatur $\mathring{\tau}_1$ abgezogen wird. In Abhängigkeit davon, ob man den Bereich oberhalb oder unterhalb der kritischen Temperatur $\mathring{\tau}_{c,\infty} = 0$ betrachtet, ist diese positiv beziehungsweise negativ zu wählen, und kann daher unter Beschränkung auf die ungeordnete Phase auf den Wert $\mathring{\tau}_1 \equiv \mathring{\tau}|_{\tau=1} = \mu^2 Z_\tau$ gesetzt werden. Die renormierte freie Energiedichte $f_{\text{bk}}^{\text{ren}}(\tau, b, u; \mu)$ erfüllt daher die Normierungsbedingungen

$$f_{\text{bk}}^{\text{ren}}(1, b, u; \mu) = \left. \frac{\partial f_{\text{bk}}^{\text{ren}}}{\partial \tau} \right|_{\tau=1} = \left. \frac{\partial^2 f_{\text{bk}}^{\text{ren}}}{\partial \tau^2} \right|_{\tau=1} = 0. \quad (3.73)$$

Auf der Ebene des Hamiltonians lässt sich dies implementieren, indem — wie beispielsweise in § II.E in [40] diskutiert — zu $\mathcal{H}[\phi]$ in Gleichung (3.35) additive Gegenterme von der Form

$$\mathcal{A}_{\text{add}} = \int_{\mathfrak{X}_L} d^d \mathbf{x} C(\mathring{\tau}, \mathring{b}, \mathring{u}) \quad (3.74)$$

hinzugefügt werden. $C(\overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{b}, \overset{\circ}{u})$ entspricht dabei einem Polynom von zweiter Ordnung in $\overset{\circ}{\tau}$, das zudem von dem Parameter $\overset{\circ}{b}$ und der Kopplungskonstanten $\overset{\circ}{u}$, nicht jedoch von der Filmdicke L sowie den Ortskoordinaten \mathbf{x} , abhängt. Dieses ist durch die Normierungsbedingungen (3.73) festgelegt. Anders als in Referenz [30], in der die additiven Gegenterme durch Aufstellen von Normierungsbedingungen für die freie Energie f_L^{ren} des Systems mit endlicher Filmdicke L -abhängig gewählt worden sind, liefern die durch die Normierungsbedingungen (3.73) festgelegten additiven Gegenterme keinen zusätzlichen Beitrag zur Exzess-Freien-Energie. Die hieraus hervorgehenden Terme, die gleichermaßen in f_L und Lf_{bk} auftreten, sind jeweils proportional zur Filmdicke L und heben sich bei Differenzbildung gemäß Gleichung (1.21) auf. Die Exzess-Freie-Energie ist multiplikativ renormierbar, und ihre dimensionslose renormierte Entsprechung kann demnach als

$$f_{\text{ex}}^{\text{ren}}(\tau, b, u; \mu L) = \mu^{-(d-1)} f_{\text{ex}}(\overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{b}, \overset{\circ}{u}; L) \quad (3.75)$$

definiert werden. Die Forderung, dass $f_{\text{ex}}(\overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{b}, \overset{\circ}{u}; L)$ invariant unter einer Änderung der in den Reparametrisierungen (3.68) eingeführten Impulsskala μ ist, führt auf die Renormierungsgruppengleichung der Exzess-Freien-Energie. Diese ist homogen und lautet unter Verwendung der in [31] eingeführten Notationen

$$\left[\mu \frac{\partial}{\partial \mu} + \beta_u \frac{\partial}{\partial u} - (2 + \eta_\tau) \tau \frac{\partial}{\partial \tau} + (\sigma - 2 + \eta_\phi) b \frac{\partial}{\partial b} + d - 1 \right] f_{\text{ex}}^{\text{ren}}(\tau, b, u; \mu L) = 0, \quad (3.76)$$

mit der Wilsonschen Beta-Funktion $\beta_u(u) = \mu \frac{\partial}{\partial \mu} \Big|_0 u$ und den Renormierungsgruppenfunktionen $\eta_i(u) = \mu \frac{\partial}{\partial \mu} \Big|_0 \log(Z_i)$ ($i = \tau, \phi$). Die Schreibweise $\mu \frac{\partial}{\partial \mu} \Big|_0$ bedeutet dabei, dass die μ -Ableitung bei konstant gehaltenen Werten der nackten Parameter $\overset{\circ}{\tau}$, $\overset{\circ}{b}$ und $\overset{\circ}{u}$ auszuwerten ist. Sowohl die Beta-Funktion β_u als auch die Renormierungsgruppenfunktionen η_i sind dabei durch die Eigenschaften des *Bulk*-Systems festgelegt. Im Rahmen von dimensioneller Regularisierung in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen und minimaler Subtraktion erhaltene Ausdrücke für diese Funktionen finden sich in den Gleichungen (3.75) in Referenz [31].

Die Lösung der Renormierungsgruppengleichung (3.76), die die Informationen über das asymptotisch kritische Verhalten der Exzess-Freien-Energie enthält, kann mit Hilfe der Methode der Charakteristiken hergeleitet werden (siehe z.B. § II.C.2 in [31]). Dazu wird die Impulsskala μ in Gleichung (3.76) durch $\mu\ell$, und die renormierten Parameter τ , b und u durch sogenannte fließende Parameter $\bar{\tau}(\ell)$, $\bar{b}(\ell)$ und $\bar{u}(\ell)$ mit einem Skalenfaktor ℓ ersetzt. Fordert man nun, dass die Terme in der Renormierungsgruppengleichung (3.76) in denen Ableitungsoperatoren auftreten, zu der totalen Ableitung $\ell \frac{d}{d\ell} f_{\text{ex}}^{\text{ren}}(\bar{\tau}(\ell), \bar{b}(\ell), \bar{u}(\ell); \mu L\ell)$ zusammengefasst werden können, so geht diese über in eine gewöhnliche lineare Differentialgleichung erster Ordnung gegeben durch

$$\left[\ell \frac{d}{d\ell} + d - 1 \right] f_{\text{ex}}^{\text{ren}}(\bar{\tau}(\ell), \bar{b}(\ell), \bar{u}(\ell); \mu L\ell) = 0. \quad (3.77)$$

Die fließenden Parameter sind dabei als Lösungen der sogenannten charakteristischen Gleichungen zu ermitteln, bei denen es sich um ein System ebenfalls gewöhnlicher linearer Differentialgleichungen erster Ordnung handelt. Die entsprechende Gleichung für die fließende Kopplungskonstante lautet beispielsweise

$$\ell \frac{d\bar{u}(\ell)}{d\ell} = \beta_u(\bar{u}(\ell)) \quad (3.78)$$

mit der Anfangsbedingung $\bar{u}(\ell = 1) = u$. Um diese zu lösen und das Verhalten der fließenden Kopplungskonstanten im Infrarotlimites $\ell \rightarrow 0$ zu untersuchen, wird die charakteristische Gleichung (3.78) zunächst in die Integralgleichung

$$\log(\ell) = \int_u^{\bar{u}(\ell)} \frac{dx}{\beta_u(x)} \quad (3.79)$$

überführt. Die Beta-Funktion $\beta_u(x)$ weist dabei in $d < 4$ Dimensionen eine nicht-triviale Nullstelle auf, die bis zur ersten Ordnung in ϵ durch

$$u^* = \frac{3\epsilon}{n+8} + O(\epsilon^2) \quad (3.80)$$

gegeben ist. Durch Auswertung des Integrals auf der rechten Seite von Gleichung (3.79) und Entwicklung um u^* folgt schließlich für das asymptotische Verhalten der fließenden Kopplungskonstanten im Infrarotlimites $\ell \rightarrow 0$, dass

$$\bar{u}(\ell) \underset{\ell \rightarrow 0}{=} u^* + (u - u^*)\ell^\omega + O(\ell^{2\omega}) \quad (3.81)$$

mit dem Wegner-Exponenten ω , dessen Wert in führender Ordnung der Epsilon-Entwicklung

$$\omega = \epsilon + O(\epsilon^2) \quad (3.82)$$

beträgt. Die fließende Kopplungskonstante konvergiert daher im Infrarotlimites $\ell \rightarrow 0$ gegen den Wert u^* , der — wie in § II.C.2 in [31] diskutiert — einem infrarot-stabilen Fixpunkt entspricht. Auf entsprechende Weise ist mit den charakteristischen Gleichungen der fließenden Parameter $\bar{\tau}(\ell)$ und $\bar{b}(\ell)$ zu verfahren.

Integriert man nun auch Gleichung (3.77) entlang der Charakteristik, so führt dies auf eine Skalenrelation

$$f_{\text{ex}}^{\text{ren}}(\tau, b, u; \mu L) = \ell^{d-1} f_{\text{ex}}^{\text{ren}}(\bar{\tau}(\ell), \bar{b}(\ell), \bar{u}(\ell); \mu L \ell), \quad (3.83)$$

die einen Zusammenhang zwischen der renormierten Exzess-Freien-Energie als Funktion der renormierten Parameter τ , b und u einerseits, und als Funktion der von dem Skalenfaktor ℓ abhängigen fließenden Parameter $\bar{\tau}(\ell)$, $\bar{b}(\ell)$ und $\bar{u}(\ell)$ andererseits, herstellt. Ersetzt man die fließenden Parameter auf der rechten Seite dieser Relation durch ihr asymptotisches Verhalten im Infrarotlimites $\ell \rightarrow 0$, so folgt daraus mit $\mu = 1$ und Ersetzung des Skalenfaktors ℓ durch die inverse Bulk-Korrelationslänge $1/\xi_\infty^{\text{sr}}$ im rein kurzreichweitigen Fall ($b = 0$), dass die als Funktion der

renormierten Parameter τ , b und u zu berechnende renormierte Exzess-Freie-Energie auf hinreichend großen Längenskalen L eine *Finite-Size*-Skalenform

$$f_{\text{ex}}^{\text{ren}}(\tau, b, u; L) \approx L^{-(d-1)} \Upsilon(L/\xi_{\infty}^{\text{sr}}, g_{\sigma} \xi_{\infty}^{\text{sr}-\omega_{\sigma}}, g_{\omega} \xi_{\infty,0}^{\text{sr}-\omega}) \quad (3.84)$$

erfüllt, mit dem Exponenten $\omega_{\sigma} = \sigma - 2 + \eta$, dem Wegner-Exponenten ω und den Skalenfeldern

$$g_{\sigma} = a_{\sigma} b, \quad g_{\omega} = a_{\omega} (u - u^*) \quad (3.85)$$

mit den nicht-universellen metrischen Faktoren a_{σ} und a_{ω} . Bis auf diese Faktoren und die nicht-universelle Amplitude der *Bulk*-Korrelationslänge ξ_{∞}^{sr} , ist die Skalenfunktion Υ universell. Führt man in deren Argumenten nun die Skalenvariablen (1.24b) ein, so kann die *Finite-Size*-Skalenform der Exzess-Freien-Energie geschrieben werden als

$$f_{\text{ex}}^{\text{ren}}(\tau, b, u; L) \approx L^{-(d-1)} \tilde{\Upsilon}(L/\xi_{\infty}^{\text{sr}}, \check{g}_{\sigma}, \check{g}_{\omega}) \quad (3.86)$$

mit einer — ebenfalls universellen — Skalenfunktion $\tilde{\Upsilon}$. Als *Finite-Size*-Skalenvariable ist dabei bislang das Verhältnis von der Filmdicke L zur *Bulk*-Korrelationslänge ξ_{∞}^{sr} im entsprechenden System mit rein kurzreichweitigen Wechselwirkungen gewählt worden. Die *Finite-Size*-Skalenform der Exzess-Freien-Energie soll nun jedoch auf die *Finite-Size*-Skalenvariable L/ξ_{∞} umgeschrieben werden, wobei ξ_{∞} die *Bulk*-Korrelationslänge in Anwesenheit der langreichweitigen Wechselwirkung bezeichnet, d.h. es gilt $\xi_{\infty}^{\text{sr}} = \xi_{\infty}|_{g_{\sigma}=0}$. Um die dazu benötigte Relation zwischen ξ_{∞} und ξ_{∞}^{sr} zu erhalten, kann für ξ_{∞} eine Renormierungsgruppengleichung aufgestellt, und diese in der anhand der Exzess-Freien-Energie beschriebenen Weise gelöst werden. Dies führt letztendlich auf eine Skalenrelation von der Form

$$\xi_{\infty} \approx \xi_{\infty}^{\text{sr}} \mathcal{X}(g_{\sigma} \xi_{\infty}^{\text{sr}-\omega_{\sigma}}, g_{\omega} \xi_{\infty}^{\text{sr}-\omega}), \quad (3.87)$$

mit einer Skalenfunktion \mathcal{X} . Bildet man den Kehrwert auf beiden Seiten dieser Relation und multipliziert mit der Filmdicke L , so kann diese nach Einführen der in den Gleichungen (1.24b) definierten Skalenvariablen geschrieben werden als

$$L/\xi_{\infty} \approx \tilde{\mathcal{X}}(L/\xi_{\infty}^{\text{sr}}, \check{g}_{\sigma}, \check{g}_{\omega}) \quad (3.88)$$

mit einer weiteren Skalenfunktion $\tilde{\mathcal{X}}$. Dieser Zusammenhang kann nun formal nach $L/\xi_{\infty}^{\text{sr}}$ aufgelöst, und diese Skalenvariable in der *Finite-Size*-Skalenform der Exzess-Freien-Energie durch eine Funktion von L/ξ_{∞} und den Skalenvariablen \check{g}_{σ} und \check{g}_{ω} ersetzt werden. Für die Exzess-Freie-Energie folgt daraus schließlich, dass

$$f_{\text{ex}}^{\text{ren}}(\tau, b, u; L) \approx L^{-(d-1)} \bar{\Upsilon}(L/\xi_{\infty}, \check{g}_{\sigma}, \check{g}_{\omega}) \quad (3.89)$$

mit einer Skalenfunktion \bar{Y} , die im Folgenden — wie auch im vorangegangenen Kapitel im Rahmen des *Mean-Sphärischen-Modells* — in bezüglich der Skalenvariablen \check{g}_σ und \check{g}_ω linearisierter Form

$$\bar{Y}(L/\xi_\infty, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) = \bar{Y}_0(L/\xi_\infty) + \check{g}_\sigma \bar{Y}_\sigma(L/\xi_\infty) + \check{g}_\omega \bar{Y}_\omega(L/\xi_\infty) + o(\check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) \quad (3.90)$$

hergeleitet wird; entsprechendes gilt für die Casimir-Kraft, die sich gemäß Gleichung (1.22) aus der Exzess-Freien-Energie durch Ableiten nach der Filmdicke L ergibt. Bevor jedoch diese Größen betrachtet werden, wird im folgenden Abschnitt zunächst eine im weiteren Verlauf benötigte Relation zwischen der Korrelationslänge ξ_∞ und ihrer Entsprechung ξ_L im System mit endlicher Filmdicke hergeleitet.

3.3.2 *Bulk-Korrelationslänge und Korrelationslänge im System mit endlicher Filmdicke*

Stellt man für die Korrelationslänge ξ_L eine Renormierungsgruppengleichung auf und löst diese in der im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen Weise, so folgt daraus, dass das asymptotische Skalenverhalten von ξ_L durch eine *Finite-Size*-Skalenrelation von der Form

$$\xi_L \approx \xi_\infty \bar{\mathcal{R}}(L/\xi_\infty, g_\sigma \xi_\infty^{-\omega_\sigma}, g_\omega \xi_\infty^{-\omega_\omega}) \quad (3.91)$$

zu beschreiben ist. Quadriert man diese Gleichung, bildet den Kehrwert und multipliziert anschließend beide Seiten mit L^2 , so folgt daraus schließlich nach Einführen der in den Gleichungen (1.24b) definierten Skalenvariablen sowie $\check{r}_L \equiv r_L L^2$ und $\check{r}_\infty \equiv r_\infty L^2$, dass

$$\check{r}_L \approx \mathcal{R}(\check{r}_\infty, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) \quad (3.92a)$$

mit einer Skalenfunktion \mathcal{R} , die im Folgenden in bezüglich \check{g}_σ und \check{g}_ω linearisierter Form

$$\mathcal{R}(\check{r}_\infty, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) = \mathcal{R}_0(\check{r}_\infty) + \check{g}_\sigma \mathcal{R}_\sigma(\check{r}_\infty) + \check{g}_\omega \mathcal{R}_\omega(\check{r}_\infty) + o(\check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) \quad (3.92b)$$

bis zur ersten Ordnung in ϵ hergeleitet wird. Dazu wird zunächst unter Verwendung von Gleichung (3.67b) die nackte Temperatur $\hat{\tau}$ auf der rechten Seite von Gleichung (3.63) durch \hat{r}_∞ ausgedrückt und der erhaltene Ausdruck um $\hat{u} = 0$ bis zur ersten Ordnung entwickelt. Mit den Reparametrisierungen (3.68c) und (3.68d), und dem in diesem Kapitel als

$$g_\sigma \equiv b\mu^{2-\sigma} \quad (3.93)$$

definierten Skalenfeld des langreichweitigen Anteils des Paarpotentials führt dies auf

$$r_L = r_\infty + u \frac{(4\pi)^{d/2}}{\mu^{d-4}} \frac{n+2}{6} \left[\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|r_\infty, g_\sigma) - \mathcal{G}_\infty^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|r_\infty, g_\sigma) \right] + o(u), \quad (3.94)$$

bis zur ersten Ordnung in der Kopplungskonstanten, mit dem freien Propagator $\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\dot{\tau}, \dot{b})$, der sich aus den Gleichungen (A.38–A.43) in Anhang A.3 bis zur ersten Ordnung in \dot{b} zu

$$\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\dot{\tau}, \dot{b}) = -A_d \dot{\tau}^{(d-2)/2} + \frac{2Q_{d,2}(\dot{\tau}L^2)}{\dot{\tau}L^d} - \dot{b} \left[B_{d,\sigma} \dot{\tau}^{(d+\sigma-4)/2} - 2L^{-(d+\sigma-4)} Q'_{d,\sigma}(\dot{\tau}L^2) \right] + O(\dot{b}^2) \quad (3.95)$$

ergibt. Ersetzt man $\mathcal{G}_L^{(d)}$ und den freien *Bulk*-Propagator

$$\mathcal{G}_\infty^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\dot{\tau}, \dot{b}) = -A_d \dot{\tau}^{(d-2)/2} - \dot{b} B_{d,\sigma} \dot{\tau}^{(d+\sigma-4)/2} + O(\dot{b}^2) \quad (3.96)$$

in Gleichung (3.94) durch diese Ausdrücke, so folgt daraus nach Umschreiben auf die Skalenvariablen $\check{r}_L, \check{r}_\infty$ und \check{g}_σ ,

$$\check{r}_L = \check{r}_\infty + u \frac{(4\pi)^{d/2}}{(\mu L)^{d-4}} \frac{n+2}{6} \left[\frac{2Q_{d,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} + 2\check{g}_\sigma Q'_{d,\sigma}(\check{r}_\infty) + O(\check{g}_\sigma^2) \right] + o(u). \quad (3.97)$$

Die renormierte Kopplungskonstante u wird nun durch $u^*(1 + \check{g}_\omega)$ mit ihrem in Gleichung (3.80) angegebenen Fixpunktwert u^* , $\check{g}_\omega \equiv g_\omega L^{-\omega}$ und dem in diesem Kapitel gemäß

$$\bar{u}(\ell) \underset{\ell \rightarrow 0}{=} u^*(1 + g_\omega \ell^\omega) + O(\ell^{2\omega}) \quad (3.98)$$

über die Abweichung der fließenden Kopplungskonstanten von ihrem Fixpunktwert definierten Skalenfeld g_ω der Wegner-Korrekturen ersetzt⁶, und die Skalenfunktionen \mathcal{R}_i ($i = 0, \sigma, \omega$) durch Koeffizientenvergleich mit den Gleichungen (3.92) ermittelt. Dies ergibt

$$\mathcal{R}_0(\check{r}_\infty) = \check{r}_\infty + u^* \frac{(4\pi)^{d/2}}{(\mu L)^{d-4}} \frac{n+2}{3} \frac{Q_{d,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} + o(u^*) \quad (3.99a)$$

für die Skalenfunktion $\mathcal{R}_0(\check{r}_\infty)$, und

$$\mathcal{R}_\sigma(\check{r}_\infty) = u^* \frac{(4\pi)^{d/2}}{(\mu L)^{d-4}} \frac{n+2}{3} Q'_{d,\sigma}(\check{r}_\infty) + o(u^*) \quad (3.99b)$$

beziehungsweise

$$\mathcal{R}_\omega(\check{r}_\infty) = u^* \frac{(4\pi)^{d/2}}{(\mu L)^{d-4}} \frac{n+2}{3} \frac{Q_{d,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} + o(u^*) \quad (3.99c)$$

für die Skalenfunktionen $\mathcal{R}_\sigma(\check{r}_\infty)$ und $\mathcal{R}_\omega(\check{r}_\infty)$. Um deren Epsilon-Entwicklungen zu erhalten, muss nun lediglich u^* aus Gleichung (3.80) eingesetzt und um $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen entwickelt werden. Dies führt schließlich auf

$$\mathcal{R}_0(\check{r}_\infty) = \check{r}_\infty + \epsilon \frac{n+2}{n+8} \frac{16\pi^2 Q_{4,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} + o(\epsilon), \quad (3.100a)$$

⁶Die Ersetzungsvorschrift für die renormierte Kopplungskonstante resultiert, wenn man den Skalenfaktor ℓ in Gleichung (3.98) durch L^{-1} ersetzt. Anders als bei der von Gleichung (3.83) ausgehenden Herleitung der *Finite-Size*-Skalenform der renormierten Exzess-Freien-Energie im vorangegangenen Abschnitt, bei der $\ell = 1/\xi_\infty^{\text{st}}$ gesetzt wurde, entspricht die hier und im Folgenden zu expliziten Berechnung der verschiedenen Skalenfunktionen gewählte Vorgehensweise der Festlegung $\ell = L^{-1}$.

$$\mathcal{R}_\sigma(\check{r}_\infty) = \epsilon \frac{n+2}{n+8} 16\pi^2 Q'_{4,\sigma}(\check{r}_\infty) + o(\epsilon), \quad (3.100b)$$

und

$$\mathcal{R}_\omega(\check{r}_\infty) = \epsilon \frac{n+2}{n+8} \frac{16\pi^2 Q_{4,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} + o(\epsilon) \quad (3.100c)$$

bis zur ersten Ordnung in ϵ .

Die Skalenfunktionen \mathcal{R}_i ($i = 0, \sigma, \omega$) sollen nun für den Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen in drei Dimensionen ($d = \sigma = 3$) durch Extrapolation gegen $\epsilon = 1$ berechnet⁷ und grafisch dargestellt werden. Für die hierzu benötigte Funktion $Q_{4,2}(y)$ und die in Form ihrer Ableitung nach y in die Skalenfunktion $\mathcal{R}_\sigma(\check{r}_\infty)$ eingehende Funktion $Q_{4,3}(y)$ werden in den Anhängen A.4.2 und A.4.3 Summen- beziehungsweise Integraldarstellungen hergeleitet. Aus Gleichung (A.62) folgt dabei mit $d = 4$, dass

$$Q_{4,2}(y) = \frac{y^{3/2}}{4\pi^2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{K_1(m\sqrt{y})}{m} \quad (3.101)$$

mit der modifizierten Bessel-Funktion zweiter Art $K_n(x)$, und Ableiten von Gleichung (A.75) nach y ergibt

$$Q'_{4,3}(y) = \frac{\zeta(3)}{4\pi^2} - \frac{y}{8\pi^2} [3 - 2 \log(4y)] - \frac{5y^{3/2}}{64\pi} + \frac{5y}{32\pi^2} \int_0^1 \frac{dt \sqrt{1-t}}{t} \left[\sqrt{ty} \coth\left(\frac{\sqrt{ty}}{2}\right) - \frac{ty}{10} \operatorname{csch}^2\left(\frac{\sqrt{ty}}{2}\right) - \frac{8}{5} \right]. \quad (3.102)$$

Die durch Einsetzen dieser Ausdrücke in die Gleichungen (3.100) mit $\epsilon = 1$ und $\sigma = 3$ erhaltenen Skalenfunktionen \mathcal{R}_i ($i = 0, \sigma, \omega$) sind in den Abbildungen 19–21 für den Fall eines ein-, zwei- und dreikomponentigen Ordnungsparameters $n = 1, 2, 3$ und den Limes $n \rightarrow \infty$ dargestellt. Für das führende asymptotische Verhalten der Skalenfunktion $\mathcal{R}_0(\check{r}_\infty)$ gilt dabei wiederum

$$\mathcal{R}_0(\check{r}_\infty) \underset{\check{r}_\infty \rightarrow \infty}{\approx} \check{r}_\infty, \quad (3.103)$$

da r_L im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ in die inverse quadrierte *Bulk*-Korrelationslänge r_∞ übergeht. Die Skalenfunktionen $\mathcal{R}_\sigma(\check{r}_\infty)$ und $\mathcal{R}_\omega(\check{r}_\infty)$ verschwinden in diesem Grenzfall.

3.3.3 Freie Energie des Systems mit endlicher Filmdicke und im thermodynamischen Limes

Die freie Energie pro Flächeneinheit des Systems mit endlicher Filmdicke setzt sich gemäß (siehe auch Gleichung (3.41))

$$f_L = f_{\psi,L} + f_{\varphi,L} \quad (3.104)$$

⁷Dabei wird, obwohl Epsilon als kleiner Parameter $0 \leq \epsilon \ll 1$ anzunehmen ist, in den Epsilon-Entwicklungen (3.100) der Skalenfunktionen \mathcal{R}_i ($i = 0, \sigma, \omega$) $\epsilon = 1$ gesetzt.

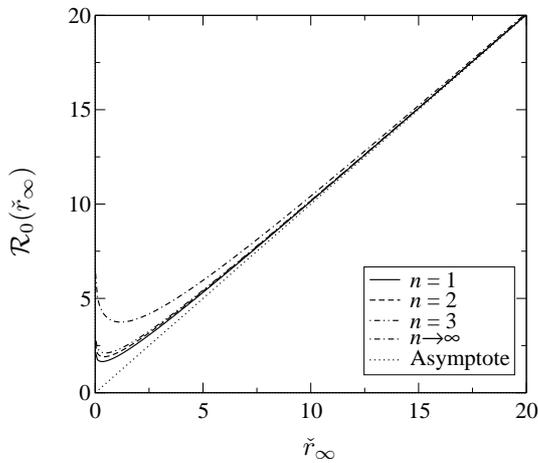


Abbildung 19: Auftragung der Skalenfunktion $\mathcal{R}_0(\tilde{r}_\infty)$ des $O(n)$ -symmetrischen Modells mit $n = 1, 2, 3$ und im Limes $n \rightarrow \infty$ über der Skalenvariablen \tilde{r}_∞ im dreidimensionalen Fall ($\epsilon = 1$). Ihre in Gleichung (3.103) angegebene Asymptote ist als gepunktete Linie dargestellt.

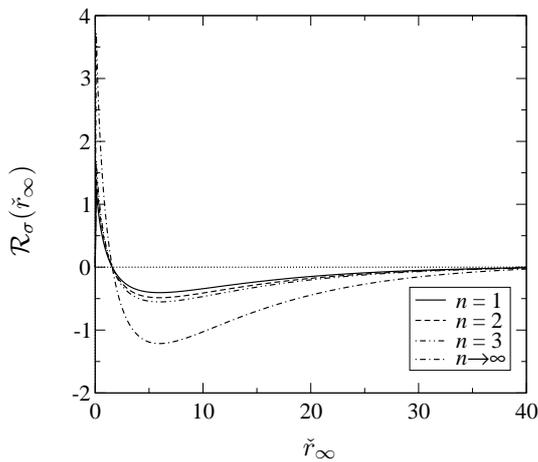


Abbildung 20: Auftragung der Skalenfunktion $\mathcal{R}_\sigma(\tilde{r}_\infty)$ des $O(n)$ -symmetrischen Modells mit $n = 1, 2, 3$ und im Limes $n \rightarrow \infty$ über der Skalenvariablen \tilde{r}_∞ im Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen in drei Dimensionen ($\epsilon = 1, \sigma = 3$).

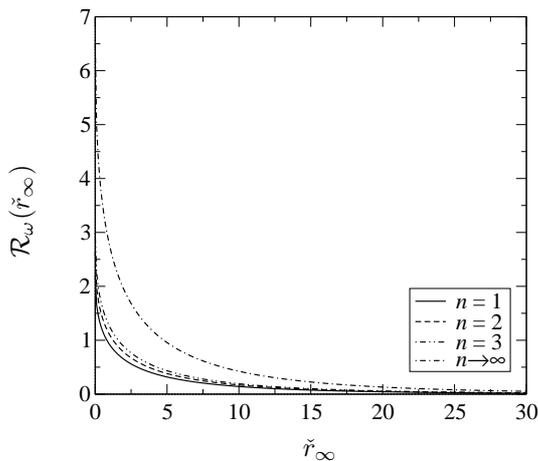


Abbildung 21: Auftragung der Skalenfunktion $\mathcal{R}_\omega(\tilde{r}_\infty)$ des $O(n)$ -symmetrischen Modells mit $n = 1, 2, 3$ und im Limes $n \rightarrow \infty$ über der Skalenvariablen \tilde{r}_∞ in drei Dimensionen ($\epsilon = 1$).

aus den in Abschnitt 3.2.3 in Zweischleifenordnung hergeleiteten Anteilen $f_{\psi,L}$ und $f_{\varphi,L}$ von den ($q_1 \neq 0$)-Moden beziehungsweise der ($q_1 = 0$)-Mode zusammen. Die in den Gleichungen (3.46) und (3.55) angegebenen Zweischleifenbeiträge dieser beiden Anteile sind dabei mit Hilfe des freien ψ -Propagators (3.47) und des freien *Bulk*-Propagators (3.56) dargestellt worden, und es sollen nun auch die Einschleifenbeiträge $f_{\psi,L}^{[1]}$ und $f_{\varphi,L}^{[1]}$, Gleichungen (3.45) und (3.54), durch diese Propagatoren ausgedrückt werden. Vollkommen analog zu dem in Gleichung (2.24) aufgeführten Zusammenhang zwischen den Modensummen $W_{d,\Omega}(r|L)$ und $U_{d,\Omega}(r|L)$, kann der Einschleifenbeitrag $f_{\psi,L}^{[1]}$ in

$$f_{\psi,L}^{[1]} = \frac{n}{2} \sum'_{m_1=-\infty}^{\infty} \int_{\mathbf{q}_{\parallel}}^{(d-1)} \log\left(\frac{q^2 - \mathring{b}q^\sigma}{2\pi}\right) + \frac{Ln}{2} \int_0^{\hat{\tau}} d\iota \mathcal{G}_{\psi,L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\iota, \mathring{b}), \quad (3.105a)$$

$$= f_{\psi,L}^{(0)} + Ln \sum_{m=1}^{\infty} \int_{\mathbf{q}}^{(d)} \log\left(\frac{q^2 - \mathring{b}q^\sigma}{2\pi}\right) \cos(q_1 mL) + \frac{Ln}{2} \int_0^{\hat{\tau}} d\iota \mathcal{G}_{\psi,L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\iota, \mathring{b}) \quad (3.105b)$$

mit der $\hat{\tau}$ -unabhängigen Konstanten

$$f_{\psi,L}^{(0)} = \frac{n}{2} \left[L \int_{\mathbf{q}}^{(d)} - \int_{\mathbf{q}}^{(d-1)} \right] \log\left(\frac{q^2 - \mathring{b}q^\sigma}{2\pi}\right) \quad (3.106)$$

umgeformt werden. Die zweite Zeile der Gleichungen (3.105) folgt dabei aus der ersten durch Addition und Subtraktion des in der m_1 -Summe nicht auftretenden ($m_1 = 0$)-Terms, und anschließendes Umschreiben der m_1 -Summation mit Hilfe der Poissonschen Summationsformel (A.6). Auf entsprechende Weise ergibt sich der Einschleifenbeitrag von $f_{\varphi,L}^{[1]}$ zu

$$f_{\varphi,L}^{[1]} = f_{\varphi}^{(0)} + \frac{n}{2} \int_0^{\hat{\tau}L} d\iota \mathcal{G}_{\infty}^{(d-1)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\iota, \mathring{b}), \quad (3.107)$$

mit

$$f_{\varphi}^{(0)} = \frac{n}{2} \int_{\mathbf{q}}^{(d-1)} \log\left(\frac{q^2 - \mathring{b}q^\sigma}{2\pi}\right). \quad (3.108)$$

Die Konstanten $f_{\psi,L}^{(0)}$ und $f_{\varphi}^{(0)}$ umfassen dabei UV-divergente Beiträge, die durch die in Abschnitt 3.3.1 diskutierte additive Renormierung der freien Energie beseitigt werden und unter Verwendung von dimensioneller Regularisierung ohnehin verschwinden. Sie sind daher für die renormierte freie und Exzess-Freie-Energie ohne Bedeutung.

Die Einschleifenbeiträge (3.105b) und (3.107) sollen nun mit Hilfe der in Anhang A.3 erhaltenen Ausdrücke für die freien Propagatoren $\mathcal{G}_{\infty}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\hat{\tau}, \mathring{b})$ und $\mathcal{G}_{\psi,L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\hat{\tau}, \mathring{b})$ weiter ausgewertet werden. Zunächst wird jedoch der zweite Term auf der rechten Seite von Gleichung (3.105b) betrachtet. Entwickelt man diesen um $\mathring{b} = 0$ bis zur ersten Ordnung, kann die \mathbf{q} -Integration und auch die m -Summation analytisch ausgeführt werden (siehe Gleichungen (A.33) und (A.34) in Anhang A.2 und Anhang C in [39]). Nach Division durch die Komponentenzahl n erhält man

schließlich

$$L \sum_{m=1}^{\infty} \int_{\mathbf{q}}^{(d)} \log\left(\frac{q^2 - \mathring{b}q^\sigma}{2\pi}\right) \cos(q_1 mL) = L^{-(d-1)} \Delta_{\mathbb{C}}^{\text{GM}}(d) + \mathring{b}L^{-(d+\sigma-3)} \Delta_{\sigma, \mathbb{C}}^{\text{GM}}(d, \sigma) + O(\mathring{b}^2), \quad (3.109)$$

mit den in den Gleichungen (2.76a) und (2.76b) eingeführten Amplituden des Gaußschen Modells. Es bleiben nun die jeweils letzten Terme auf den rechten Seiten der Gleichungen (3.105b) und (3.107) auszuwerten. Setzt man in ersteren den freien ψ -Propagator gemäß den Gleichungen (A.40b–A.43) ein, kann die ι -Integration unter Verwendung der Eigenschaft (A.31) der Funktion $Q_{d,2}(y)$ analytisch ausgeführt werden. Dies ergibt

$$\begin{aligned} \frac{L}{2} \int_0^{\mathring{\tau}} d\iota \mathcal{G}_{\psi, L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\iota, \mathring{b}) &= \frac{A_{d-1}}{d-1} \frac{\mathring{\tau}^{(d-1)/2}}{\mathring{\tau}^{d/2}} - \frac{LA_d}{d} \frac{\mathring{\tau}^{d/2}}{\mathring{\tau}^{d/2}} - L^{-(d-1)} \left(1 - \lim_{\mathring{\tau} \rightarrow 0}\right) \frac{4\pi Q_{d+2,2}(\mathring{\tau}L^2)}{\mathring{\tau}L^2} \\ &+ \mathring{b} \left[\frac{B_{d-1, \sigma}}{d+\sigma-3} \frac{\mathring{\tau}^{(d+\sigma-3)/2}}{\mathring{\tau}^{(d+\sigma-2)/2}} - \frac{LB_{d, \sigma}}{d+\sigma-2} \frac{\mathring{\tau}^{(d+\sigma-2)/2}}{\mathring{\tau}^{(d+\sigma-2)/2}} \right. \\ &\left. + L^{-(d+\sigma-3)} \left(1 - \lim_{\mathring{\tau} \rightarrow 0}\right) Q_{d, \sigma}(\mathring{\tau}L^2) \right] + O(\mathring{b}^2), \quad (3.110a) \end{aligned}$$

und mit dem freien *Bulk*-Propagator $\mathcal{G}_{\infty}^{(d-1)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\iota, \mathring{b})$, der sich aus Gleichung (3.96) mit der Substitution $d \mapsto d-1$ ergibt, folgt

$$\frac{1}{2} \int_0^{\mathring{\tau}L} d\iota \mathcal{G}_{\infty}^{(d-1)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\iota, \mathring{b}) = -\frac{A_{d-1}}{d-1} \frac{\mathring{\tau}^{(d-1)/2}}{\mathring{\tau}L} - \mathring{b} \frac{B_{d-1, \sigma}}{d+\sigma-3} \frac{\mathring{\tau}^{(d+\sigma-3)/2}}{\mathring{\tau}L} + O(\mathring{b}^2). \quad (3.110b)$$

Ersetzt man nun das in dem Ausdruck (3.105b) für den Einschleifenbeitrag $f_{\psi, L}^{[1]}$ auftretende Integral durch die rechte Seite von Gleichung (3.110a), so ergibt sich dieser im Fall $2 < d < 4$ und $2 < \sigma < 4$ unter Verwendung des Grenzwertes (2.73) und $\lim_{x \rightarrow 0} Q_{d, \sigma}(x) = 0$ schließlich zu

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} (f_{\psi, L}^{[1]} - f_{\psi, L}^{(0)}) &= \frac{A_{d-1}}{d-1} \frac{\mathring{\tau}^{(d-1)/2}}{\mathring{\tau}^{d/2}} - \frac{LA_d}{d} \frac{\mathring{\tau}^{d/2}}{\mathring{\tau}^{d/2}} - \frac{4\pi Q_{d+2,2}(\mathring{\tau}L^2)}{\mathring{\tau}L^{d+1}} + \mathring{b} \left\{ \frac{B_{d-1, \sigma}}{d+\sigma-3} \frac{\mathring{\tau}^{(d+\sigma-3)/2}}{\mathring{\tau}^{(d+\sigma-2)/2}} \right. \\ &\left. - \frac{LB_{d, \sigma}}{d+\sigma-2} \frac{\mathring{\tau}^{(d+\sigma-2)/2}}{\mathring{\tau}^{(d+\sigma-2)/2}} + L^{-(d+\sigma-3)} \left[\Delta_{\sigma, \mathbb{C}}^{\text{GM}}(d, \sigma) + Q_{d, \sigma}(\mathring{\tau}L^2) \right] \right\} \\ &+ O(\mathring{b}^2), \quad (3.111) \end{aligned}$$

bis zur ersten Ordnung in \mathring{b} . Für den Einschleifenbeitrag $f_{\varphi, L}^{[1]}$ folgt durch Einsetzen des Integrals (3.110b) in Gleichung (3.107) unmittelbar

$$\frac{1}{n} (f_{\varphi, L}^{[1]} - f_{\varphi}^{(0)}) = -\frac{A_{d-1}}{d-1} \frac{\mathring{\tau}^{(d-1)/2}}{\mathring{\tau}L} - \mathring{b} \frac{B_{d-1, \sigma}}{d+\sigma-3} \frac{\mathring{\tau}^{(d+\sigma-3)/2}}{\mathring{\tau}L} + O(\mathring{b}^2) \quad (3.112)$$

mit der verschobenen Temperatur $\mathring{\tau}_L \equiv \mathring{\tau} + \delta\mathring{\tau}_L$. Die in Gleichung (3.51) eingeführte Verschiebung $\delta\mathring{\tau}_L$ ist dabei proportional zum freien ψ -Propagator, und mit dem sich hierfür aus den Gleichungen (A.40b–A.43) ergebenden Ausdruck lautet diese bis zur ersten Ordnung in \mathring{b} und \mathring{u}

$$\begin{aligned} \delta\mathring{\tau}_L &= \mathring{u} \frac{n+2}{6} \left\{ \frac{1}{L} A_{d-1} \mathring{\tau}^{(d-3)/2} - A_d \mathring{\tau}^{(d-2)/2} + \frac{2Q_{d,2}(\mathring{\tau}L^2)}{\mathring{\tau}L^d} + \mathring{b} \left[\frac{1}{L} B_{d-1, \sigma} \mathring{\tau}^{(d+\sigma-5)/2} \right. \right. \\ &\left. \left. - B_{d, \sigma} \mathring{\tau}^{(d+\sigma-4)/2} + 2L^{-(d+\sigma-4)} Q'_{d, \sigma}(\mathring{\tau}L^2) \right] + O(\mathring{b}^2) \right\} + O(\mathring{u}^2). \quad (3.113) \end{aligned}$$

Nun sollen auch noch die Zweischleifenbeiträge $f_{\psi,L}^{[2]}$ und $f_{\varphi,L}^{[2]}$ explizit angegeben werden. Dazu werden die freien Propagatoren $\mathcal{G}_{\psi,L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\iota, \mathring{b})$ und $\mathcal{G}_{\infty}^{(d-1)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\iota, \mathring{b})$ in die Gleichungen (3.46) und (3.55) eingesetzt, und die dabei erhaltenen Ausdrücke im Parameter \mathring{b} linearisiert, da diese zunächst auch noch Terme von der Ordnung \mathring{b}^2 enthalten. Dies führt auf

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} f_{\psi,L}^{[2]} = & \mathring{u} L \frac{n+2}{4!} \left\{ \left[\frac{1}{L} A_{d-1} \mathring{\tau}^{(d-3)/2} - A_d \mathring{\tau}^{(d-2)/2} + \frac{2Q_{d,2}(\mathring{\tau}L^2)}{\mathring{\tau}L^d} \right]^2 + 2\mathring{b} \left[\frac{1}{L} A_{d-1} \mathring{\tau}^{(d-3)/2} \right. \right. \\ & - A_d \mathring{\tau}^{(d-2)/2} + \frac{2Q_{d,2}(\mathring{\tau}L^2)}{\mathring{\tau}L^d} \left. \left. \left[\frac{1}{L} B_{d-1,\sigma} \mathring{\tau}^{(d+\sigma-5)/2} - B_{d,\sigma} \mathring{\tau}^{(d+\sigma-4)/2} \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. + 2L^{-(d+\sigma-4)} Q'_{d,\sigma}(\mathring{\tau}L^2) \right] + O(\mathring{b}^2) \right\} \end{aligned} \quad (3.114)$$

und

$$\frac{1}{n} f_{\varphi,L}^{[2]} = \frac{\mathring{u}}{L} \frac{n+2}{4!} \left[A_{d-1}^2 \mathring{\tau}^{d-3} + 2\mathring{b} A_{d-1} B_{d-1,\sigma} \mathring{\tau}^{d+\sigma/2-4} + O(\mathring{b}^2) \right]. \quad (3.115)$$

Addiert man nun die Ein- und Zweischleifenbeiträge der Freien-Energie-Anteile $f_{\psi,L}$ und $f_{\varphi,L}$ auf, so ergibt sich daraus — den Gleichungen (3.43, 3.53, 3.104) entsprechend — die freie Energie pro Flächeneinheit des Systems mit endlicher Filmdicke, die aus Platzgründen nicht explizit angegeben wird.

Neben f_L benötigt man zur Berechnung der Exzess-Freien-Energie gemäß Gleichung (1.21) auch die freie Energie pro Volumeneinheit des *Bulk*-Systems f_{bk} . Um diese zu erhalten, wird die freie Energie pro Flächeneinheit f_L durch L dividiert, und der thermodynamische Limes $L \rightarrow \infty$ vollzogen. Gemäß $\lim_{L \rightarrow \infty} f_{\varphi,L}/L = 0$ verschwindet der Anteil von der Nullmode in diesem Limes, und die in $f_{\psi,L}^{[1]}$ und $f_{\psi,L}^{[2]}$ auftretenden Q -Funktionen können wieder durch die führenden Terme ihrer asymptotischen Entwicklungen (2.79) ersetzt werden. Für die freie Energiedichte des *Bulk*-Systems im Fall $2 < d < 4$ und $2 < \sigma < 4$ folgt daraus schließlich

$$f_{\text{bk}} = f_{\text{bk}}^{[1]} + f_{\text{bk}}^{[2]} + O(3 \text{ Schleifen}) \quad (3.116a)$$

in Zweischleifenordnung, wobei

$$\frac{1}{n} (f_{\text{bk}}^{[1]} - f^{(0)}) = -\frac{A_d}{d} \mathring{\tau}^{d/2} - \mathring{b} \frac{B_{d,\sigma}}{d+\sigma-2} \mathring{\tau}^{(d+\sigma-2)/2} + O(\mathring{b}^2) \quad (3.116b)$$

mit der Konstanten $f^{(0)} \equiv L^{-1}(f_{\psi,L}^{(0)} + f_{\varphi}^{(0)})$, und

$$\frac{1}{n} f_{\text{bk}}^{[2]} = \mathring{u} \frac{n+2}{4!} \left[A_d^2 \mathring{\tau}^{d-2} + 2\mathring{b} A_d B_{d,\sigma} \mathring{\tau}^{d+\sigma/2-3} + O(\mathring{b}^2) \right]. \quad (3.116c)$$

Der in Abschnitt 2.5.1 diskutierten Vorgehensweise beim *Mean-Sphärischen-Modell* entsprechend, sollen f_L und f_{bk} nun durch die Korrelationslängen ξ_L beziehungsweise ξ_{∞} ausgedrückt werden. Dazu werden zunächst die Ein- und Zweischleifenbeiträge der Anteile $f_{\psi,L}$ und $f_{\varphi,L}$ gemäß den

Gleichungen (3.43, 3.53, 3.104) aufaddiert, und $\hat{\tau}$ unter Verwendung des in Gleichung (3.67a) angegebenen Zusammenhangs zwischen $\hat{\tau}$ und $\hat{r}_L \equiv \hat{\xi}_L^{-2}$ ersetzt. Dieser lautet

$$\begin{aligned} \hat{\tau} = \hat{r}_L + \hat{u} \frac{n+2}{6} & \left\{ A_d \hat{r}_L^{(d-2)/2} - \frac{2Q_{d,2}(\hat{r}_L L^2)}{\hat{r}_L L^d} + \hat{b} \left[B_{d,\sigma} \hat{r}_L^{(d+\sigma-4)/2} - 2L^{-(d+\sigma-4)} \right. \right. \\ & \left. \left. \times Q'_{d,\sigma}(\hat{r}_L L^2) \right] + O(\hat{b}^2) \right\} + O(\hat{u}^2) \end{aligned} \quad (3.117)$$

nach Einsetzen des in Anhang A.3 hergeleiteten Ausdrucks für den freien ψ -Propagator.

Entwickelt man nun um $\hat{u} = 0$ und $\hat{b} = 0$ jeweils bis zur ersten Ordnung, erhält man

$$\begin{aligned} & \frac{1}{n} (f_L - Lf^{(0)}) \\ &= -\frac{LA_d \hat{r}_L^{d/2}}{d} - \frac{4\pi Q_{d+2,2}(\hat{r}_L L^2)}{\hat{r}_L L^{d+1}} - \hat{u} L \frac{n+2}{4!} \left[A_d \hat{r}_L^{(d-2)/2} - \frac{2Q_{d,2}(\hat{r}_L L^2)}{\hat{r}_L L^d} \right]^2 \\ & - \hat{b} \left\{ \frac{LB_{d,\sigma}}{d+\sigma-2} \hat{r}_L^{(d+\sigma-2)/2} - L^{-(d+\sigma-3)} \left[\Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d,\sigma) + Q_{d,\sigma}(\hat{r}_L L^2) \right] + 2\hat{u} L \frac{n+2}{4!} \right. \\ & \left. \times \left[A_d \hat{r}_L^{(d-2)/2} - \frac{2Q_{d,2}(\hat{r}_L L^2)}{\hat{r}_L L^d} \right] \left[B_{d,\sigma} \hat{r}_L^{(d+\sigma-4)/2} - 2L^{-(d+\sigma-4)} Q'_{d,\sigma}(\hat{r}_L L^2) \right] \right\} + \dots, \end{aligned} \quad (3.118a)$$

wobei die Auslassungspunkte für Terme höherer Ordnung in \hat{u} und \hat{b} stehen. Mit Hilfe dieses Ausdrucks kann nun auch die freie Energiedichte des *Bulk*-Systems f_{bk} hergeleitet werden. Dazu wird Gleichung (3.118a) durch L dividiert, und die dort auftretenden Q -Funktionen durch die führenden Terme ihrer asymptotischen Entwicklungen (2.79) ersetzt. Vollzieht man nun den thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ und berücksichtigt, dass r_L in diesem Limes in die inverse quadrierte *Bulk*-Korrelationslänge r_∞ übergeht, so ergibt dies schließlich

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} (f_{\text{bk}} - f^{(0)}) &= -\frac{A_d}{d} r_\infty^{d/2} - \hat{u} \frac{n+2}{4!} A_d^2 r_\infty^{d-2} - \hat{b} \left[\frac{B_{d,\sigma}}{d+\sigma-2} r_\infty^{(d+\sigma-2)/2} + \hat{u} \frac{n+2}{4!} \right. \\ & \left. \times 2A_d B_{d,\sigma} r_\infty^{d+\sigma/2-3} \right] + \dots \end{aligned} \quad (3.118b)$$

3.3.4 Die Exzess-Freie-Energie

Die im vorangegangenen Abschnitt erhaltenen Ausdrücke für die freie Energie f_L des Systems mit endlicher Filmdicke und des *Bulk*-Systems f_{bk} werden nun in die Definitionsgleichung (1.21) der Exzess-Freien-Energie eingesetzt. Nach Durchführung der Reparametrisierungen (3.68c) und (3.68d), und Umschreiben auf die Skalvariablen \check{r}_L , \check{r}_∞ und \check{g}_σ ergibt sich daraus die skalierte

renormierte Exzess-Freie-Energie zu

$$\begin{aligned} \frac{L^{d-1}}{n} f_{\text{ex}}^{\text{ren}} = & -\frac{A_d}{d} \left(\tilde{r}_L^{d/2} - \tilde{r}_\infty^{d/2} \right) - \frac{4\pi Q_{d+2,2}(\tilde{r}_L)}{\tilde{r}_L} - u \frac{(4\pi)^{d/2}}{(\mu L)^{d-4}} \frac{n+2}{4!} \left\{ \left[A_d \tilde{r}_L^{(d-2)/2} \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{2Q_{d,2}(\tilde{r}_L)}{\tilde{r}_L} \right]^2 - A_d^2 \tilde{r}_\infty^{d-2} \right\} - \check{g}_\sigma \left\{ \frac{B_{d,\sigma}}{d+\sigma-2} \left(\tilde{r}_L^{(d+\sigma-2)/2} - \tilde{r}_\infty^{(d+\sigma-2)/2} \right) \right. \\ & \left. - \Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d,\sigma) - Q_{d,\sigma}(\tilde{r}_L) + 2u \frac{(4\pi)^{d/2}}{(\mu L)^{d-4}} \frac{n+2}{4!} \left\{ \left[A_d \tilde{r}_L^{(d-2)/2} - \frac{2Q_{d,2}(\tilde{r}_L)}{\tilde{r}_L} \right] \right. \right. \\ & \left. \left. \times \left[B_{d,\sigma} \tilde{r}_L^{(d+\sigma-4)/2} - 2Q'_{d,\sigma}(\tilde{r}_L) \right] - A_d B_{d,\sigma} \tilde{r}_\infty^{d+\sigma/2-3} \right\} \right\} + \dots \quad (3.119) \end{aligned}$$

Die renormierte Kopplungskonstante wird nun durch $u^*(1 + \check{g}_\omega)$ ersetzt, und, um die skalierte Exzess-Freie-Energie vollständig auf die Skalenvariable \tilde{r}_∞ umzuschreiben, \tilde{r}_L unter Verwendung der durch die Gleichungen (3.92) und (3.99) gegebenen Relation zwischen \tilde{r}_L und \tilde{r}_∞ ausgedrückt. Entwickelt man anschließend bis zur ersten Ordnung in den Skalenvariablen \check{g}_σ und \check{g}_ω , so führt dies auf eine *Finite-Size*-Skalenrelation für die renormierte Exzess-Freie-Energie von der Form

$$\frac{L^{d-1}}{n} f_{\text{ex}}^{\text{ren}} \approx \mathcal{Y}(\tilde{r}_\infty, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) \quad (3.120a)$$

mit einer gemäß

$$\mathcal{Y}(\tilde{r}_\infty, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) = \mathcal{Y}_0(\tilde{r}_\infty) + \check{g}_\sigma \mathcal{Y}_\sigma(\tilde{r}_\infty) + \check{g}_\omega \mathcal{Y}_\omega(\tilde{r}_\infty) + o(\check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) \quad (3.120b)$$

in den Skalenvariablen \check{g}_σ und \check{g}_ω linearisierten Skalenfunktion⁸. Die Skalenfunktion $\mathcal{Y}_0(\tilde{r}_\infty)$, die das führende asymptotische Verhalten im rein kurzreichweitigen Fall beschreibt, ergibt sich dabei zu

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_0(\tilde{r}_\infty) = & -\frac{A_d}{d} \left(\mathcal{R}_0^{d/2} - \tilde{r}_\infty^{d/2} \right) - \frac{4\pi Q_{d+2,2}(\mathcal{R}_0)}{\mathcal{R}_0} - u^* \frac{(4\pi)^{d/2}}{(\mu L)^{d-4}} \frac{n+2}{4!} \left\{ \left[A_d \mathcal{R}_0^{(d-2)/2} \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{2Q_{d,2}(\mathcal{R}_0)}{\mathcal{R}_0} \right]^2 - A_d^2 \tilde{r}_\infty^{d-2} \right\} + O(u^{*2}), \quad (3.121a) \end{aligned}$$

und für die mit den Korrekturen $\propto g_\sigma$ und $\propto g_\omega$ einhergehenden Skalenfunktionen folgt unter Verwendung der in Abschnitt 3.3.2 bis $O(u^*)$ angegebenen Entwicklungen der Skalenfunktionen \mathcal{R}_σ und \mathcal{R}_ω ,

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_\sigma(\tilde{r}_\infty) = & \Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d,\sigma) + Q_{d,\sigma}(\mathcal{R}_0) - \frac{B_{d,\sigma}}{d+\sigma-2} \left(\mathcal{R}_0^{(d+\sigma-2)/2} - \tilde{r}_\infty^{(d+\sigma-2)/2} \right) \\ & + u^* \frac{(4\pi)^{d/2}}{(\mu L)^{d-4}} \frac{n+2}{3} B_{d,\sigma} \tilde{r}_\infty^{(d+\sigma-6)/2} Q_{d,2}(\tilde{r}_\infty) + o(u^*) \quad (3.121b) \end{aligned}$$

⁸Die Skalenfunktionen von Exzess-Freier-Energie und Casimir-Kraft und deren Korrekturen sowie die zugehörigen Amplituden im $O(n)$ -symmetrischen Fall, werden in dieser Arbeit auf die Komponentenzahl n bezogen angegeben.

beziehungsweise

$$\mathcal{Y}_\omega(\check{r}_\infty) = u^* \frac{(4\pi)^{d/2}}{(\mu L)^{d-4}} \frac{n+2}{4!} \left[\frac{4Q_{d,2}^2(\mathcal{R}_0)}{\mathcal{R}_0^2} - A_d^2 (\mathcal{R}_0^{d-2} - \check{r}_\infty^{d-2}) \right] + o(u^*). \quad (3.121c)$$

Um nun die Epsilon-Entwicklungen dieser Skalenfunktionen herzuleiten, muss die Skalenfunktion $\mathcal{R}_0 \equiv \mathcal{R}_0(\check{r}_\infty)$ in den Gleichungen (3.121) durch ihre Entwicklung (3.99a) bis zur ersten Ordnung in u^* ersetzt werden. Betrachtet man dabei zunächst den für die Skalenfunktion $\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty)$ erhaltenen Ausdruck (3.121a), so zeigt sich, dass hier neben Termen proportional zu \mathcal{R}_0 und \mathcal{R}_0^2 , auch im Allgemeinen nichtanalytische Funktionen von \mathcal{R}_0 auftreten. Dies sind $-A_d \mathcal{R}_0^{d/2}/d$ und $-4\pi Q_{d+2,2}(\mathcal{R}_0)/\mathcal{R}_0$. Addiert man diese Ausdrücke, so folgt nach Ersetzung der Funktion $Q_{d+2,2}(y)$ durch ihre Potenzreihendarstellung (A.59), dass

$$-\frac{A_d}{d} \mathcal{R}_0^{d/2} - \frac{4\pi Q_{d+2,2}(\mathcal{R}_0)}{\mathcal{R}_0} = -\frac{A_{d-1}}{d-1} \mathcal{R}_0^{(d-1)/2} - 2\pi \sum_{m=0}^{\infty} c_{m,d+2,2} \mathcal{R}_0^m \quad (3.122)$$

mit den Koeffizienten

$$c_{m,d,\sigma} = \frac{(-1)^m \pi^{(d-3)/2} \Gamma\left(m + \frac{5-d-\sigma}{2}\right) \zeta(2m+5-d-\sigma)}{(2\pi)^{2m+3-\sigma} \Gamma\left(m+2-\frac{\sigma}{2}\right)}. \quad (3.123)$$

Die Summe dieser beiden Terme reduziert sich somit auf eine Reihe ganzzahliger Potenzen von \mathcal{R}_0 und einen im Allgemeinen in \mathcal{R}_0 nichtanalytischen Term $\propto \mathcal{R}_0^{(d-1)/2}$. Damit nach Ersetzung der Skalenfunktion \mathcal{R}_0 durch ihre Entwicklung (3.99a) jedoch eine wohldefinierte Entwicklung nach Potenzen von u^* resultiert, wird der im Allgemeinen nichtanalytische Term $A_{d-1} \mathcal{R}_0^{(d-1)/2}/(d-1)$ zu Gleichung (3.121a) hinzuaddiert, die Skalenfunktion \mathcal{R}_0 durch ihre Entwicklung (3.99a) ersetzt und der erhaltene Ausdruck bis zur ersten Ordnung um $u^* = 0$ entwickelt und anschließend der nichtanalytische Term wieder subtrahiert. Dies ergibt

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty) &= -\frac{A_{d-1}}{d-1} \left(\mathcal{R}_0^{(d-1)/2} - \check{r}_\infty^{(d-1)/2} \right) - \frac{4\pi Q_{d+2,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} + u^* \frac{(4\pi)^{d/2}}{(\mu L)^{d-4}} \frac{n+2}{3!} \frac{Q_{d,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} \\ &\times \left[A_{d-1} \check{r}_\infty^{(d-3)/2} + \frac{Q_{d,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} \right] + O(u^{*2}), \end{aligned} \quad (3.124)$$

und es bleibt nun der Fixpunktwert (3.80) einzusetzen und $\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty)$ um $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen zu entwickeln. Berücksichtigt man dabei nur Terme die im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ langsamer als $O(\epsilon^2)$ abfallen, so folgt schließlich nach Ersetzung der Skalenfunktion \mathcal{R}_0 durch ihre Epsilon-Entwicklung (3.100a)

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty) &= -\frac{1}{12\pi} \left[\left(\check{r}_\infty + \epsilon \frac{n+2}{n+8} \frac{16\pi^2 Q_{4,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} \right)^{3/2} - \check{r}_\infty^{3/2} \right] - \frac{4\pi Q_{6,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} \\ &+ \epsilon \left\{ \frac{4\pi R_{6,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} + \frac{n+2}{n+8} \frac{8\pi^2 Q_{4,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} \left[\frac{\sqrt{\check{r}_\infty}}{4\pi} + \frac{Q_{4,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} \right] \right\} + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (3.125)$$

mit der gemäß

$$R_{d,\sigma}(y) \equiv \frac{\partial Q_{d,\sigma}(y)}{\partial d} \quad (3.126)$$

als Ableitung der Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ nach ihrem ersten Index definierten Funktion $R_{d,\sigma}(y)$.

Auf gleiche Weise ist mit den Ausdrücken für die Skalenfunktionen \mathcal{Y}_σ und \mathcal{Y}_ω zu verfahren, und ergibt

$$\mathcal{Y}_\sigma(\check{r}_\infty) = \Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d, \sigma) + Q_{d,\sigma}(\check{r}_\infty) + u^* \frac{(4\pi)^{d/2}}{(\mu L)^{d-4}} \frac{n+2}{3} \frac{Q_{d,2}(\check{r}_\infty) Q'_{d,\sigma}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} + o(u^*) \quad (3.127)$$

beziehungsweise

$$\mathcal{Y}_\omega(\check{r}_\infty) = u^* \frac{(4\pi)^{d/2}}{(\mu L)^{d-4}} \frac{n+2}{3} \frac{Q_{d,2}^2(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty^2} + o(u^*). \quad (3.128)$$

Setzt man nun den Fixpunktwert (3.80) ein und entwickelt um $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen, so führt dies schließlich auf die Epsilon-Entwicklung der Skalenfunktion \mathcal{Y}_σ im Fall $2 < \sigma < 4$,

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_\sigma(\check{r}_\infty) = & \Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(4, \sigma) + Q_{4,\sigma}(\check{r}_\infty) + \epsilon \left[\frac{n+2}{n+8} \frac{16\pi^2 Q_{4,2}(\check{r}_\infty) Q'_{4,\sigma}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} - \Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}(1,0)}(4, \sigma) \right. \\ & \left. - R_{4,\sigma}(\check{r}_\infty) \right] + o(\epsilon), \end{aligned} \quad (3.129)$$

mit der Ableitung der Amplituden (2.76b) des Gaußschen Modells nach ihrem ersten Argument,

$$\Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}(1,0)}(d, \sigma) \equiv \frac{\partial \Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d, \sigma)}{\partial d}, \quad (3.130)$$

für die in Gleichung (A.87) in Anhang A.4.4 ein expliziter Ausdruck angegeben wird. Auf entsprechende Weise ergibt sich die Epsilon-Entwicklung der Skalenfunktion \mathcal{Y}_ω zu

$$\mathcal{Y}_\omega(\check{r}_\infty) = \epsilon \frac{n+2}{n+8} \frac{8\pi^2 Q_{4,2}^2(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty^2} + o(\epsilon). \quad (3.131)$$

Mit Hilfe dieser Ausdrücke, die im Rahmen der Epsilon-Entwicklung für die *Finite-Size*-Skalenfunktion der Exzess-Freien-Energie $f_{\text{ex}}^{\text{ren}}$ im $O(n)$ -symmetrischen Fall und ihre führenden Korrekturen erhalten wurden, kann nun das Verhalten von $f_{\text{ex}}^{\text{ren}}$ auf großen Längenskalen L untersucht werden, und zwar wiederum sowohl am kritischen Punkt als auch im Temperaturbereich $T > T_{c,\infty}$. Den Gleichungen (1.27) und (3.120) entsprechend gilt für den Wert der skalierten Exzess-Freien-Energie am kritischen Punkt in $2 < d < 4$ Dimensionen mit $2 < \sigma < 4$,

$$\frac{L^{d-1}}{n} f_{\text{ex,bcp}}^{\text{ren}} \underset{L \rightarrow \infty}{\approx} \Delta_C(d, n) + g_\sigma L^{-\omega_\sigma} \Delta_{\sigma,C}(d, \sigma, n) + g_\omega L^{-\omega} \Delta_{\omega,C}(d, n) + o(g_\sigma, g_\omega) \quad (3.132)$$

mit den Korrektorexponenten ω_σ und ω , die in der hier betrachteten Ordnung $\omega_\sigma = \sigma - 2 + O(\epsilon^2)$ beziehungsweise $\omega = \epsilon + O(\epsilon^2)$ betragen, und den Amplituden $\Delta_C(d, n)$, $\Delta_{\sigma,C}(d, \sigma, n)$ und $\Delta_{\omega,C}(d, n)$, die den Werten der Skalenfunktionen $\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty)$, $\mathcal{Y}_\sigma(\check{r}_\infty)$ beziehungsweise $\mathcal{Y}_\omega(\check{r}_\infty)$ bei

$\check{r}_\infty = 0$ entsprechen. Um diese zu berechnen, werden die in den Epsilon-Entwicklungen (3.125, 3.129, 3.131) auftretenden Q -Funktionen durch ihre Potenzreihendarstellung (A.59) ersetzt und die Entwicklungen bei $\check{r}_\infty = 0$ ausgewertet. Dies ergibt

$$\Delta_C(d, n) \equiv \mathcal{Y}_0(0) \quad (3.133a)$$

$$= -\frac{\pi^2}{90} + \epsilon \frac{\pi^2}{180} \left[1 - \gamma - \log(\pi) + \frac{2\zeta'(4)}{\zeta(4)} + \frac{5n+2}{2n+8} \right] - \epsilon^{3/2} \frac{\pi^2}{9\sqrt{6}} \left(\frac{n+2}{n+8} \right)^{3/2} + O(\epsilon^2), \quad (3.133b)$$

mit der Euler-Mascheroni-Konstanten $\gamma = 0.577215\dots$, und für die Amplituden, die mit der Korrektur aus dem langreichweitigen Anteil des Paarpotentials und den Wegner-Korrekturen einhergehen, folgt

$$\Delta_{\sigma,C}(d, \sigma, n) \equiv \mathcal{Y}_\sigma(0) \quad (3.133c)$$

$$= \Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(4, \sigma) - \epsilon \left[\Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}(1,0)}(4, \sigma) - \frac{n+2}{n+8} \frac{\Gamma(\sigma)\zeta(\sigma) \cos\left(\frac{\pi\sigma}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1-\sigma}{2}\right)}{12\sqrt{\pi}\Gamma\left(\frac{4-\sigma}{2}\right)} \right] + o(\epsilon) \quad (3.133d)$$

beziehungsweise

$$\Delta_{\omega,C}(d, n) \equiv \mathcal{Y}_\omega(0) = \epsilon \frac{\pi^2}{72} \frac{n+2}{n+8} + o(\epsilon). \quad (3.133e)$$

Die Epsilon-Entwicklung der Casimir-Amplitude $\Delta_C(d, n)$ weist dabei, neben den bereits aus den Referenzen [29, 30] bekannten Beiträgen von der Ordnung ϵ^0 und ϵ , auch einen zu $\epsilon^{3/2}$ proportionalen Term auf, der seinen Ursprung in der L -abhängigen Verschiebung der Temperatur $\delta\check{r}_L$ in dem effektiven Hamiltonian (3.39) der Nullmode hat. Die entsprechenden Terme in den Epsilon-Entwicklungen der Korrekturamplituden $\Delta_{\sigma,C}(d, \sigma, n)$ und $\Delta_{\omega,C}(d, n)$ können im Rahmen der hier betrachteten Ordnung nicht erhalten werden.

In Tabelle 2 sind nun die durch Extrapolation von Gleichung (3.133b) gegen $\epsilon = 1$ erhaltenen Schätzwerte für die Casimir-Amplitude $\Delta_C(d, n)$ in drei Dimensionen für die Fälle $n = 1, 2, 3$ und

Casimir-Amplitude	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = \infty$
$\Delta_C(d, n)$	$-0.1967^{(a)}$	$-0.2147^{(a)}$	$-0.2311^{(a)}$	$-0.4668^{(a)}$
	$-0.1105^{(b)}$	$-0.1014^{(b)}$	$-0.0939^{(b)}$	$-0.0192^{(b)}$
	$-0.1526(10)^{(c)}$			$-0.1531^{(d)}$

Tabelle 2: Schätzwerte für die Casimir-Amplitude $\Delta_C(d, n)$ des dreidimensionalen $O(n)$ -symmetrischen Modells mit periodischen Randbedingungen. Aus Gleichung (3.133b) mit $\epsilon = 1$ erhaltene Werte (a). Zweischleifenergebnis mit $\epsilon = 1$ aus Referenz [30] (b). Monte Carlo-Resultat aus Referenz [25] (c). Exakter Wert im *Mean*-Sphärischen-Modell gemäß den Gleichungen (2.105) (d).

den Limes $n \rightarrow \infty$ angeben. Zum Vergleich sind auch die entsprechenden Zweischleifenresultate aus Referenz [30] (siehe dort Tabelle I), ein Monte Carlo-Ergebnis für den einkomponentigen Fall $n = 1$ [25], sowie der exakte Wert der Amplituden im *Mean-Sphärischen-Modell* $\Delta_C^{\text{SM}}(3)$ aus den Gleichungen (2.105) aufgeführt. Betrachtet man dabei zunächst die Schätzwerte aus [30], so zeigt sich, dass diese eine qualitativ falsche n -Abhängigkeit aufweisen, da deren Abweichungen vom exakt anzugebenden Wert der Amplituden im *Mean-Sphärischen-Modell* mit wachsendem n monoton zunehmen (siehe auch Abbildung 12.8 und § 12.2.2 in [57]). Berücksichtigt man den im Rahmen der umgeordneten Störungstheorie erhaltenen $\epsilon^{3/2}$ -Term, so liegen die Schätzwerte für die Casimir-Amplitude $\Delta_C(d, n)$ mit $n = 1, 2, 3$ und im Limes $n \rightarrow \infty$ allesamt unterhalb des exakten ($n \rightarrow \infty$)-Wertes, wobei der Fehler ebenfalls mit wachsendem n zunimmt. Vergleicht man den für den einkomponentigen Fall vorliegenden Monte Carlo-Wert mit dem in dieser Arbeit und dem in Referenz [30] erhaltenen Schätzwert, so zeigt sich, dass dieser nahezu dem Mittelwert der beiden letztgenannten entspricht. Während sich das $O(\epsilon)$ -Ergebnis für die Casimir-Amplitude oberhalb des Monte Carlo-Wertes befindet, weicht das $O(\epsilon^{3/2})$ -Ergebnis von diesem nach unten ab.

Es bleibt nun das Verhalten der Exzess-Freien-Energie auf großen Längenskalen L im Temperaturbereich $T > T_{c,\infty}$ zu untersuchen, und zwar wiederum für den rein kurzreichweitigen Fall $g_\sigma = 0$ als auch den Fall $g_\sigma > 0$, dass van-der-Waals-artige Wechselwirkungen im System vorhanden sind. Dazu wird, da die Skalenvariable \tilde{r}_∞ bei konstanter Temperatur $T > T_{c,\infty}$ im Limes $L \rightarrow \infty$ ebenfalls gegen unendlich geht, das führende asymptotische Verhalten der Skalenfunktionen \mathcal{Y}_0 , \mathcal{Y}_σ und \mathcal{Y}_ω im Grenzfall $\tilde{r}_\infty \rightarrow \infty$ benötigt. Um dieses herzuleiten, werden die Q -Funktionen in den im Rahmen der Epsilon-Entwicklung erhaltenen Ausdrücken (3.125, 3.129, 3.131) für diese Skalenfunktionen durch die führenden Terme ihrer asymptotischen Entwicklungen (2.79) ersetzt. Daraus folgt

$$\mathcal{Y}_0(\tilde{r}_\infty) \underset{\tilde{r}_\infty \rightarrow \infty}{\approx} -\frac{\tilde{r}_\infty^{3/4}}{(2\pi)^{3/2}} \left[1 - \frac{\epsilon}{2} \log\left(\frac{\sqrt{\tilde{r}_\infty}}{2\pi}\right) + O(\epsilon^2) \right] e^{-\sqrt{\tilde{r}_\infty}} \quad (3.134a)$$

für die Skalenfunktion \mathcal{Y}_0 ,

$$\mathcal{Y}_\sigma(\tilde{r}_\infty) \underset{\tilde{r}_\infty \rightarrow \infty}{\approx} -\frac{D(4, \sigma) - \epsilon D^{(1,0)}(4, \sigma) + o(\epsilon)}{\tilde{r}_\infty} \quad (3.134b)$$

für die Skalenfunktion \mathcal{Y}_σ mit dem in Gleichung (2.99) definierten Koeffizienten $D(d, \sigma)$ und der Ableitung nach seinem ersten Argument (siehe Gleichung (A.89c) in Anhang A.4.4)

$$D^{(1,0)}(d, \sigma) \equiv \frac{\partial D(d, \sigma)}{\partial d}, \quad (3.135)$$

und das asymptotische Verhalten der Skalenfunktion \mathcal{Y}_ω ergibt sich zu

$$\mathcal{Y}_\omega(\tilde{r}_\infty) \underset{\tilde{r}_\infty \rightarrow \infty}{\approx} \frac{n+2}{n+8} \frac{\sqrt{\tilde{r}_\infty}}{4\pi} \left[\epsilon + o(\epsilon) \right] e^{-2\sqrt{\tilde{r}_\infty}}. \quad (3.136)$$

Wie in Abschnitt 2.5.2 bei den Skalenfunktionen der Exzess-Freien-Energie im *Mean-Sphärischen-Modell* so zeigt sich auch hier, dass die Skalenfunktion $\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty)$ und auch die Skalenfunktion der Wegner-Korrekturen im Limes $\check{r}_\infty \rightarrow \infty$ exponentiell gegen null gehen, während die Skalenfunktion $\mathcal{Y}_\sigma(\check{r}_\infty)$ algebraisch abfällt. Sind van-der-Waals-artige Wechselwirkungen im System vorhanden, dominiert somit im Temperaturbereich $T > T_{c,\infty}$ auf hinreichend großen Längenskalen L der Beitrag zur Exzess-Freien-Energie von dem langreichweitigen Anteil des Paarpotentials. Da, sofern das Ginzburg-Kriterium (siehe z.B. § 2.4 in [115]) erfüllt ist, die Störungstheorie im Temperaturbereich $T > T_{c,\infty}$ fernab des kritischen Punktes Gültigkeit besitzt, kann das asymptotische Verhalten der Skalenfunktion $\mathcal{Y}_\sigma(\check{r}_\infty)$ auch unmittelbar aus der in Gleichung (3.127) angegebenen Darstellung von $\mathcal{Y}_\sigma(\check{r}_\infty)$ hergeleitet werden. Dazu werden die in dieser Gleichung auftretenden Q -Funktionen wieder durch ihre asymptotischen Entwicklungen (2.79) ersetzt, und man erhält

$$\mathcal{Y}_\sigma(\check{r}_\infty) \Big|_{\check{r}_\infty \rightarrow \infty} \approx -\frac{D(d, \sigma)}{\check{r}_\infty} + O(u^*). \quad (3.137)$$

Für das asymptotische Verhalten der Exzess-Freien-Energie im langreichweitigen Fall folgt daraus in führender Ordnung

$$\frac{f_{\text{ex}}^{\text{ren}}}{n} \Big|_{g_\sigma > 0} \Big|_{L \rightarrow \infty} \approx -g_\sigma \frac{D(d, \sigma)}{r_\infty} L^{-(d+\sigma-1)}, \quad (3.138)$$

übereinstimmend mit der in Gleichung (2.101a) angegebenen Asymptoten der Exzess-Freien-Energie im *Mean-Sphärischen-Modell*. Im rein kurzreichweitigen Fall wird das asymptotische Verhalten der Exzess-Freien-Energie durch die Skalenfunktion $\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty)$ bestimmt, deren Asymptote sich ausgehend von der in Gleichung (3.124) angegebenen Darstellung von $\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty)$ zu

$$\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty) \Big|_{\check{r}_\infty \rightarrow \infty} \approx -(2\pi)^{(1-d)/2} \check{r}_\infty^{(d-1)/4} e^{-\sqrt{\check{r}_\infty}} + O(u^*) \quad (3.139)$$

ergibt. Für die Exzess-Freie-Energie folgt daraus ein exponentieller Zerfall von der Form

$$\frac{f_{\text{ex}}^{\text{ren}}}{n} \Big|_{g_\sigma = 0} \Big|_{L \rightarrow \infty} \approx -(2\pi L)^{-(d-1)/2} r_\infty^{(d-1)/4} e^{-L\sqrt{r_\infty}}, \quad (3.140)$$

und auch dieses Ergebnis findet sich in Übereinstimmung mit der entsprechenden Asymptoten der Exzess-Freien-Energie im *Mean-Sphärischen-Modell*, Gleichung (2.101c).

Die in diesem Abschnitt im Rahmen der Epsilon-Entwicklung hergeleiteten Ausdrücke für die *Finite-Size*-Skalenfunktion der Exzess-Freien-Energie und ihre führenden Korrekturen sollen nun speziell für den Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen in drei Dimensionen durch Extrapolation gegen $\epsilon = 1$ mit $\sigma = 3$ ausgewertet und grafisch dargestellt werden. Dazu benötigt man, neben den entsprechenden Werten der Amplituden (2.76b) und ihrer d -Ableitung (A.87)

$$\Delta_{\sigma, C}^{\text{GM}}(4, 3) = \frac{3\zeta(5)}{4\pi^2}, \quad \Delta_{\sigma, C}^{\text{GM}(1,0)}(4, 3) = \frac{3}{8\pi^2} \left\{ \zeta(5) \left[\psi\left(\frac{5}{2}\right) - \log(\pi) \right] + 2\zeta'(5) \right\}, \quad (3.141)$$

die in die Skalenfunktion \mathcal{Y}_σ eingehen, die Funktionen $Q_{6,2}(y)$, $R_{6,2}(y)$, $Q_{4,2}(y)$, $Q_{4,3}(y)$ und ihre Ableitung $Q'_{4,3}(y)$, sowie die Funktion $R_{4,3}(y)$. Für diese konnten — im Gegensatz zu den bei der Exzess-Freien-Energie im *Mean-Sphärischen-Modell* auftretenden Funktionen $Q_{d,\sigma}(y)$ mit ungeraden Werten des Index d und $\sigma \in \{2, 3\}$ — keine geschlossen analytischen Ausdrücke gefunden werden. Um diese Funktionen zu berechnen, muss daher auf andere Darstellungen zurückgegriffen werden, wobei für $Q_{4,2}(y)$ und $Q'_{4,3}(y)$ in Abschnitt 3.3.2 bereits eine Summenbeziehungswise Integraldarstellung angegeben worden ist. Des Weiteren folgt aus Gleichung (A.62) in Anhang A.4.2 mit $d = 6$ eine Reihendarstellung der Funktion $Q_{6,2}(y)$ von der Form

$$Q_{6,2}(y) = \frac{y^2}{8\pi^3} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{K_2(m\sqrt{y})}{m^2}, \quad (3.142)$$

und Gleichung (A.69) mit $d = 6$ ergibt nach einigen weiteren Umformungen

$$R_{6,2}(y) = \frac{1}{2} \log\left(\frac{\sqrt{y}}{2\pi}\right) Q_{6,2}(y) - \frac{y^2}{(2\pi)^3} \sum_{m=1}^{\infty} \left[\sqrt{y} K_1(m\sqrt{y}) \frac{\log(m) - 1}{m^3} + K_0(m\sqrt{y}) \times \frac{m^2 \log(m)y - 2}{2m^4} \right]. \quad (3.143)$$

Die Funktionen $Q_{4,3}(y)$ und $R_{4,3}(y)$ können mit Hilfe ihrer in Anhang A.4.3 hergeleiteten Integraldarstellungen (siehe Gleichungen (A.75) und (A.81))

$$Q_{4,3}(y) = \frac{\zeta(3)y}{4\pi^2} - \frac{y^2}{4\pi^2} [1 - \log(2\sqrt{y})] - \frac{y^{5/2}}{32\pi} + \frac{y^2}{16\pi^2} \int_0^1 \frac{dt \sqrt{1-t}}{t} \left[\sqrt{ty} \coth\left(\frac{\sqrt{ty}}{2}\right) - 2 \right] \quad (3.144)$$

und

$$R_{4,3}(y) = \frac{y}{4(4\pi)^2} \int_0^\infty dt t^{-5/2} \left[\vartheta_3\left(0, e^{-1/(4t)}\right) - 1 \right] \left[\sqrt{yt} \operatorname{erfi}(\sqrt{yt}) e^{-yt} - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \right] \log(4\pi t), \quad (3.145)$$

mit der Jacobischen Theta-Funktion $\vartheta_3(z, q)$ und der imaginären Fehler-Funktion $\operatorname{erfi}(z)$, numerisch berechnet werden. Die mit Hilfe dieser Darstellungen für $d = \sigma = 3$ erhaltenen Skalenfunktionen \mathcal{Y}_i ($i = 0, \sigma, \omega$), sind in den Abbildungen 22–24 für den Fall eines ein-, zwei- und dreikomponentigen Ordnungsparameters sowie den Limes $n \rightarrow \infty$ dargestellt.

Die Skalenfunktion $\mathcal{Y}_0(\tilde{r}_\infty)$ aus Gleichung (3.125), die in diesem Kapitel für den $O(n)$ -symmetrischen Fall in Zweischleifenordnung hergeleitet wurde, und das *Finite-Size*-Skalenverhalten der Exzess-Freien-Energie im Fall rein kurzreichweitiger Wechselwirkungen beschreibt, soll nun mit der von Krech und Dietrich für den Fall periodischer Randbedingungen angegebenen Skalenfunktion (siehe Gleichungen (6.13) und Abbildung 3 in Referenz [30]) verglichen werden. Eine Auftragung dieser Skalenfunktion über der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ zusammen mit der Skalenfunktion $\mathcal{Y}_0(\tilde{r}_\infty)$, findet sich in Abbildung 25, und zwar exemplarisch für den Fall eines ein-komponentigen Ordnungsparameters in drei Dimensionen ($\epsilon = 1$, $n = 1$). Dabei zeigt sich, dass

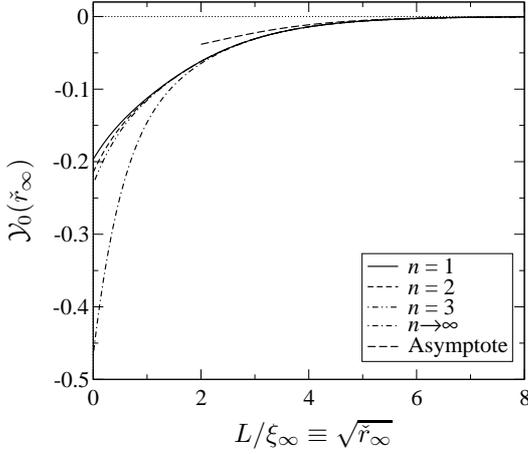


Abbildung 22: Auftragung der Skalenfunktion $\mathcal{Y}_0(\tilde{r}_\infty)$ des $O(n)$ -symmetrischen Modells mit $n = 1, 2, 3$ und im Limes $n \rightarrow \infty$ über der *Finite-Size*-Skalenvariablen $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{\tilde{r}_\infty}$ im dreidimensionalen Fall ($\epsilon = 1$). Ihre von der Komponentenzahl n unabhängige Asymptote (3.134a) ist als punktierte Linie dargestellt. Am kritischen Punkt $L/\xi_\infty = 0$ reduziert sich die Skalenfunktion $\mathcal{Y}_0(\tilde{r}_\infty)$ auf die in Tabelle 2 unter (a) angegebenen Werte der Casimir-Amplituden $\Delta_C(3, n)$ mit $n = 1, 2, 3$ und im Limes $n \rightarrow \infty$.

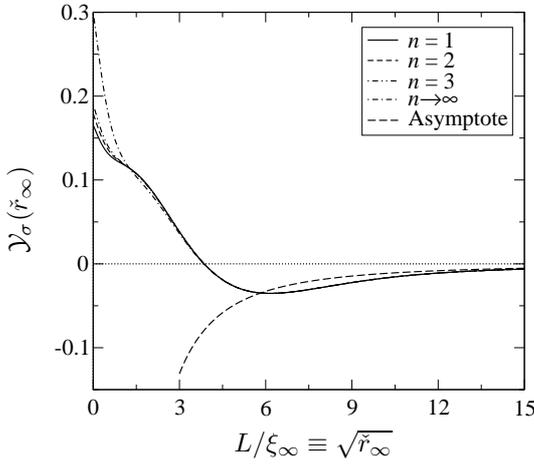


Abbildung 23: Auftragung der Skalenfunktion $\mathcal{Y}_\sigma(\tilde{r}_\infty)$ des $O(n)$ -symmetrischen Modells mit $n = 1, 2, 3$ und im Limes $n \rightarrow \infty$ über der *Finite-Size*-Skalenvariablen $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{\tilde{r}_\infty}$ im Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen in drei Dimensionen ($\epsilon = 1, \sigma = 3$). Ihre n -unabhängige Asymptote (3.134b) mit $\epsilon = 1$ und $\sigma = 3$ sowie den Konstanten $D(4, 3) = 45\zeta(7)/(2\pi)^2$ und $D^{(1,0)}(4, 3) = 45\{\zeta(7)[\psi(\frac{7}{2}) - \log(\pi)] + 2\zeta'(7)\}/(8\pi^2)$, ist als strichlierte Linie dargestellt. Der Wert der Skalenfunktion $\mathcal{Y}_\sigma(\tilde{r}_\infty)$ am kritischen Punkt $L/\xi_\infty = 0$ entspricht der in Gleichung (3.133d) bis zur ersten Ordnung in ϵ angegebenen Amplituden $\Delta_{\sigma,C}(d, \sigma, n)$ mit $\epsilon = 1$ und $\sigma = 3$.

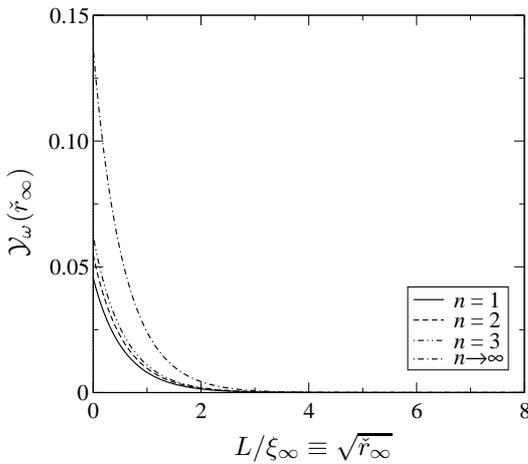


Abbildung 24: Auftragung der Skalenfunktion $\mathcal{Y}_\omega(\tilde{r}_\infty)$ des dreidimensionalen $O(n)$ -symmetrischen Modells mit $n = 1, 2, 3$ und im Limes $n \rightarrow \infty$ über der *Finite-Size*-Skalenvariablen $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{\tilde{r}_\infty}$. Ihr Wert am kritischen Punkt $L/\xi_\infty = 0$ entspricht der Amplituden $\Delta_{\omega,C}(d, n)$ aus Gleichung (3.133e) mit $\epsilon = 1$.

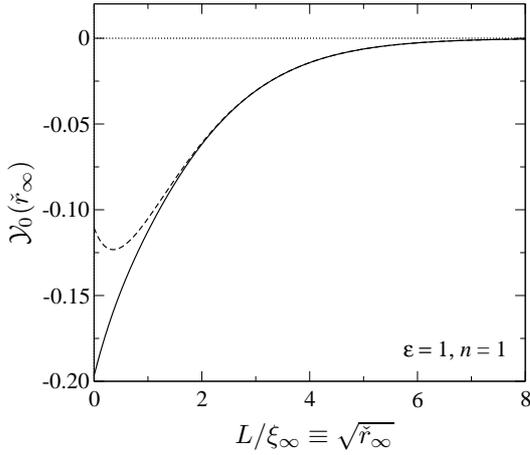


Abbildung 25: Auftragung der Skalenfunktion $\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty)$ über der *Finite-Size*-Skalenvariablen $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{\check{r}_\infty}$ exemplarisch für den Fall $n = 1$ eines einkomponentigen Ordnungsparameters in drei Dimensionen ($\epsilon = 1$). Die in Gleichung (3.147) angegebene Skalenfunktion $\tilde{\mathcal{Y}}_0(\check{r}_\infty)$ mit $\epsilon = 1$ und $n = 1$, die äquivalent ist zu der in [30] bis $O(\epsilon)$ hergeleiteten Skalenfunktion für den Fall periodischer Randbedingungen, ist als strichlierte Linie dargestellt.

die Skalenfunktionen bei Annäherung an den kritischen Punkt $L/\xi_\infty = 0$ signifikant voneinander abweichen, während im Bereich $L/\xi_\infty \gtrsim 2$ eine gute Übereinstimmung festzustellen ist. Der Grund hierfür ist in dem Beitrag zur Skalenfunktion $\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty)$ von der ($q_1 = 0$)-Mode zu suchen, der dem in runden Klammern befindlichen Ausdruck in der ersten Zeile von Gleichung (3.125) entspricht. Für diesen gilt

$$-\frac{1}{12\pi} \left(\check{r}_\infty + \epsilon \frac{n+2}{n+8} \frac{16\pi^2 Q_{4,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} \right)^{3/2} \Big|_{\check{r}_\infty \gg 1} \approx -\frac{1}{12\pi} \check{r}_\infty^{3/2} - \epsilon \frac{n+2}{n+8} 2\pi \sqrt{\check{r}_\infty} Q_{4,2}(\check{r}_\infty), \quad (3.146)$$

da die Funktion $Q_{4,2}(\check{r}_\infty)$ bei großen Werten von \check{r}_∞ exponentiell gegen null geht. Ersetzt man den Ausdruck $-\frac{1}{12\pi}(\dots)^{3/2}$ in der ersten Zeile von Gleichung (3.125) durch die rechte Seite der vorangegangenen Gleichung, so geht $\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty)$ über in die Skalenfunktion⁹

$$\tilde{\mathcal{Y}}_0(\check{r}_\infty) = -\frac{4\pi Q_{6,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} + \epsilon \left[\frac{4\pi R_{6,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} + \frac{n+2}{n+8} \frac{8\pi^2 Q_{4,2}^2(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty^2} \right] + O(\epsilon^2). \quad (3.147)$$

Diese ist äquivalent zu der in Referenz [30] für den Fall periodischer Randbedingungen hergeleiteten Skalenfunktion, was durch Umschreiben der Funktionen $Q_{6,2}(y)$, $Q_{4,2}(y)$ und $R_{6,2}(y)$ auf die in Gleichung (D7) in [30] eingeführte Funktion

$$g_{a,b}(y) = \frac{1}{a} \int_1^\infty dx \frac{(x^2 - 1)^a \log^b(x^2 - 1)}{e^{2yx} - 1} \quad (3.148)$$

unter Verwendung von

$$Q_{d,2}(y) = \frac{y^{d/2}}{(4\pi)^{(d-1)/2} \Gamma\left(\frac{d-3}{2}\right)} g_{(d-3)/2,0}\left(\frac{\sqrt{y}}{2}\right) \quad (3.149a)$$

und

$$R_{6,2}(y) = \frac{y^3}{32\pi^3} \left\{ \left[\gamma + \log\left(\frac{y}{\pi}\right) - \frac{8}{3} \right] g_{3/2,0}\left(\frac{\sqrt{y}}{2}\right) + g_{3/2,1}\left(\frac{\sqrt{y}}{2}\right) \right\} \quad (3.149b)$$

⁹Dasselbe Resultat wird erzielt, wenn man eine Epsilon-Entwicklung bis zur ersten Ordnung des Ausdrucks $-\frac{1}{12\pi}(\dots)^{3/2}$ in der ersten Zeile von Gleichung (3.125) durchführt.

gezeigt werden kann. Die Skalenfunktionen $\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty)$ und $\tilde{\mathcal{Y}}_0(\check{r}_\infty)$ sind somit asymptotisch gleich für große Werte von \check{r}_∞ . Im Limes $\check{r}_\infty \rightarrow 0$ ($L/\xi_\infty \rightarrow 0$) weichen sie jedoch deutlich voneinander ab, da sich der auf der linken Seite von Gleichung (3.146) angegebene Beitrag zur Skalenfunktion $\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty)$ von der ($q_1 = 0$)-Mode in diesem Limes auf den $\epsilon^{3/2}$ -Term in der Casimir-Amplitude (3.133b) reduziert, während die rechte Seite dieser Gleichung wegen $Q_{4,2}(y) \underset{y \rightarrow 0}{=} O(y)$ verschwindet. Dieser Term ist somit erst durch die korrekte Behandlung der ($q_1 = 0$)-Mode im Rahmen der umgeordneten Störungstheorie zu reproduzieren.

Ein weiteres Problem, mit dem die Skalenfunktion $\tilde{\mathcal{Y}}_0(\check{r}_\infty)$ behaftet ist, ist dass sie nicht in Einklang mit der Forderung steht, dass die freie Energie f_L im Fall $L < \infty$ am kritischen Punkt eine analytische Funktion von der reduzierten Temperatur τ ist. Krech und Dietrich haben dies anhand des asymptotischen Verhaltens der Skalenfunktion im Limes $\check{r}_\infty \rightarrow 0$ ($L/\xi_\infty \rightarrow 0$) gezeigt. Damit die freie Energie f_L , die sich wie in Gleichung (1.6) angegeben im Allgemeinen aus einem *Bulk*-, Oberflächen- und *Finite-Size*-Anteil zusammensetzt, im Fall $L < \infty$ bei $\tau = 0$ eine analytische Funktion der reduzierten Temperatur ist, muss der *Finite-Size*-Anteil die nicht-analytischen Abhängigkeiten der *Bulk*- und Oberflächen-Beiträge kompensieren. Da letztere im Fall periodischer Randbedingungen nicht vorhanden sind, folgt daraus für die Skalenfunktion des *Finite-Size*-Anteils, dass diese in der Umgebung des kritischen Punktes $\check{r}_\infty = 0$ durch eine Reihe von Potenzen der *Finite-Size*-Skalenvariablen $L/\xi_\infty = \sqrt{\check{r}_\infty}$ von der Form (vgl. Gleichung (7.1) in [30])

$$\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty) \underset{\check{r}_\infty \rightarrow 0}{=} \Delta_C(d, n) + \frac{a_b^{(+)} \check{r}_\infty^{d/2}}{\alpha(1-\alpha)(2-\alpha)} + \sum_{k=1}^{\infty} \Delta_k^{(+)} \check{r}_\infty^{k/(2\nu)} \quad (3.150)$$

dargestellt werden kann, wobei die neben der Casimir-Amplituden $\Delta_C(d, n)$ auftretenden Koeffizienten $a_b^{(+)} \equiv a_b^{(+)}(d, n)$ und $\Delta_k^{(+)} \equiv \Delta_k^{(+)}(d, n)$ ebenfalls universelle Größen sind, und die Pluszeichen andeuten, dass sich diese auf den Limes $\tau \rightarrow 0+$ beziehen. Ersetzt man in der in Gleichung (1.6) angegebenen Zerlegung der freien Energie pro Flächeneinheit den *Finite-Size*-Anteil $\delta f_L(T)$ durch $L^{-(d-1)}\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty)$, und $\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty)$ durch seine Reihendarstellung (3.150), so kompensiert der zu $\check{r}_\infty^{d/2}$ proportionale Term die Nichtanalytizität des *Bulk*-Anteils $L f_{\text{bk}}(T)$. Da im Fall periodischer Randbedingungen keine Oberflächenbeiträge vorhanden sind ($f_{s,1} = f_{s,2} = 0$), und die unendliche Reihe ausschließlich Terme mit ganzzahligen Potenzen von $\tau \sim \check{r}_\infty^{1/(2\nu)}$ umfasst, ist f_L somit im Fall $L < \infty$ eine bei $\tau = 0$ analytische Funktion der reduzierten Temperatur.

Um zu überprüfen, ob die von ihnen für die verschiedenen Randbedingungen bis zur ersten Ordnung in ϵ hergeleiteten Skalenfunktionen die in Gleichung (3.150) angegebene Struktur besitzen¹⁰, haben Krech und Dietrich die Skalenfunktionen um $L/\xi_\infty = 0$ entwickelt. Für die Skalenfunktion aus Gleichung (3.147) lautet diese Entwicklung bis zur ersten Ordnung

$$\tilde{\mathcal{Y}}_0(\check{r}_\infty) \underset{\check{r}_\infty \rightarrow 0}{=} \Delta_C^{(\text{KD})}(d, n) - \epsilon \frac{\pi}{12} \frac{n+2}{n+8} \sqrt{\check{r}_\infty} + O(\check{r}_\infty), \quad (3.151)$$

¹⁰Im Fall nicht-periodischer Randbedingungen sind in Gleichung (3.150) zusätzlich auch entsprechende Oberflächenbeiträge zu berücksichtigen.

wobei $\Delta_C^{(\text{KD})}(d, n)$ der Casimir-Amplituden (3.133b) ohne den $\epsilon^{3/2}$ -Term entspricht. Vergleicht man dieses Resultat mit der Reihendarstellung (3.150) in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen bis zur ersten Ordnung in ϵ , dabei ist [89]

$$\nu = \frac{1}{2} + \frac{\epsilon}{4} \frac{n+2}{n+8} + O(\epsilon^2), \quad (3.152)$$

so zeigt sich, dass der $\sqrt{\tilde{r}_\infty}$ -Term diese Struktur verletzt, da die Skalenfunktion demgemäß in der Auftragung über $L/\xi_\infty = \sqrt{\tilde{r}_\infty}$ am kritischen Punkt eine waagerechte Tangente besitzt. Eine Ausnahme bildet der Grenzfall $n \rightarrow \infty$ für den der exakte Wert des Korrelationslängenexponenten ν in drei Dimensionen $\nu = 1$ beträgt und in der Reihendarstellung (3.150) der Skalenfunktion demnach ein Term $\propto \sqrt{\tilde{r}_\infty}$ auftritt. Die Skalenfunktion weist im Fall $n \rightarrow \infty$ in $d = 3$ in der Auftragung über $L/\xi_\infty = \sqrt{\tilde{r}_\infty}$ somit eine von null verschiedene Steigung auf, was durch die in Abschnitt 2.5.2 im Rahmen des *Mean-Sphärischen-Modells* für den Grenzfall $n \rightarrow \infty$ hergeleitete exakte Skalenfunktion Y_0 bestätigt wird (siehe Abbildung 9).

Da die Skalenfunktion $\tilde{\mathcal{Y}}_0(\tilde{r}_\infty)$ aus Gleichung (3.147) nicht die in Gleichung (3.150) angegebene Struktur aufweist, steht sie nicht in Einklang mit den im Vorangegangenen diskutierten Analytizitätseigenschaften der freien Energie — dasselbe gilt für die in [30] für die speziellen Randbedingungen (sp-sp) bis zur ersten Ordnung in ϵ hergeleiteten Skalenfunktion. Untersucht man das asymptotische Verhalten der in dieser Arbeit erhaltenen Skalenfunktion $\mathcal{Y}_0(\tilde{r}_\infty)$ aus Gleichung (3.125) im Limes $\tilde{r}_\infty \rightarrow 0$, so ergibt sich dies unter Verwendung der in Anhang A.4.4 aufgeführten Entwicklungen der Funktionen $Q_{6,2}(y)$, $Q_{4,2}(y)$ und $R_{6,2}(y)$ um $y = 0$ zu

$$\mathcal{Y}_0(\tilde{r}_\infty) \underset{\tilde{r}_\infty \rightarrow 0}{=} \Delta_C(d, n) + \epsilon^{3/2} \frac{\pi}{2\sqrt{6}} \left(\frac{n+2}{n+8} \right)^{3/2} \sqrt{\tilde{r}_\infty} + O(\tilde{r}_\infty). \quad (3.153)$$

Auch in der Entwicklung von $\mathcal{Y}_0(\tilde{r}_\infty)$ ist somit das Auftreten eines $\sqrt{\tilde{r}_\infty}$ -Terms zu beobachten. Im Gegensatz zu dem entsprechenden Term $\propto \epsilon\sqrt{\tilde{r}_\infty}$ in der Entwicklung der Skalenfunktion $\tilde{\mathcal{Y}}_0$ aus Referenz [30], ist dieser jedoch von der Ordnung $\epsilon^{3/2}$ — dies entspricht gerade der Ordnung, bis zu der die Epsilon-Entwicklung (3.133b) der Casimir-Amplituden $\Delta_C(d, n)$ hergeleitet werden konnte. Die Terme unterscheiden sich jedoch auch im Vorzeichen. Die Skalenfunktion $\tilde{\mathcal{Y}}_0$ mit $\epsilon = 1$ und $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$ besitzt in der Auftragung über $L/\xi_\infty = \sqrt{\tilde{r}_\infty}$ am kritischen Punkt eine negative Steigung und durchläuft demnach, da sie im Limes $\tilde{r}_\infty \rightarrow \infty$ verschwindet, ein Minimum. Die in dieser Arbeit hergeleitete Skalenfunktion \mathcal{Y}_0 hingegen ist für diese Werte von ϵ und n eine monoton wachsende Funktion von L/ξ_∞ (siehe Abbildung 22).

Setzt man die in den Abbildungen 22–24 dargestellten Skalenfunktionen \mathcal{Y}_i ($i = 0, \sigma, \omega$) in die Gleichungen (3.120) ein, kann nun auch die Exzess-Freie-Energie für den dreidimensionalen Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen ($\epsilon = 1, \sigma = 3$) berechnet und grafisch dargestellt werden. In den Abbildungen 26(a) und 26(b) finden sich dazu — exemplarisch für den Fall $n = 1$ eines einkomponentigen Ordnungsparameters bei einer Filmdicke von $L = 50$ — Auftragsungen der skalierten Exzess-Freien-Energie $L^{d-1} f_{\text{ex}}^{\text{ren}}/n$ über der *Finite-Size*-Skalenvariablen

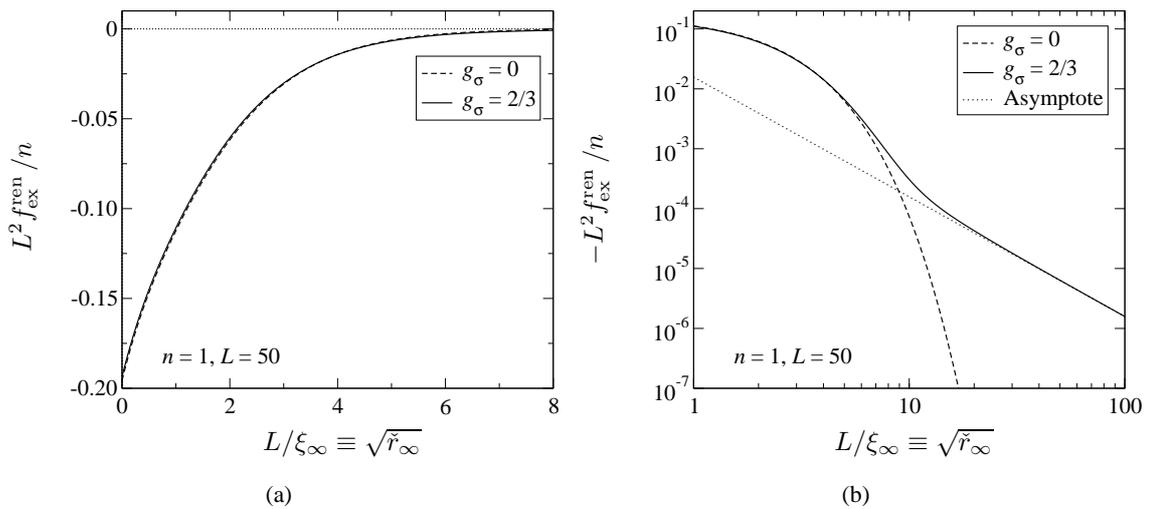


Abbildung 26: Auftragung der skalierten Exzess-Freien-Energie $L^{d-1} f_{\text{ex}}^{\text{ren}}/n$ des dreidimensionalen $O(n)$ -symmetrischen Modells über der *Finite-Size*-Skalenvariablen $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{\tilde{r}_\infty}$ bei einer Filmdicke von $L = 50$, exemplarisch für den Fall $n = 1$ eines einkomponentigen Ordnungsparameters (a). Die durchgezogene Linie beschreibt den Verlauf der skalierten Exzess-Freien-Energie im Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen ($\sigma = 3$) mit $g_\sigma = 2/3$. Die im rein kurzreichweitigen Fall $g_\sigma = 0$ erhaltene Kurve ist zum Vergleich dazu als strichlierte Linie dargestellt. Abbildung (b) zeigt die auf der linken Seite dargestellten Verläufe in doppellogarithmischer Auftragung. Die Asymptote, die sich aus Gleichung (3.138) durch Epsilon-Entwicklung bis zur ersten Ordnung ergibt, ist als punktierte Linie eingezeichnet. Sie entspricht in dieser Auftragung einer Geraden mit der Steigung -2 .

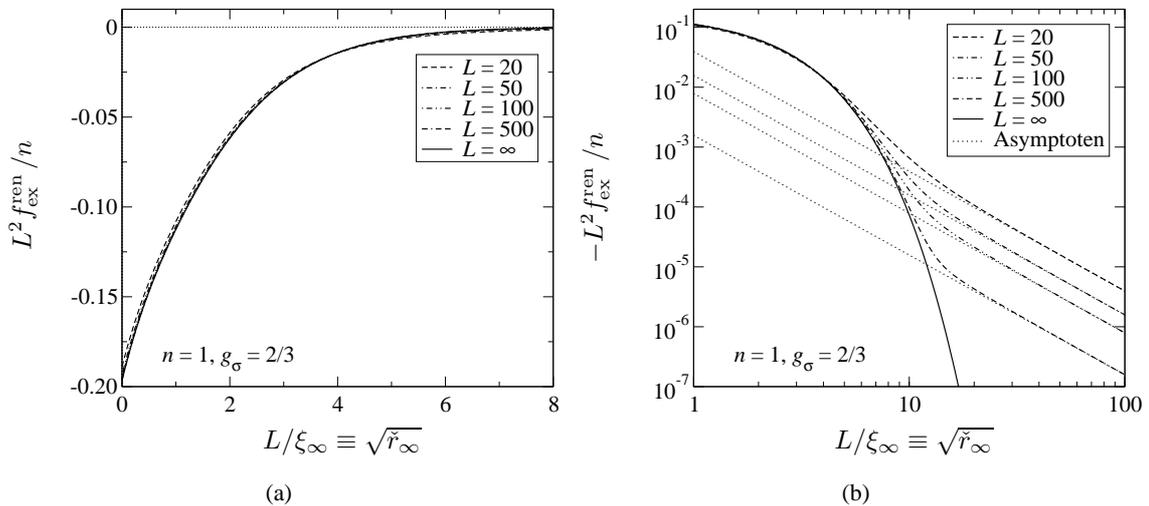


Abbildung 27: Auftragung der skalierten Exzess-Freien-Energie $L^{d-1} f_{\text{ex}}^{\text{ren}}/n$ des dreidimensionalen $O(n)$ -symmetrischen Modells im Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen ($\sigma = 3$) mit $g_\sigma = 2/3$ über der *Finite-Size*-Skalenvariablen $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{\tilde{r}_\infty}$ für die Filmdicken $L = 20, 50, 100, 500$ und im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$, exemplarisch für den Fall $n = 1$ eines einkomponentigen Ordnungsparameters (a). In Abbildung (b) sind dieselben Verläufe in doppellogarithmischer Auftragung dargestellt. Die Asymptoten, die sich aus Gleichung (3.138) durch Epsilon-Entwicklung bis zur ersten Ordnung für die verschiedenen Filmdicken L ergeben, sind als punktierte Linien eingezeichnet.

L/ξ_∞ , und zwar sowohl für ein System mit rein kurzreichweitigen Wechselwirkungen ($g_\sigma = 0$) als auch den langreichweitigen van-der-Waals-Fall exemplarisch mit $g_\sigma = 2/3$. Das Skalenfeld g_ω der Wegner-Korrekturen, das als Koeffizient der Skalenfunktion \mathcal{Y}_ω auf der rechten Seite von Gleichung (3.120b) auftritt, wurde dabei auf den Wert $g_\omega = 1$ gesetzt.

Qualitativ übereinstimmend mit dem Verlauf der Exzess-Freien-Energie des *Mean-Sphärischen-Modells* in Abbildung 12(a), ist in linearer Auftragung der skalierten Exzess-Freien-Energie über der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ (Abbildung 26(a)) lediglich eine geringfügige Verschiebung der beiden Kurven gegeneinander auszumachen. Der qualitative Unterschied zeigt sich jedoch in doppellogarithmischer Auftragung (Abbildung 26(b)), da die skalierte Exzess-Freie-Energie im rein kurzreichweitigen Fall bei großen Werten von L/ξ_∞ exponentiell gegen null geht, während in Anwesenheit langreichweitiger van der Waals-Wechselwirkungen ein algebraischer Abfall $\sim (L/\xi_\infty)^{-2}$ zu beobachten ist. Die entsprechende Asymptote der Exzess-Freien-Energie im langreichweitigen Fall aus Gleichung (3.138), die in doppellogarithmischer Auftragung einer Geraden mit der negativen Steigung -2 entspricht, ist in Abbildung 26(b) als punktierte Linie dargestellt. Dabei zeigt sich auch hier, dass der Beitrag zur Exzess-Freien-Energie vom langreichweitigen Anteil des Paarpotentials bei hinreichend großen Werten von L/ξ_∞ dominant wird, und den Verlauf der skalierten Exzess-Freien-Energie, der in diesem Bereich durch ihre algebraisch abfallende Asymptote im langreichweitigen Fall zu beschreiben ist, bestimmt.

Abschließend soll nun auch noch die Abhängigkeit der skalierten Exzess-Freien-Energie von der Filmdicke L im langreichweitigen van-der-Waals-Fall veranschaulicht werden. Dazu sind in den Abbildungen 27(a) und 27(b) sowohl lineare als auch doppellogarithmische Auftragungen der skalierten Exzess-Freien-Energie über der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ für verschiedene Werte von L dargestellt. Wie auch in den entsprechenden Auftragungen der Exzess-Freien-Energie des *Mean-Sphärischen-Modells* in den Abbildungen 13(a) und 13(b), konvergieren die Kurven dabei mit zunehmender Filmdicke gegen die Skalenfunktion \mathcal{Y}_0 , da die Wegner-Korrekturen und auch die Korrektur von dem langreichweitigen Anteil des Paarpotentials im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ bei konstant gehaltenem Wert der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ verschwinden.

3.3.5 Die Casimir-Kraft

Mit Hilfe der Zweischleifenergebnisse für die Exzess-Freie-Energie im $O(n)$ -symmetrischen Fall, kann nun auch die Casimir-Kraft $\mathcal{F}_C^{\text{ren}}$ und dabei insbesondere ihr Verhalten auf großen Längenskalen L untersucht werden. Dazu wird zunächst die Exzess-Freie-Energie in der Definitionsgleichung (1.22) der Casimir-Kraft durch die rechte Seite ihrer *Finite-Size*-Skalenform (3.120a) ersetzt. Daraus folgt, dass auch die Casimir-Kraft in der Umgebung des kritischen Punktes eine *Finite-Size*-Skalenform

$$\frac{\mathcal{F}_C^{\text{ren}}}{nk_B T} \approx L^{-d} \Theta(\check{r}_\infty, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) \quad (3.154a)$$

erfüllt. Die Skalenfunktion Θ wird dabei gemäß

$$\Theta(\check{r}_\infty, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) = \Theta_0(\check{r}_\infty) + \check{g}_\sigma \Theta_\sigma(\check{r}_\infty) + \check{g}_\omega \Theta_\omega(\check{r}_\infty) + o(\check{g}_\sigma, \check{g}_\omega) \quad (3.154b)$$

wiederum in den Skalenvariablen \check{g}_σ und \check{g}_ω linearisiert, wobei die in dieser Entwicklung auftretenden Skalenfunktionen Θ_i ($i = 0, \sigma, \omega$) durch die Skalenfunktionen \mathcal{Y}_i ($i = 0, \sigma, \omega$) der Exzess-Freien-Energie ausgedrückt werden können. Einsetzen der *Finite-Size*-Skalenform (3.120) der Exzess-Freien-Energie mit ihrer in \check{g}_σ und \check{g}_ω linearisierten Skalenfunktion $\mathcal{Y}(\check{r}_\infty, \check{g}_\sigma, \check{g}_\omega)$ in die Definitionsgleichung (1.22) der Casimir-Kraft und anschließender Koeffizientenvergleich mit den Gleichungen (3.154) führt auf

$$\Theta_0(\check{r}_\infty) = \left(d - 1 - 2\check{r}_\infty \frac{\partial}{\partial \check{r}_\infty} \right) \mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty), \quad (3.155a)$$

$$\Theta_\sigma(\check{r}_\infty) = \left(d + \omega_\sigma - 1 - 2\check{r}_\infty \frac{\partial}{\partial \check{r}_\infty} \right) \mathcal{Y}_\sigma(\check{r}_\infty) \quad (3.155b)$$

und

$$\Theta_\omega(\check{r}_\infty) = \left(d + \omega - 1 - 2\check{r}_\infty \frac{\partial}{\partial \check{r}_\infty} \right) \mathcal{Y}_\omega(\check{r}_\infty), \quad (3.155c)$$

mit den Korrektorexponenten ω_σ und ω . Die Werte dieser Skalenfunktionen am kritischen Punkt betragen

$$\Theta_0(0) = (d - 1)\Delta_C(d, n), \quad (3.156a)$$

$$\Theta_\sigma(0) = (d + \omega_\sigma - 1)\Delta_{\sigma, C}(d, \sigma, n), \quad (3.156b)$$

$$\Theta_\omega(0) = (d + \omega - 1)\Delta_{\omega, C}(d, n), \quad (3.156c)$$

da die Terme in den Gleichungen (3.155), die zu den Ableitungen der Skalenfunktionen $\mathcal{Y}_i(\check{r}_\infty)$ nach \check{r}_∞ proportional sind, bei $\check{r}_\infty = 0$ verschwinden. Setzt man diese Werte in die *Finite-Size*-Skalenform (3.154) der Casimir-Kraft ein, so ergibt sich daraus schließlich ein zu Gleichung (1.28b) äquivalenter Ausdruck für die kritische Casimir-Kraft.

Um nun das Verhalten der thermodynamischen Casimir-Kraft auf großen Längenskalen L im Temperaturbereich $T > T_{c, \infty}$ zu untersuchen, müssen zunächst die Asymptoten der Skalenfunktionen Θ_i ($i = 0, \sigma, \omega$) im Limes $\check{r}_\infty \rightarrow \infty$ hergeleitet werden. Dazu werden in den Ausdrücken für die Skalenfunktionen Θ_i die Skalenfunktionen \mathcal{Y}_i durch ihre in den Gleichungen (3.134a, 3.134b, 3.136) angegebenen Asymptoten ersetzt. Dies liefert

$$\Theta_0(\check{r}_\infty) \underset{\check{r}_\infty \rightarrow \infty}{\approx} -\frac{\check{r}_\infty^{5/4}}{(2\pi)^{3/2}} \left[1 - \frac{\epsilon}{2} \log\left(\frac{\sqrt{\check{r}_\infty}}{2\pi}\right) + O(\epsilon^2) \right] e^{-\sqrt{\check{r}_\infty}} \quad (3.157a)$$

für die Skalenfunktion Θ_0 ,

$$\Theta_\sigma(\check{r}_\infty) \underset{\check{r}_\infty \rightarrow \infty}{\approx} -(d + \omega_\sigma - 1) \frac{D(4, \sigma) - \epsilon D^{(1,0)}(4, \sigma) + o(\epsilon)}{\check{r}_\infty} \quad (3.157b)$$

für die Skalenfunktion Θ_σ und

$$\Theta_\omega(\check{r}_\infty) \underset{\check{r}_\infty \rightarrow \infty}{\approx} \frac{n+2}{n+8} \frac{\check{r}_\infty}{2\pi} \left[\epsilon + o(\epsilon) \right] e^{-2\sqrt{\check{r}_\infty}} \quad (3.157c)$$

für die Skalenfunktion Θ_ω . Auf entsprechende Weise folgt unter Verwendung der störungstheoretischen Resultate für die Asymptoten der Skalenfunktionen $\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty)$ und $\mathcal{Y}_\sigma(\check{r}_\infty)$, Gleichungen (3.139) und (3.137),

$$\Theta_0(\check{r}_\infty) \underset{\check{r}_\infty \rightarrow \infty}{\approx} -(2\pi)^{(1-d)/2} \check{r}_\infty^{(d+1)/4} e^{-\sqrt{\check{r}_\infty}} + O(u^*) \quad (3.158a)$$

beziehungsweise

$$\Theta_\sigma(\check{r}_\infty) \underset{\check{r}_\infty \rightarrow \infty}{\approx} -(d + \omega_\sigma - 1) \frac{D(d, \sigma)}{\check{r}_\infty} + O(u^*). \quad (3.158b)$$

Da die Skalenfunktion $\Theta_\sigma(\check{r}_\infty)$ für große Werte von \check{r}_∞ algebraisch abfällt, liefert sie den führenden Beitrag zur Casimir-Kraft im Temperaturbereich $T > T_{c,\infty}$ auf großen Längenskalen L , falls van-der-Waals-artige Wechselwirkungen im System vorhanden sind ($g_\sigma > 0$). Für das führende asymptotische Verhalten der Casimir-Kraft folgt dann

$$\left. \frac{\mathcal{F}_C^{\text{ren}}}{nk_B T} \right|_{g_\sigma > 0} \underset{L \rightarrow \infty}{\approx} -g_\sigma (d + \sigma - 1) \frac{D(d, \sigma)}{r_\infty} L^{-(d+\sigma)}. \quad (3.159a)$$

Sind die Wechselwirkungen hingegen rein kurzreichweitig ($g_\sigma = 0$), so wird das führende asymptotische Verhalten der Casimir-Kraft durch die Skalenfunktion Θ_0 bestimmt, und ist gemäß

$$\left. \frac{\mathcal{F}_C^{\text{ren}}}{nk_B T} \right|_{g_\sigma = 0} \underset{L \rightarrow \infty}{\approx} -(2\pi L)^{-(d-1)/2} \check{r}_\infty^{(d+1)/4} e^{-L\sqrt{\check{r}_\infty}} \quad (3.159b)$$

durch einen in führender Ordnung exponentiellen Abfall der Casimir-Kraft mit zunehmender Filmdicke gekennzeichnet. Beide Asymptoten finden sich dabei in Übereinstimmung mit den entsprechenden Asymptoten der Casimir-Kraft im *Mean-Sphärischen-Modell*, Gleichungen (2.116a) und (2.116c), und können auch unmittelbar durch Einsetzen der Asymptoten der Exzess-Freien-Energie, Gleichungen (3.138) und (3.140), in die Definitionsgleichung (1.22) der Casimir-Kraft erhalten werden.

Die in diesem Abschnitt erhaltenen Ergebnisse für die Casimir-Kraft sollen nun speziell für den Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen in drei Dimensionen ($\epsilon = 1$, $\sigma = 3$) ausgewertet und grafisch dargestellt werden. Dies erfordert die Berechnung der Skalenfunktionen $\Theta_0(\check{r}_\infty)$, $\Theta_\sigma(\check{r}_\infty)$ und $\Theta_\omega(\check{r}_\infty)$. Hierzu werden die in den Abbildungen 22–24 dargestellten Skalenfunktionen $\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty)$, $\mathcal{Y}_\sigma(\check{r}_\infty)$ und $\mathcal{Y}_\omega(\check{r}_\infty)$ der Exzess-Freien-Energie im Fall $\epsilon = 1$ und $\sigma = 3$ in die Gleichungen (3.155) eingesetzt. Auftragnen der auf diese Weise erhaltenen Skalenfunktionen der Casimir-Kraft finden sich in den Abbildungen 28–30. Addiert man diese drei Beiträge gemäß den Gleichungen (3.154) auf, so ergibt sich hieraus die skalierte Casimir-Kraft $L^d \mathcal{F}_C^{\text{ren}} / k_B T$, die in Abbildung 31 exemplarisch für ein System mit einem einkomponentigen

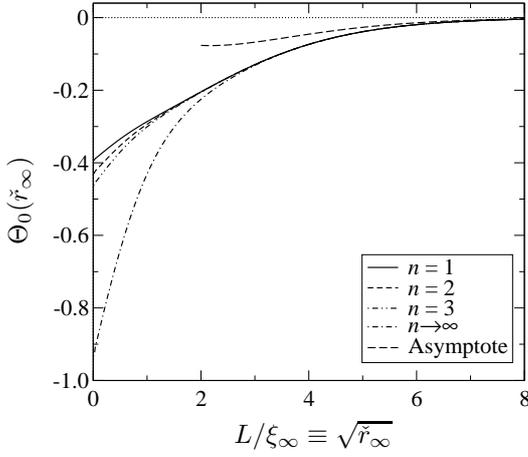


Abbildung 28: Auftragung der Skalenfunktion $\Theta_0(\tilde{r}_\infty)$ des $O(n)$ -symmetrischen Modells mit $n = 1, 2, 3$ und im Limes $n \rightarrow \infty$ über der *Finite-Size*-Skalenvariablen $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{\tilde{r}_\infty}$ im dreidimensionalen Fall ($\epsilon = 1$). Ihre von der Komponentenzahl n unabhängige Asymptote (3.157a) im Grenzfall $\tilde{r}_\infty \rightarrow \infty$ ist als strichlierte Linie dargestellt. Der Wert der Skalenfunktion $\Theta_0(\tilde{r}_\infty)$ am kritischen Punkt $L/\xi_\infty = 0$ beträgt $\Theta_0(0) = (d-1)\Delta_C(d, n)$ mit den in Tabelle 2 unter (a) aufgeführten Werten der Casimir-Amplituden $\Delta_C(3, n)$ mit $n = 1, 2, 3$ und im Limes $n \rightarrow \infty$.

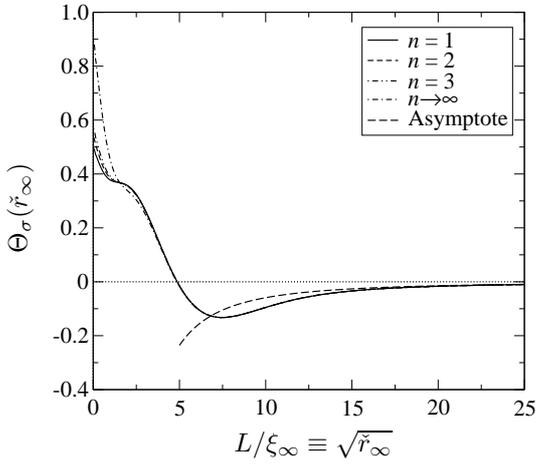


Abbildung 29: Auftragung der Skalenfunktion $\Theta_\sigma(\tilde{r}_\infty)$ des $O(n)$ -symmetrischen Modells mit $n = 1, 2, 3$ und im Limes $n \rightarrow \infty$ über der *Finite-Size*-Skalenvariablen $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{\tilde{r}_\infty}$ im Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen in drei Dimensionen ($\epsilon = 1, \sigma = 3$). Ihre ebenfalls von n unabhängige Asymptote (3.134b) mit $\epsilon = 1$ und $\sigma = 3$ ist als strichlierte Linie dargestellt. Der Wert der Skalenfunktion $\Theta_\sigma(\tilde{r}_\infty)$ am kritischen Punkt $L/\xi_\infty = 0$ ergibt sich zu $\Theta_\sigma(0) = (d + \omega_\sigma - 1)\Delta_{\sigma, C}(d, \sigma, n)$, mit der in Gleichung (3.133d) bis zur ersten Ordnung in ϵ angegebenen Amplituden $\Delta_{\sigma, C}(d, \sigma, n)$ mit $\epsilon = 1$ und $\sigma = 3$.

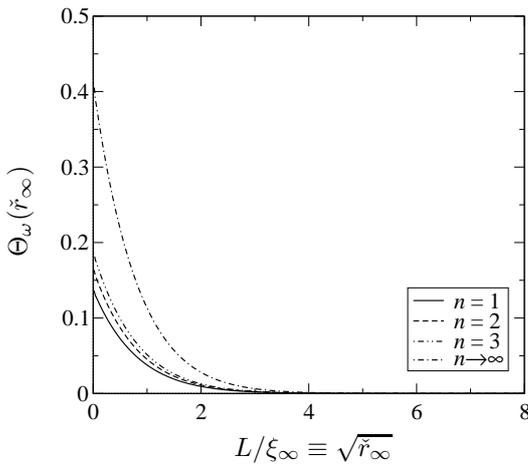


Abbildung 30: Auftragung der Skalenfunktion $\Theta_\omega(\tilde{r}_\infty)$ des dreidimensionalen $O(n)$ -symmetrischen Modells mit $n = 1, 2, 3$ und im Limes $n \rightarrow \infty$ über der *Finite-Size*-Skalenvariablen $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{\tilde{r}_\infty}$. Der Wert der Skalenfunktion $\Theta_\omega(\tilde{r}_\infty)$ am kritischen Punkt ergibt sich zu $\Theta_\omega(0) = (d + \omega - 1)\Delta_{\omega, C}(d, n)$, mit der Amplituden $\Delta_{\omega, C}(d, n)$ aus Gleichung (3.133e) mit $\epsilon = 1$.

Ordnungsparameter ($n = 1$) bei einer Filmdicke von $L = 50$, sowohl für den Fall rein kurzreichweitiger Wechselwirkungen $g_\sigma = 0$ als auch den langreichweitigen van-der-Waals-Fall mit $g_\sigma = 2/3$ über der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ aufgetragen ist. Das Skalenfeld der Wegner-Korrekturen wurde dabei auf den Wert $g_\omega = 1$ gesetzt.

Wie in den Auftragsungen der skalierten Exzess-Freien-Energie über L/ξ_∞ in den Abbildungen 26(a) und 26(b), äußert sich die Anwesenheit der van-der-Waals-artigen Wechselwirkung auch bei der skalierten Casimir-Kraft in linearer Auftragung (Abbildung 31(a)) lediglich in einer geringfügigen Verschiebung der Kurve gegenüber dem rein kurzreichweitigen Fall $g_\sigma = 0$. Da jedoch auch die skalierte Casimir-Kraft im rein kurzreichweitigen Fall exponentiell und in Anwesenheit der van der Waals-Wechselwirkung algebraisch und dabei in führender Ordnung proportional zu $(L/\xi_\infty)^{-2}$ abfällt, ist ihr qualitativ unterschiedliches Verhalten in diesen beiden Fällen in doppellogarithmischer Auftragung deutlich zu erkennen (Abbildung 31(b)). Ihre Asymptote (3.159a), die den algebraischen Abfall der skalierten Casimir-Kraft im langreichweitigen Fall bei großen Werten von L/ξ_∞ kennzeichnet und in doppellogarithmischer Auftragung einer Geraden mit negativer Steigung -2 entspricht, ist dabei als punktierte Linie eingezeichnet. Um die Abhängigkeit der Casimir-Kraft von der Filmdicke L im van der Waals-Fall zu verdeutlichen, finden sich in den Abbildungen 32(a) und 32(b) sowohl lineare als auch doppellogarithmische Auftragsungen der skalierten Casimir-Kraft über der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ für verschiedene Werte von L . In qualitativer Übereinstimmung mit dem Verhalten der skalierten Exzess-Freien-Energie in den Abbildungen 27(a) und 27(b), konvergieren die Verläufe mit zunehmender Filmdicke gegen die Skalenfunktion Θ_0 , da sowohl der Beitrag zur skalierten Casimir-Kraft von der van der Waals-Wechselwirkung als auch die Wegner-Korrekturen im Limes $L \rightarrow \infty$ bei konstant gehaltenem Wert der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ verschwinden.

3.4 Vergleich mit Monte Carlo-Simulationsdaten

In Referenz [67] ist es erstmals gelungen, die thermodynamische Casimir-Kraft in einem XY-Modell mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen auf einem dreidimensionalen einfach kubischen Gitter mit Filmgeometrie und offenen Randbedingungen an den Oberflächen des Films im Rahmen von Monte Carlo-Simulationen zu bestimmen. Die in [67] vorgestellte Methode, bei der die Casimir-Kraft durch die in Monte Carlo-Simulationen zugängliche innere Energie ausgedrückt wird, ist ohne weiteres auch auf Systeme mit anderen Randbedingungen, und dabei insbesondere auch auf Ising- und Heisenberg-Modelle anzuwenden. Um Monte Carlo-Daten für die Casimir-Kraft zu erhalten, die mit den in diesem Kapitel für den $O(n)$ -symmetrischen Fall mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen hergeleiteten Zweischleifenergebnissen verglichen werden können, sind unter Verwendung des Wolff-Algorithmus [84] Monte Carlo-Simulationen von Ising- und XY-Modellen auf dreidimensionalen einfach kubischen Gittern mit Filmgeometrie und peri-

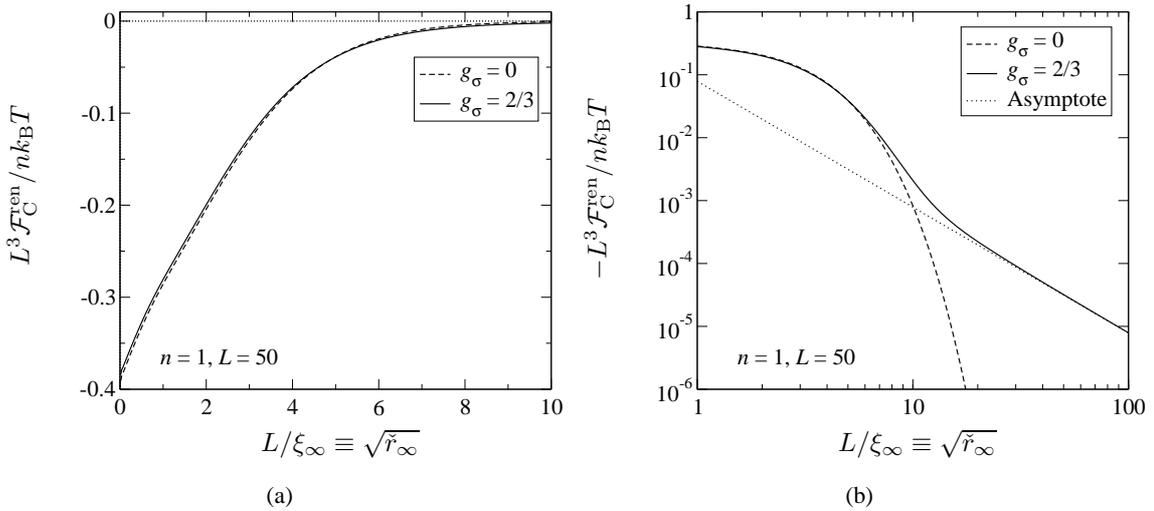


Abbildung 31: Auftragung der skalierten Casimir-Kraft $L^d \mathcal{F}_C^{\text{ren}}/n$ des dreidimensionalen $O(n)$ -symmetrischen Modells über der *Finite-Size*-Skalenvariablen $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{r_\infty}$ bei einer Filmdicke von $L = 50$, exemplarisch für den Fall $n = 1$ eines einkomponentigen Ordnungsparameters (a). Die durchgezogene Linie entspricht dem Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen ($\sigma = 3$) mit $g_\sigma = 2/3$, wohingegen der Verlauf der skalierten Casimir-Kraft im rein kurzreichweitigen Fall $g_\sigma = 0$ als strichlierte Linie dargestellt ist. Abbildung (b) zeigt eine doppellogarithmische Auftragung der in (a) abgebildeten Kurven. Die Asymptote der skalierten Casimir-Kraft im van-der-Waals-Fall, die in dieser Auftragung einer Geraden mit der Steigung -2 entspricht, ist als punktierte Linie eingezeichnet. Sie ergibt sich aus Gleichung (3.159a) durch Epsilon-Entwicklung bis zur ersten Ordnung.

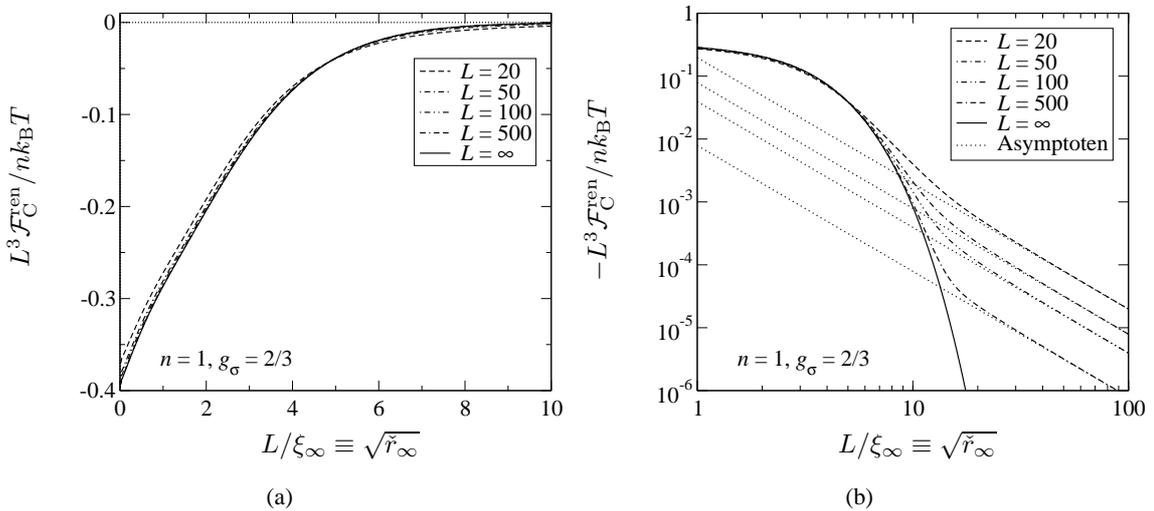


Abbildung 32: Auftragung der skalierten Casimir-Kraft $L^d \mathcal{F}_C^{\text{ren}}/nk_B T$ des dreidimensionalen $O(n)$ -symmetrischen Modells über der *Finite-Size*-Skalenvariablen $L/\xi_\infty \equiv \sqrt{r_\infty}$ für die Werte $L = 20, 50, 100, 500$ der Filmdicke L und im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$, exemplarisch für den Fall $n = 1$ eines einkomponentigen Ordnungsparameters (a). In Abbildung (b) finden sich dieselben Kurven wie auf der linken Seite, jedoch in doppellogarithmischer Auftragung. Die punktierten Linien entsprechen dabei den Asymptoten der skalierten Casimir-Kraft, die sich aus Gleichung (3.159a) durch Epsilon-Entwicklung bis zur ersten Ordnung für die verschiedenen Filmdicken L ergeben.

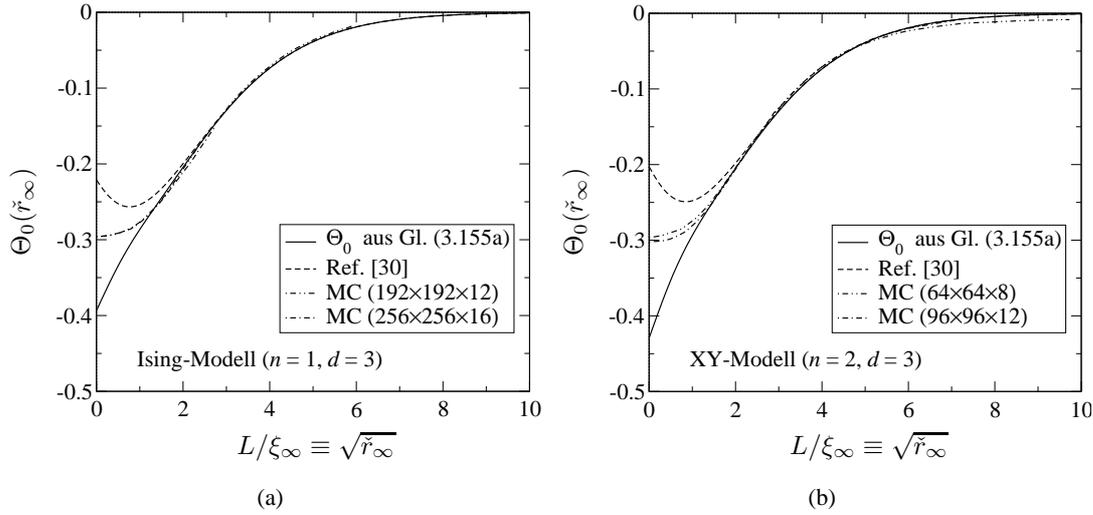


Abbildung 33: Auftragung der Skalenfunktion des dreidimensionalen Ising-Modells (a) und XY-Modells (b) mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen über der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ . Die durchgezogenen Linien entsprechen der in Zweischleifenordnung berechneten Skalenfunktion aus Gleichung (3.155a) mit $n = 1$ beziehungsweise $n = 2$ und $\epsilon = 1$. Die jeweiligen Skalenfunktionen aus Referenz [30] sind als strichlierte Linien dargestellt. Die strichpunktiierten Linien beschreiben die Verläufe der Skalenfunktionen, die im Rahmen von Monte Carlo-Simulationen für dreidimensionale Ising- und XY-Modelle mit den in Klammern angegebenen Systemgrößen erhalten wurden [34].

odischen Randbedingungen durchgeführt worden [34]. Die im Rahmen dieser Simulationen im Temperaturbereich $T \geq T_{c,\infty}$ ermittelten Skalenfunktionen sind — exemplarisch für jeweils zwei Systemgrößen — in den Abbildungen 33(a) und 33(b) über der *Finite-Size*-Skalenvariablen L/ξ_∞ aufgetragen. Ebenfalls dargestellt ist die Skalenfunktion Θ_0 aus Gleichung (3.155a) mit $n = 1$ beziehungsweise $n = 2$ und $\epsilon = 1$, und auch die entsprechenden Skalenfunktionen aus Referenz [30]. Der Vergleich der feldtheoretischen Resultate mit den Monte Carlo-Daten ergibt bei großen Werten von L/ξ_∞ insgesamt eine gute Übereinstimmung. In der Umgebung des kritischen Punktes $L/\xi_\infty = 0$ treten jedoch Abweichungen auf, die bei Annäherung an den kritischen Punkt zunehmen. Die Skalenfunktion Θ_0 aus dieser Arbeit reproduziert dabei sowohl im Ising-Fall $n = 1$ als auch im XY-Fall $n = 2$ den Verlauf der Monte Carlo-Daten in den Intervallen oberhalb von $L/\xi_\infty \cong 1.5$, während die jeweilige Skalenfunktion aus Referenz [30] bei diesen Werten von L/ξ_∞ bereits deutlich von den Simulationsdaten abweicht. Am kritischen Punkt sind die Abweichungen beider Skalenfunktionen von den Monte Carlo-Daten am größten. Der Wert der Skalenfunktion Θ_0 am kritischen Punkt, der in drei Dimensionen dem zweifachen der Casimir-Amplituden $\Delta_C(d = 3, n)$ entspricht, ergibt sich dabei aus den Monte Carlo-Daten sowohl im Ising-Fall als auch im XY-Fall ungefähr zu -0.3 , übereinstimmend mit dem bereits in Referenz [25] angegebenen Monte Carlo-Resultat für das dreidimensionale Ising-Modell (siehe Tabelle 2). Ein Vergleich dieser Werte mit dem exakten Wert im Limes $n \rightarrow \infty$, der gemäß Gleichung (2.105b) $2\Delta_C^{\text{SM}}(d = 3) = -0.3061\dots$ beträgt, deutet auf eine lediglich schwache

n -Abhängigkeit der Casimir-Amplituden $\Delta_C(d = 3, n)$ hin.

Obgleich die Untersuchung von Systemen mit langreichweitigen Wechselwirkungen im Rahmen von Monte Carlo-Simulationen andere Erfordernisse mit sich bringt, gibt es auch hierfür effiziente Verfahren, die bereits in zahlreichen Arbeiten bei der Untersuchung kritischer Phänomene eingesetzt worden sind [109, 110, 116–118]. Es wäre daher durchaus machbar und wünschenswert, die Ergebnisse dieser Arbeit über das Skalenverhalten der thermodynamischen Casimir-Kraft in $O(n)$ -symmetrischen Systemen mit langreichweitigen Wechselwirkungen im Rahmen solcher Simulationen zu überprüfen.

3.5 Vergleich mit Ergebnissen zum *Mean*-Sphärischen-Modell

In diesem letzten Abschnitt des Kapitels 3 sollen die im Rahmen der renormierungsgruppenverbesserten Störungstheorie in Zweischleifenordnung erhaltenen Ergebnisse für das $O(n)$ -symmetrische Modell mit den exakten Resultaten für das *Mean*-Sphärische-Modell, das unter den in dieser Arbeit getroffenen Annahmen äquivalent zu dessen Limes $n \rightarrow \infty$ ist, verglichen werden. Der Vergleich beschränkt sich dabei auf die Exzess-Freie-Energie, aus der sich ja letztlich die Casimir-Kraft ableiten lässt, und den im Rahmen beider Modelle hergeleiteten Zusammenhang zwischen den Skalenvariablen $\check{r}_\infty \equiv (L/\xi_\infty)^2$ und $\check{r}_L \equiv (L/\xi_L)^2$. Dieser wird nun zunächst betrachtet. Um die in Abschnitt 2.4.3 eingeführten Skalenfunktionen R_0 , R_σ und R_ω des *Mean*-Sphärischen-Modells mit den in Abschnitt 3.3.2 im Rahmen des ϕ^4 -Modells hergeleiteten Epsilon-Entwicklungen der Skalenfunktionen \mathcal{R}_0 , \mathcal{R}_σ und \mathcal{R}_ω vergleichen zu können, müssen erstere um $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen bis zur ersten Ordnung in ϵ entwickelt werden. Die Skalenfunktion $R_0 \equiv R_0(\check{r}_\infty, \check{h})$ liegt dabei in impliziter Form als Lösung von Gleichung (2.62a) vor, die sich in dem hier zu betrachtenden feldfreien Fall ($\check{h} = 0$) auf

$$\frac{2Q_{d,2}(R_0)}{R_0} = A_d \left(R_0^{(d-2)/2} - \check{r}_\infty^{(d-2)/2} \right), \quad (3.160)$$

mit $R_0 \equiv R_0(\check{r}_\infty, 0)$ reduziert. Führt man nun auf beiden Seiten dieser Gleichung eine Epsilon-Entwicklung durch, so folgt daraus in niedrigster Ordnung durch Koeffizientenvergleich, dass $R_0(\check{r}_\infty, 0) = \check{r}_\infty + O(\epsilon)$, da die Konstante A_d gemäß (siehe Gleichung (2.49))

$$A_{4-\epsilon} = \frac{1}{8\pi^2\epsilon} + O(\epsilon^0) \quad (3.161)$$

in vier Dimensionen einen Polterm aufweist, während auf der linken Seite von Gleichung (3.160) kein Term von der Ordnung ϵ^{-1} auftritt. Die nächste Ordnung in der Entwicklung von $R_0(\check{r}_\infty, 0)$ kann nun mit Hilfe eines Ansatzes von der Form $R_0(\check{r}_\infty, 0) = \check{r}_\infty + \epsilon \lambda(\check{r}_\infty)$ bestimmt werden. Einsetzen in Gleichung (3.160) und anschließende Epsilon-Entwicklung führt letztendlich auf

$$R_0(\check{r}_\infty, 0) = \check{r}_\infty + \epsilon \frac{16\pi^2 Q_{4,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} + o(\epsilon), \quad (3.162)$$

in Übereinstimmung mit der in Gleichung (3.100a) angegebenen Epsilon-Entwicklung der Skalenfunktion $\mathcal{R}_0(\check{r}_\infty)$ im Limes $n \rightarrow \infty$. Um die Epsilon-Entwicklungen von R_σ und R_ω zu erhalten, muss in den Ausdrücken für diese Skalenfunktionen nun lediglich R_0 durch ihre Epsilon-Entwicklung (3.162) ersetzt, und erneut entwickelt werden. Dabei folgt mit dem Ausdruck für die Skalenfunktion $R_\sigma(\check{r}_\infty, 0)$ im Fall¹¹ $d + \sigma \neq 6$ aus Gleichung (2.62b), dass

$$R_\sigma(\check{r}_\infty, 0) = \epsilon 16\pi^2 Q'_{4,\sigma}(\check{r}_\infty) + o(\epsilon), \quad (3.163)$$

und für die in Gleichung (2.62c) angegebene Skalenfunktion $R_\omega(\check{r}_\infty, 0)$,

$$R_\omega(\check{r}_\infty, 0) = \epsilon^2 \frac{128\pi^4 Q_{4,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} + o(\epsilon^2). \quad (3.164)$$

Vergleicht man diese Resultate mit den Epsilon-Entwicklungen (3.100b) und (3.100c) der Skalenfunktionen $\mathcal{R}_\sigma(\check{r}_\infty)$ und $\mathcal{R}_\omega(\check{r}_\infty)$ des $O(n)$ -symmetrischen Modells im Limes $n \rightarrow \infty$, so stellt man fest, dass diese Entwicklungen bei den Funktionen R_σ und \mathcal{R}_σ übereinstimmen. Bei den Epsilon-Entwicklungen der Funktionen R_ω und \mathcal{R}_ω hingegen treten Unterschiede auf, insbesondere da die Entwicklung von R_ω mit einem Term von der Ordnung ϵ^2 beginnt, während der erste Term in der Entwicklung von \mathcal{R}_ω von der Ordnung ϵ ist. Die Ursache für diese Diskrepanz liegt in unterschiedlich gewählten Normierungen des Wegner-Skalenfeldes g_ω im Rahmen des *Mean*-Sphärischen-Modells und des ϕ^4 -Modells, und kann durch eine Umdefinition des Wegner-Skalenfeldes und der Wegner-Skalenfunktion R_ω im *Mean*-Sphärischen-Modell gemäß $\hat{g}_\omega^{\text{SM}} \equiv 8\pi^2 \epsilon g_\omega^{\text{SM}}$ beziehungsweise $\hat{R}_\omega \equiv (8\pi^2 \epsilon)^{-1} R_\omega$ behoben werden. Die Epsilon-Entwicklung der Skalenfunktion \hat{R}_ω ergibt sich damit schließlich zu

$$\hat{R}_\omega(\check{r}_\infty, 0) = \epsilon \frac{16\pi^2 Q_{4,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} + o(\epsilon), \quad (3.165)$$

und findet sich nun in Übereinstimmung mit der Epsilon-Entwicklung (3.100c) der Skalenfunktion $\mathcal{R}_\omega(\check{r}_\infty)$ im Limes $n \rightarrow \infty$.

Es bleiben nun die Epsilon-Entwicklungen der Skalenfunktionen $Y_0(\check{r}_\infty, 0)$, $Y_\sigma(\check{r}_\infty, 0)$ und $Y_\omega(\check{r}_\infty, 0)$, die bei der Exzess-Freien-Energie im *Mean*-Sphärischen-Modell auftreten, herzuleiten. Der in Gleichung (2.87a) für die Skalenfunktion $Y_0(\check{r}_\infty, \check{h})$ angegebene Ausdruck reduziert sich dabei auf

$$Y_0(\check{r}_\infty, 0) = \frac{A_d}{2} \check{r}_\infty^{(d-2)/2} (R_0 - \check{r}_\infty) - \frac{A_d}{d} (R_0^{d/2} - \check{r}_\infty^{d/2}) - \frac{4\pi Q_{d+2,2}(R_0)}{R_0} \quad (3.166)$$

im feldfreien Fall ($\check{h} = 0$). Um diesen zu entwickeln, muss — unter Berücksichtigung der in Abschnitt 3.3.4 diskutierten Analytizitätseigenschaften der Funktion $Q_{d+2,2}(y)$ — lediglich die

¹¹Da um vier Dimensionen entwickelt wird, und der Wert des Parameters σ auf das Intervall $2 < \sigma < 4$ beschränkt ist, ist stets $d + \sigma > 6$. Somit muss zur Herleitung der Epsilon-Entwicklungen der Skalenfunktionen R_σ und Y_σ des *Mean*-Sphärischen-Modells, bei denen ja die Fälle $d + \sigma = 6$ und $d + \sigma \neq 6$ zu unterscheiden waren, auf die für den letztgenannten Fall erhaltenen Ausdrücke zurückgegriffen werden.

Skalenfunktion R_0 durch ihre Epsilon-Entwicklung (3.162) ersetzt, und dann erneut eine Entwicklung um $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen durchgeführt werden. Berücksichtigt man dabei nur Terme, die im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ langsamer als $O(\epsilon^2)$ gegen null gehen, so erhält man schließlich

$$Y_0(\check{r}_\infty, 0) = -\frac{1}{12\pi} \left[\left(\check{r}_\infty + \epsilon \frac{16\pi^2 Q_{4,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} \right)^{3/2} - \check{r}_\infty^{3/2} \right] - \frac{4\pi Q_{6,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} + \epsilon \left\{ \frac{4\pi R_{6,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} + \frac{8\pi^2 Q_{4,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} \left[\frac{\sqrt{\check{r}_\infty}}{4\pi} + \frac{Q_{4,2}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} \right] \right\} + O(\epsilon^2). \quad (3.167)$$

Auf gleiche Weise ergibt sich die Epsilon-Entwicklung der im Fall $d + \sigma \neq 6$ gültigen Skalenfunktion $Y_\sigma(\check{r}_\infty, 0)$ aus Gleichung (2.87b) zu

$$Y_\sigma(\check{r}_\infty, 0) = \Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(4, \sigma) + Q_{4,\sigma}(\check{r}_\infty) + \epsilon \left[\frac{16\pi^2 Q_{4,2}(\check{r}_\infty) Q'_{4,\sigma}(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty} - \Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}(1,0)}(4, \sigma) - R_{4,\sigma}(\check{r}_\infty) \right] + o(\epsilon). \quad (3.168)$$

Für die Epsilon-Entwicklung der Skalenfunktion $Y_\omega(\check{r}_\infty, 0)$ folgt durch Ersetzung von R_0 in Gleichung (2.87c) durch ihre Epsilon-Entwicklung (3.162) unmittelbar

$$Y_\omega(\check{r}_\infty, 0) = \epsilon^2 \frac{64\pi^4 Q_{4,2}^2(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty^2} + o(\epsilon^2). \quad (3.169)$$

Führt man die oben beschriebene Umdefinition des Wegner-Skalenfeldes im *Mean*-Sphärischen-Modell g_ω^{SM} durch, so geht die Skalenfunktion Y_ω in $\hat{Y}_\omega \equiv (8\pi^2\epsilon)^{-1}Y_\omega$ über. Ihre Epsilon-Entwicklung lautet dann

$$\hat{Y}_\omega(\check{r}_\infty, 0) = \epsilon \frac{8\pi^2 Q_{4,2}^2(\check{r}_\infty)}{\check{r}_\infty^2} + o(\epsilon), \quad (3.170)$$

und somit stimmen die Epsilon-Entwicklungen (3.167, 3.168, 3.170) der Skalenfunktionen der Exzess-Freien-Energie im *Mean*-Sphärischen-Modell allesamt mit den Epsilon-Entwicklungen der entsprechenden Skalenfunktionen im $O(n)$ -symmetrischen Modell, Gleichungen (3.125, 3.129, 3.131) im Limes $n \rightarrow \infty$, überein.

4 Zusammenfassung und abschließende Diskussion

In dieser Arbeit ist der Einfluss von langreichweitigen Wechselwirkungen auf das Skalenverhalten der Exzess-Freien-Energie und der thermodynamischen Casimir-Kraft in $O(n)$ -symmetrischen Systemen mit Filmgeometrie $L \times \infty^{d-1}$ und periodischen Randbedingungen untersucht worden. Dabei wurden Wechselwirkungen betrachtet, deren Paarpotentiale für große Abstände x asymptotisch proportional zu $x^{-(d+\sigma)}$ mit $2 < \sigma < 4$ abfallen. Wichtige Vertreter dieser Klasse langreichweitiger Wechselwirkungen sind die in Flüssigkeiten auftretenden van der Waals-Wechselwirkungen. Solche mit wachsendem Abstand schnell abfallenden langreichweitigen Wechselwirkungen haben keinen Einfluss auf das führende kritische Verhalten, da sie irrelevant im Sinne der Renormierungsgruppentheorie sind. Aus ihnen gehen lediglich Korrekturen dazu hervor. Diese Korrekturen führen jedoch zu Beiträgen in der Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft, die sowohl am kritischen Punkt $T = T_{c,\infty}$ als auch abseits davon auf großen Längenskalen L algebraisch in L abfallen, während diese Größen in Abwesenheit langreichweitiger Wechselwirkungen im Temperaturbereich $T > T_{c,\infty}$ durch einen auf der Skala der Korrelationslänge exponentiellen Zerfall gekennzeichnet sind. Aufgrunddessen dominieren in diesem Regime die Korrekturen aus dem langreichweitigen Anteil des Paarpotentials auf hinreichend großen Längenskalen L , und führen — verglichen mit dem Fall rein kurzreichweitiger Wechselwirkungen — zu einem qualitativ andersartigen Skalenverhalten der Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft.

Zur Untersuchung dieser Zusammenhänge ist in Kapitel 2 zunächst ein *Mean-Sphärisches*-Modell mit einer langreichweitigen Wechselwirkung betrachtet worden, das unter den in dieser Arbeit vorliegenden Voraussetzungen periodischer Randbedingungen und eines translationsinvarianten Paarpotentials äquivalent zum Limes $n \rightarrow \infty$ des n -Vektor-Modells ist. Im Rahmen dieses exakt lösbaren Modells wurden unter Beschränkung auf $2 < d < 4$ Dimensionen und den Temperaturbereich $T \geq T_{c,\infty}$ die *Finite-Size*-Skalenfunktionen der Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft einschließlich ihrer aus der langreichweitigen Wechselwirkung resultierenden Korrekturen und der Wegner-Korrekturen bis zur ersten Ordnung in den Skalenfeldern g_σ und g_ω hergeleitet. Der Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen in drei Dimensionen $d = \sigma = 3$ wurde dabei explizit behandelt. Für diesen Spezialfall konnten die *Finite-Size*-Skalenfunktionen der Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft und ihre Korrekturen allesamt

in geschlossen analytischer Form angegeben werden. Darüber hinaus hat sich herausgestellt, dass das Skalenverhalten der Beiträge von der langreichweitigen Wechselwirkung zur Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft im Fall $d + \sigma = 6$, unter den auch der Spezialfall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen in drei Dimensionen $d = \sigma = 3$ fällt, durch logarithmische Terme $\propto \log L$ modifiziert wird. Es zeigte sich, dass diese ihren Ursprung in der im *Mean-Sphärischen-Modell* bei $d + \sigma = 6$ auftretenden Entartung der Korrektorexponenten ω_σ und ω in Verbindung mit dem Beitrag der langreichweitigen Wechselwirkung zum Skalenfeld g_ω der Wegner-Korrektur haben.

In Kapitel 3 ist der allgemeine Fall eines n -komponentigen Ordnungsparameters behandelt worden. Dazu wurde ein feldtheoretisches ϕ^4 -Modell mit einer langreichweitigen Wechselwirkung aufgestellt, und dessen freie Energie unter Beschränkung auf den Temperaturbereich $T \geq T_{c,\infty}$ im Rahmen der renormierungsgruppenverbesserten Störungstheorie in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen in Zweischleifenordnung berechnet. Dabei stellte sich heraus, dass die konventionelle renormierungsgruppenverbesserte Störungstheorie für die freie Energie im Fall $L < \infty$ oberhalb von Zweischleifenordnung am kritischen Punkt $T = T_{c,\infty}$ aufgrund von Infrarotdivergenzen zusammenbricht, und zwar immer dann, wenn in Landau-Theorie bei $T = T_{c,\infty}$ eine Nullmode auftritt. Diese Problematik betrifft den Fall periodischer Randbedingungen und führt bereits in Zweischleifenordnung zu einem qualitativ falschen Verhalten der Exzess-Freien-Energie und der thermodynamischen Casimir-Kraft in der Umgebung des kritischen Punktes $T = T_{c,\infty}$. Der Zusammenbruch der Störungstheorie kann jedoch durch die von Diehl, Grüneberg und Shpot [33] beschriebene Umordnung der Störungstheorie, bei der zunächst die $(q_\perp \neq 0)$ -Moden des Ordnungsparameters ausintegriert wird, vermieden werden. Dies führt auf eine effektiv $(d-1)$ -dimensionale Feldtheorie für die $(q_\perp = 0)$ -Mode, die — zusammen mit dem Beitrag zur freien Energie von den $(q_\perp \neq 0)$ -Moden — in Zweischleifenordnung ausgewertet worden ist. Durch Umschreiben der sich daraus ergebenden Exzess-Freien-Energie auf die *Finite-Size*-SkalenvARIABLE L/ξ_∞ sind schließlich die *Finite-Size*-Skalenfunktionen der Exzess-Freien-Energie und der Casimir-Kraft und ihre Korrekturen bis zur ersten Ordnung in den Skalenfeldern g_σ und g_ω hergeleitet worden; der Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen in drei Dimensionen $d = \sigma = 3$ wurde dabei, wie auch beim *Mean-Sphärischen-Modell*, explizit behandelt. Ausgewertet am kritischen Punkt $T = T_{c,\infty}$, reproduziert die *Finite-Size*-Skalenfunktion \mathcal{Y}_0 der Exzess-Freien-Energie im $O(n)$ -symmetrischen Fall die erstmals in [33] bis zur Ordnung $\epsilon^{3/2}$ angegebene Epsilon-Entwicklung der Casimir-Amplituden Δ_C . Die entsprechenden Entwicklungen der Korrekturamplituden $\Delta_{\sigma,C}$ und $\Delta_{\omega,C}$ sind bis zur Ordnung ϵ hergeleitet worden.

Im letzten Abschnitt des Kapitels 3 ist schließlich innerhalb der Epsilon-Entwicklung gezeigt worden, dass die für das *Mean-Sphärische-Modell* erhaltenen exakten Ausdrücke aller in dieser Arbeit betrachteten Skalenfunktionen in Einklang stehen mit ihren im Rahmen der renormierungsgruppenverbesserten Störungstheorie in Zweischleifenordnung für den $O(n)$ -symmetrischen Fall

hergeleiteten Entwicklungen im Limes $n \rightarrow \infty$.

Anhand beider Modelle konnte gezeigt werden, dass die Korrekturen aus dem langreichweitigen Anteil des Paarpotentials Beiträge zur Exzess-Freien-Energie und zur Casimir-Kraft liefern, die im Temperaturbereich $T > T_{c,\infty}$ auf hinreichend großen Längenskalen L algebraisch in L abfallen. Die mit Hilfe phänomenologischer Skalenüberlegungen in Abschnitt 1.4 aufgestellte Hypothese, dass der Abfall dieser Größen bei konstant gehaltener Temperatur und zunehmender Filmdicke von der Form $f_{\text{ex}} \sim L^{-(d+\sigma-1)}$ beziehungsweise $\mathcal{F}_C \sim L^{-(d+\sigma)}$ ist, konnte dabei in beiden Modellen verifiziert werden. Diese Ergebnisse stehen in Einklang mit der Annahme, dass sich der Wert des in Abschnitt 1.4 eingeführten Exponenten ζ zu $\zeta = 2 - \eta$ ergibt. Sie gestatten es aber nicht, diese für den $O(n)$ -symmetrischen Fall mit $n < \infty$ endgültig zu verifizieren, da die in dieser Arbeit behandelte Ordnung der Störungstheorie nicht ausreicht, den im Fall $n < \infty$ nicht-trivialen Wert des Korrelationsexponenten η und seine n -Abhängigkeit zu reproduzieren; dasselbe gilt für den Wert des Wegner-Exponenten ω . Hierzu müssten störungstheoretische Berechnungen von höherer Ordnung angestellt werden. Eine weitere Möglichkeit, die in dieser Arbeit erhaltenen Ergebnisse zu verifizieren, bieten Monte Carlo-Simulationen, mit denen zur Untersuchung des thermodynamischen Casimir-Effekts in Systemen mit rein kurzreichweitigen Wechselwirkungen bereits wichtige Vergleichsergebnisse erhalten werden konnten [25, 34, 65–67]. Der in Abschnitt 3.4 durchgeführte Vergleich der Skalenfunktion Θ_0 der thermodynamischen Casimir-Kraft mit Monte Carlo-Simulationsdaten für das dreidimensionale Ising- und XY-Modell mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen ergab eine insgesamt gute Übereinstimmung.

Die Fragestellungen, die in dieser Arbeit anhand von Systemen mit periodischen Randbedingungen und unter Beschränkung auf die ungeordnete Phase ($T \geq T_{c,\infty}$) diskutiert worden sind, lassen Raum für zahlreiche Erweiterungen: Wünschenswert wäre es dabei zum einen, den Temperaturbereich der geordneten Phase ($T < T_{c,\infty}$) miteinzubeziehen; im Rahmen des exakt lösbaren und mathematisch kontrollierten *Mean*-Sphärischen-Modells ist dies problemlos durchführbar. In diesem Modell ist ein Phasenübergang im Film ($L > \infty$) bei einer kritischen Temperatur $T_{c,L} > 0$ jedoch nur in $d > 3$ Dimensionen zu beobachten, während in drei Dimensionen $T_{c,L} = 0$ ist.

Zum anderen wäre es interessant — anstelle von periodischen Randbedingungen — Randbedingungen zu betrachten, die die Situation im Experiment zutreffender beschreiben. Im Hinblick auf die Realisierung des thermodynamischen Casimir-Effekts in suprafluiden ^4He -Filmen wären dies beispielsweise Dirichlet-Randbedingungen. Obgleich einige der in dieser Arbeit erhaltenen Ergebnisse auch im Fall anderer Randbedingungen Gültigkeit besitzen, wie beispielsweise der in Anwesenheit langreichweitiger Wechselwirkungen zu beobachtende algebraische Abfall der thermodynamischen Casimir-Kraft auf großen Längenskalen, so ist die Wahl der richtigen Randbedingungen bei der Berechnung universeller Größen unerlässlich.

A Anhang

A.1 Fouriertransformation des Paarpotentials

In diesem Abschnitt soll die Gitter-Fouriertransformierte (2.7) des in Abschnitt 2.2 eingeführten langreichweitigen Paarpotentials (2.6) berechnet und ihr Verhalten im Infrarotlimites $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}$ untersucht werden. Dazu wird zunächst angenommen, dass die Gitterkonstante entlang aller Hauptachsen des d -dimensionalen hyperkubischen Gitters a betrage und die Ausdehnung des Gitters in x_α -Richtung einer ungeraden Anzahl $2N_\alpha + 1$ ($N_\alpha \in \mathbb{N}$) von Elementarzellen entspreche. Somit ist $L_\alpha = (2N_\alpha + 1)a$ für alle $\alpha = 1, \dots, d$.

Unter diesen Voraussetzungen kann die Gitter-Fouriertransformierte (2.7) des Paarpotentials $J(\mathbf{x})$ geschrieben werden als

$$\tilde{J}(\mathbf{q}) = \sum_{j_1=-N_1}^{N_1} \cdots \sum_{j_d=-N_d}^{N_d} J(a\mathbf{j}) e^{-ia\mathbf{q}\cdot\mathbf{j}}. \quad (\text{A.1})$$

Dabei bezeichnet $\mathbf{j} \equiv (j_1, \dots, j_d)$ den Vektor der Summationsindizes und $\mathbf{q} \equiv (q_1, \dots, q_d)$ den Wellenzahlvektor, der ausschließlich Werte innerhalb der ersten Brillouin-Zone annimmt. In dem hier betrachteten Fall periodischer Randbedingungen ist daher $q_\alpha = 2\pi\nu_\alpha/L_\alpha$ mit $\nu_\alpha \in \{-N_\alpha, -N_\alpha + 1, \dots, N_\alpha\}$ für alle $\alpha = 1, \dots, d$.

Setzt man in Gleichung (A.1) nun das Paarpotential (2.6) ein, so folgt unmittelbar für die Gitter-Fouriertransformierte des kurzreichweitigen Anteils $J_1(\mathbf{x})$,

$$\tilde{J}_1(\mathbf{q}) = 2J_1 \sum_{\alpha=1}^d \cos(\hat{q}_\alpha), \quad (\text{A.2})$$

wobei $\hat{q}_\alpha \equiv aq_\alpha$ der α -ten Komponente des dimensionslosen Wellenzahlvektors $\hat{\mathbf{q}} \equiv a\mathbf{q}$ entspricht. Eine Entwicklung dieses Ausdrucks um $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ ergibt das für hyperkubische Systeme mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen bekannte Ergebnis (siehe z.B. Gleichung (4.31) in [119])

$$\tilde{J}_1(\mathbf{q}) = 2J_1 \left\{ d - \frac{1}{2}\hat{q}^2 + \frac{1}{24} \sum_{\alpha=1}^d [\hat{q}_\alpha^4 + O(\hat{q}_\alpha^6)] \right\} \quad (\text{A.3})$$

bis zur vierten Ordnung in den Impulskomponenten \hat{q}_α .

Ausgehend von Gleichung (A.1) ergibt sich die Gitter-Fouriertransformierte der effektiven langreichweitigen Wechselwirkung (2.5) zu

$$\tilde{J}_{2,\text{eff}}(\mathbf{q}) = \sum_{j \in \mathbb{Z}^d} J_2(a\mathbf{j}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{j}}, \quad (\text{A.4})$$

da über aller Gitterplätze und ihre periodischen Bilder zu summieren ist. Um diesen Ausdruck auszuwerten, wird die Identität (siehe z.B. Gleichung (2) in § 2.4 in [120])

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} \delta(t - aj) = \frac{1}{a} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i m t / a} \quad (\text{A.5})$$

mit der Diracschen Delta-Funktion $\delta(t)$ verwendet. Wendet man beide Seiten von Gleichung (A.5) auf eine auf der reellen Achse definierte Testfunktion $f(t)$ an, folgt nach Integration über die Variable t die Poissonsche Summationsformel (siehe z.B. Gleichung (4.8.28) in § 4.8 in [121])

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} f(aj) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{a} f(t) e^{2\pi i m t / a}. \quad (\text{A.6})$$

Mit deren Hilfe kann die Gitter-Fouriertransformierte (A.4) der effektiven langreichweitigen Wechselwirkung umgeformt werden in

$$\tilde{J}_{2,\text{eff}}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{d^d \mathbf{x}}{a^d} J_2(\mathbf{x}) e^{-i(\mathbf{q} - 2\pi \mathbf{m} / a) \cdot \mathbf{x}}. \quad (\text{A.7})$$

Während der ($\mathbf{m} = \mathbf{0}$)-Term auf der rechten Seite von Gleichung (A.7) im \mathbf{q} -Raum isotrop ist, liefern die von der Struktur des zugrundeliegenden Gitters abhängigen Terme mit $\mathbf{m} \neq \mathbf{0}$ sowohl isotrope als auch anisotrope Beiträge zu $\tilde{J}_{2,\text{eff}}(\mathbf{q})$. Diese Anisotropien führen zusammen mit den aus der Entwicklung (A.3) von $\tilde{J}_1(\mathbf{q})$ resultierenden $O(\hat{q}_\alpha^4)$ -Termen, zu dem von null verschiedenen Koeffizienten $b_{4,1}$ in der Entwicklung der Funktion $\Omega(\mathbf{q})$ um $\mathbf{q} = \mathbf{0}$, Gleichung (2.10).

Ein Hauptanliegen dieser Arbeit ist die Untersuchung des Einflusses van-der-Waals-artiger Wechselwirkungen auf kritische Flüssigkeiten. Ausgehend von dem auf der Grundlage eines hyperkubischen Gitters erhaltenen Ausdruck (A.7), lässt sich der Fall einer einfachen isotropen Flüssigkeit durch den Übergang zum Kontinuumslimites $a \rightarrow 0$ beschreiben. In diesem Grenzfall verschwinden die Terme mit $\mathbf{m} \neq \mathbf{0}$ gemäß des Riemann-Lebesgueschen Lemmas und man erhält

$$a^d \tilde{J}_{2,\text{eff}}(\mathbf{q}) \xrightarrow{a \rightarrow 0} \tilde{J}_{2,\text{eff}}^{(\text{kont})}(\mathbf{q}) \equiv \int_{\mathbb{R}^d} d^d \mathbf{x} J_2(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}. \quad (\text{A.8})$$

Die in den langreichweitigen Anteil des Paarpotentials (2.6) eingehende Konstante J_2 muss daher gemäß $J_2 \mapsto a^d J_2^{(\text{kont})}$ mit $J_2^{(\text{kont})} > 0$ umskaliert werden, damit der Kontinuumslimites zu einem wohldefinierten Ergebnis führt. Die Fouriertransformierte $\tilde{J}_{2,\text{eff}}^{(\text{kont})}(\mathbf{q})$ soll nun berechnet und ihr Verhalten in der Umgebung des Punktes $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ untersucht werden. Dazu wird das Integral auf der rechten Seite von Gleichung (A.8) zunächst gemäß

$$\int_{\mathbb{R}^d} d^d \mathbf{x} = \int_0^\infty dx x^{d-1} \int d\Omega_d \quad (\text{A.9})$$

auf hypersphärische Koordinaten $(x, \vartheta_1, \dots, \vartheta_{d-2}, \varphi)$ umgeschrieben. Die Winkelintegrationen $\int d\Omega_d$ erstrecken sich dabei über die Oberfläche einer d -dimensionalen Einheitskugel und man erhält im Fall $d \geq 2$

$$\int d\Omega_d = \int_0^{2\pi} d\varphi \prod_{j=1}^{d-2} \int_0^\pi d\vartheta_j \sin^{d-j-1}(\vartheta_j). \quad (\text{A.10})$$

Wird o.B.d.A. angenommen, dass der Wellenzahlvektor \mathbf{q} entlang der x_1 -Richtung verlaufe, ergibt sich das in den Integranden auf der rechten Seite von Gleichung (A.8) eingehende Skalarprodukt zu $\mathbf{q} \cdot \mathbf{x} = qx \cos(\vartheta_1)$. Die Winkelintegrationen können nun ausgeführt werden und man erhält

$$\int d\Omega_d e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} = (2\pi)^{d/2} (qx)^{1-d/2} J_{(d-2)/2}(qx) \quad (\text{A.11})$$

mit der Bessel-Funktion erster Art $J_n(x)$. Die verbliebene Integration über die radiale Koordinate x ergibt letztendlich

$$\tilde{J}_{2,\text{eff}}^{(\text{kont})}(\mathbf{q}) = J_2^{(\text{kont})} 2\pi^{d/2} \left(\frac{q}{2\rho_0} \right)^{\sigma/2} \frac{K_{\sigma/2}(q\rho_0)}{\Gamma\left(\frac{d+\sigma}{2}\right)}. \quad (\text{A.12})$$

Dabei bezeichnet $K_n(x)$ die modifizierte Bessel-Funktion zweiter Art, die nun, um das Verhalten von $\tilde{J}_{2,\text{eff}}^{(\text{kont})}(\mathbf{q})$ im Infrarotlimites $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}$ herzuleiten, für kleine Werte ihres Arguments entwickelt wird. Dabei ist zu beachten, dass der Index $n = \sigma/2$ ausschließlich nicht-ganzzahlige Werte annimmt, da $2 < \sigma < 4$. In diesem Fall folgt mittels der Potenzreihendarstellung der Bessel-Funktion $K_n(x)$ mit $n \notin \mathbb{Z}$ (siehe z.B. Gleichungen (8.445) und (8.485) in [99])

$$\frac{\rho_0^\sigma \tilde{J}_{2,\text{eff}}^{(\text{kont})}(\mathbf{q})}{J_2^{(\text{kont})}} \Big|_{\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}} = \hat{b}_0 + \hat{b}_2 (q\rho_0)^2 - \hat{b}_\sigma (q\rho_0)^\sigma + \hat{b}_4 (q\rho_0)^4 + O(q^{\sigma+2}, q^6) \quad (\text{A.13a})$$

mit den Entwicklungskoeffizienten ($m \in \mathbb{N}_0$)

$$\hat{b}_{2m} = \frac{4^{-m} \pi^{(d+2)/2}}{m! \sin\left(\frac{\pi\sigma}{2}\right) \Gamma\left(\frac{d+\sigma}{2}\right) \Gamma\left(m+1-\frac{\sigma}{2}\right)}, \quad \hat{b}_\sigma = \frac{\pi^{d/2} \Gamma\left(-\frac{\sigma}{2}\right)}{2^\sigma \Gamma\left(\frac{d+\sigma}{2}\right)}. \quad (\text{A.13b})$$

Beschränkt man sich auf den Spezialfall $J_1 = 0$, in dem der kurzreichweitige Anteil $J_1(x)$ des Paarpotentials (2.6) nicht berücksichtigt wird, tragen lediglich die in den Gleichungen (A.13) angegebenen Terme zur Gitter-Fouriertransformierten $\tilde{J}(\mathbf{q})$ bei. Im Kontinuumslimites gilt somit

$$\tilde{J}^{(\text{kont})}(\mathbf{q}) \Big|_{\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}} = \tilde{J}^{(\text{kont})}(\mathbf{0}) - K k_{\text{BT}} \left[q^2 - bq^\sigma + b_4 q^4 + O(q^{\sigma+2}, q^6) \right] \quad (\text{A.14a})$$

mit den Größen

$$\tilde{J}^{(\text{kont})}(\mathbf{0}) = J_2^{(\text{kont})} \frac{\hat{b}_0}{\rho_0^\sigma}, \quad K = -\frac{J_2^{(\text{kont})}}{k_{\text{BT}}} \hat{b}_2 \rho_0^{2-\sigma}, \quad (\text{A.14b})$$

und den von der Dimensionalität d unabhängigen Entwicklungskoeffizienten

$$b = -\frac{\hat{b}_\sigma}{\hat{b}_2} \rho_0^{\sigma-2}, \quad b_4 = \frac{\hat{b}_4}{\hat{b}_2} \rho_0^2. \quad (\text{A.14c})$$

Im Fall nicht-retardierter van der Waals-Wechselwirkungen in drei Dimensionen folgt aus den Gleichungen (A.14b) und (A.14c) mit $d = \sigma = 3$ unmittelbar

$$\tilde{J}^{(\text{kont})}(\mathbf{0}) = J_2^{(\text{kont})} \frac{\pi^2}{4\rho_0^3}, \quad K = -\frac{J_2^{(\text{kont})}}{k_B T} \frac{\pi^2}{8\rho_0}, \quad b = \frac{2\rho_0}{3}, \quad b_4 = \frac{\rho_0^2}{4}. \quad (\text{A.15})$$

Die zum Entwicklungskoeffizienten $b_{4,1}$ proportionalen Anisotropien von der Ordnung q_α^4 in Gleichung (2.10) treten im Kontinuumsimes nicht auf. In diesem Grenzfall ist somit $b_{4,1} = 0$.

A.2 Berechnung der Modensummen $W_{d,\Omega}(r|L)$ und $U_{d,\Omega}(r|L)$

Im Folgenden sollen die Modensummen $U_{d,\Omega}(r|L)$ und $W_{d,\Omega}(r|L)$, die bei der exakten Lösung des *Mean-Sphärischen-Modells* in Kapitel 2 auftreten, berechnet werden. Dazu wird wiederum die in Gleichung (A.5) angegebene Identität benutzt. Wendet man beide Seiten dieser Gleichung auf eine Testfunktion $f(t)$ an, deren Definitionsbereich auf das Intervall $[-\pi, \pi]$ beschränkt ist, folgt nach Integration über die Variable t

$$\sum_{j=-N}^N f(aj) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dt}{a} f(t) e^{2\pi i m t / a}, \quad (\text{A.16})$$

wobei $Na = \pi$. Mit Hilfe dieses Zusammenhangs können die auf das allseits endliche System bezogenen Modensummen $U_{d,\Omega}(r|L)$ und $W_{d,\Omega}(r|L)$, Gleichungen (2.19) und (2.22), umgeformt werden in

$$U_{d,\Omega}(r|L) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^d} \int_{\mathbf{q} \in \text{BZ}_1}^{(d)} \log(r + \Omega(\mathbf{q})) \prod_{\alpha=1}^d e^{i m_\alpha q_\alpha L_\alpha} \quad (\text{A.17a})$$

und

$$W_{d,\Omega}(r|L) = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^d} \int_{\mathbf{q} \in \text{BZ}_1}^{(d)} \frac{1}{r + \Omega(\mathbf{q})} \prod_{\alpha=1}^d e^{i m_\alpha q_\alpha L_\alpha} \quad (\text{A.17b})$$

mit den Integrationen

$$\int_{\mathbf{q} \in \text{BZ}_1}^{(d)} \equiv \prod_{\alpha=1}^d \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq_\alpha}{2\pi} \quad (\text{A.18})$$

über die erste Brillouin-Zone des hyperkubischen Gitters. Wird in den Gleichungen (A.17) nun der Limes $L_\alpha \rightarrow \infty$ für alle $\alpha > 1$ vollzogen und die Filmdicke L_1 auf den endlichen Wert $L_1 \equiv L$ gesetzt, verschwinden dort gemäß des Riemann-Lebesgueschen Lemmas alle Terme mit $m_\alpha \neq 0$ für $\alpha > 1$. Spaltet man den von der Filmdicke L unabhängigen ($\mathbf{m} = \mathbf{0}$)-Term ab, so entspricht dies einer Zerlegung der Modensummen $U_{d,\Omega}(r|L)$ und $W_{d,\Omega}(r|L)$ von der Form

$$U_{d,\Omega}(r|L) = U_{d,\Omega}(r|\infty) + \Delta U_{d,\Omega}(r|L) \quad (\text{A.19a})$$

beziehungsweise

$$W_{d,\Omega}(r|L) = W_{d,\Omega}(r|\infty) + \Delta W_{d,\Omega}(r|L) \quad (\text{A.19b})$$

mit den *Bulk*-Anteilen

$$U_{d,\Omega}(r|\infty) = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q} \in \text{BZ}_1}^{(d)} \log(r + \Omega(\mathbf{q})) \quad (\text{A.20a})$$

und

$$W_{d,\Omega}(r|\infty) = \int_{\mathbf{q} \in \text{BZ}_1}^{(d)} \frac{1}{r + \Omega(\mathbf{q})}, \quad (\text{A.20b})$$

sowie den im Grenzfall $L \rightarrow \infty$ verschwindenden *Finite-Size*-Anteilen

$$\Delta U_{d,\Omega}(r|L) = \sum_{m=1}^{\infty} \int_{\mathbf{q} \in \text{BZ}_1}^{(d)} \cos(q_1 m L) \log(r + \Omega(\mathbf{q})) \quad (\text{A.20c})$$

und

$$\Delta W_{d,\Omega}(r|L) = \sum_{m=1}^{\infty} \int_{\mathbf{q} \in \text{BZ}_1}^{(d)} \frac{2 \cos(q_1 m L)}{r + \Omega(\mathbf{q})}. \quad (\text{A.20d})$$

Diese verschiedenen Beiträge sollen nun berechnet werden. Die Funktion $\Omega(\mathbf{q})$ wird dabei durch die ersten beiden Terme ihrer in Gleichung (2.10) angegebenen Entwicklung in der Umgebung des Punktes $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ ersetzt. Diese lauten $q^2 - b q^\sigma$ mit $2 < \sigma < 4$ und berücksichtigen das durch den q^2 -Term getragene führende kritische Verhalten sowie die erste Korrektur dazu, die ihren Ursprung im langreichweitigen Anteil des Paarpotentials (2.6) hat. Da das kritische Verhalten durch die Asymptotik der in die Modensummen $U_{d,\Omega}(r|L)$ und $W_{d,\Omega}(r|L)$ eingehenden Ausdrücke $\log(r + \Omega(\mathbf{q}))$ beziehungsweise $(r + \Omega(\mathbf{q}))^{-1}$ im Infrarotlimes $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}$ bestimmt wird, ist es gerechtfertigt, diese Ausdrücke im Parameter b zu linearisieren. Dies führt zu einer Entwicklung der Modensummen von der Form

$$U_{d,\Omega}(r|L) = U_{d,\Omega}^{(0)}(r|L) + b U_{d,\Omega}^{(1)}(r|L) + O(b^2) \quad (\text{A.21a})$$

beziehungsweise

$$W_{d,\Omega}(r|L) = W_{d,\Omega}^{(0)}(r|L) + b W_{d,\Omega}^{(1)}(r|L) + O(b^2). \quad (\text{A.21b})$$

Entsprechendes gilt für die in den Gleichungen (A.20) angegebenen *Bulk*- und *Finite-Size*-Anteile, die nun berechnet werden sollen. Anstatt jedoch diese Ausdrücke für beliebige Werte ihres Argumentes r auszuwerten, reicht es aus, sich auf ihr Verhalten in der Umgebung des Punktes $r = 0$ zu beschränken. Dieses Verhalten soll zunächst für den *Bulk*-Anteil (A.20b) der Modensumme $W_{d,\Omega}(r|L)$ herausgearbeitet werden. Dazu kann in einem ersten Schritt das Volumen der \mathbf{q} -Integrationen in Gleichung (A.20b), dieses entspricht der ersten Brillouin-Zone die im vorliegenden Fall die Form eines Hyperkubus hat, durch eine Hypersphäre mit dem Radius Λ ersetzt werden. Das resultierende Integral kann dann unter Verwendung der Mellin-Transformation ausgewertet und sein asymptotisches Verhalten im Limes $r \rightarrow 0$ bestimmt werden. Unter der Voraussetzung, dass $2 < d < 4$, $2 < \sigma < 4$ und $d + \sigma \neq 6$ ergeben sich dabei die Terme in der Entwicklung des *Bulk*-Anteils $W_{d,\Omega}(r|\infty)$ um $b = 0$, Gleichung (A.21b) im Limes $L \rightarrow \infty$, zu (siehe § 2.2 und Anhang A2 in [97])

$$W_{d,\Omega}^{(0)}(r|\infty) \underset{r \rightarrow 0}{\approx} W_{d,\Omega}^{(0)}(0|\infty) - A_d r^{(d-2)/2} + w_d^{(\Lambda)} r \quad (\text{A.22a})$$

und (siehe Anhang H in [19])

$$W_{d,\Omega}^{(1)}(r|\infty) \underset{r \rightarrow 0}{\approx} W_{d,\Omega}^{(1)}(0|\infty) - B_{d,\sigma} r^{(d+\sigma-4)/2} + w_{d,\sigma}^{(\Lambda)} r \quad (\text{A.22b})$$

mit den in den Gleichungen (2.35) definierten universellen Konstanten A_d und $B_{d,\sigma}$. Die Koeffizienten $w_d^{(\Lambda)}$ und $w_{d,\sigma}^{(\Lambda)}$ hingegen hängen explizit vom Abschneideimpuls Λ ab, und sind damit nicht-universell.

Zur Berechnung des *Finite-Size*-Anteils der Modensumme $W_{d,\Omega}(r|L)$ werden auf der rechten Seite von Gleichung (A.20d) zunächst die sich über die erste Brillouin-Zone des hyperkubischen Gitters erstreckenden \mathbf{q} -Integrationen auf den gesamten \mathbb{R}^d ausgedehnt. Diese Approximation ändert nicht das führende kritische Verhalten, sondern lediglich Terme höherer Ordnung beziehungsweise reguläre Anteile, die unerheblich für das kritische Verhalten sind. $\Delta W_{d,\Omega}(r|L)$ wird nun gemäß

$$\Delta W_{d,\Omega}(r|L) = \Delta W_{d,\Omega}^{(0)}(r|L) + b \Delta W_{d,\Omega}^{(1)}(r|L) + O(b^2) \quad (\text{A.23})$$

im Parameter b linearisiert. Die Terme in dieser Entwicklung ergeben sich im Rahmen der hier verwendeten Näherung zu

$$\Delta W_{d,\Omega}^{(0)}(r|L) \approx \sum_{m=1}^{\infty} \int_{\mathbf{q}}^{(d)} \frac{2 \cos(q_1 mL)}{r + q^2} \quad (\text{A.24a})$$

und

$$\Delta W_{d,\Omega}^{(1)}(r|L) \approx \sum_{m=1}^{\infty} \int_{\mathbf{q}}^{(d)} \frac{2q^\sigma \cos(q_1 mL)}{(r + q^2)^2}. \quad (\text{A.24b})$$

Diese Ausdrücke sollen nun weiter umgeformt und mit Hilfe der Funktion

$$Q_{d,\sigma}(y) \equiv y \sum_{m=1}^{\infty} \int_{\mathbf{q}}^{(d)} \frac{q^{\sigma-2} \cos(q_1 m)}{y + q^2} \quad (\text{A.25})$$

dargestellt werden. Dazu wird in den Integralen auf den rechten Seiten der Gleichungen (A.24) zunächst für alle Integrationsvariablen q_α ($\alpha = 1, \dots, d$) die Substitution $q_\alpha \mapsto q_\alpha/L$ vorgenommen. Führt man nun die Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ ein, folgt für Gleichung (A.24a) unmittelbar

$$\Delta W_{d,\Omega}^{(0)}(r|L) \approx \frac{2Q_{d,2}(rL^2)}{rL^d}, \quad (\text{A.26a})$$

und Gleichung (A.24b) ergibt sich zu

$$\Delta W_{d,\Omega}^{(1)}(r|L) \approx 2L^{-(d+\sigma-4)} Q'_{d,\sigma}(rL^2), \quad (\text{A.26b})$$

durch Umformung des Integranden unter Verwendung der Identität

$$\frac{q^\sigma}{(r + q^2)^2} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{rq^{\sigma-2}}{r + q^2} \right). \quad (\text{A.27})$$

Mit Hilfe des in Gleichung (2.24) angegebenen Zusammenhangs zwischen den Modensummen $W_{d,\Omega}$ und $U_{d,\Omega}$ können nun durch Integration des *Bulk*- und *Finite-Size*-Anteils der Modensumme $W_{d,\Omega}(r|L)$ die entsprechenden Anteile der Modensumme $U_{d,\Omega}(r|L)$ berechnet werden. Demgemäß gilt für ihren *Bulk*-Anteil

$$U_{d,\Omega}(r|\infty) = U_{d,\Omega}(0|\infty) + \frac{1}{2} \int_0^r dx W_{d,\Omega}(x|\infty). \quad (\text{A.28})$$

Setzt man in diese Gleichung die für die Terme in der Entwicklung (A.21b) des *Bulk*-Anteils $W_{d,\Omega}(x|\infty)$ um $b = 0$ erhaltenen Ausdrücke (A.22) ein, so ergeben sich die Beiträge in der entsprechenden Entwicklung von $U_{d,\Omega}(r|\infty)$, Gleichung (A.21a) im Limes $L \rightarrow \infty$, nach Ausführen der Integrationen zu

$$U_{d,\Omega}^{(0)}(r|\infty) \underset{r \rightarrow 0}{\approx} U_{d,\Omega}^{(0)}(0|\infty) + \frac{1}{2} W_{d,\Omega}^{(0)}(0|\infty) r - \frac{A_d}{d} r^{d/2} + \frac{w_d^{(\Lambda)}}{4} r^2 \quad (\text{A.29a})$$

und

$$U_{d,\Omega}^{(1)}(r|\infty) \underset{r \rightarrow 0}{\approx} U_{d,\Omega}^{(1)}(0|\infty) + \frac{1}{2} W_{d,\Omega}^{(1)}(0|\infty) r - \frac{B_{d,\sigma}}{d + \sigma - 2} r^{(d+\sigma-2)/2} + \frac{w_{d,\sigma}^{(\Lambda)}}{4} r^2. \quad (\text{A.29b})$$

Den Gleichungen (2.24) und (A.19) entsprechend, gilt für den *Finite-Size*-Anteil der Modensumme $U_{d,\Omega}(r|L)$

$$\Delta U_{d,\Omega}(r|L) = \Delta U_{d,\Omega}(0|L) + \frac{1}{2} \int_0^r dx \Delta W_{d,\Omega}(x|L), \quad (\text{A.30a})$$

wobei

$$\Delta U_{d,\Omega}(r|L) = \Delta U_{d,\Omega}^{(0)}(r|L) + b \Delta U_{d,\Omega}^{(1)}(r|L) + O(b^2). \quad (\text{A.30b})$$

Der *Finite-Size*-Anteil $\Delta W_{d,\Omega}(x|L)$ wird nun durch seine Entwicklung (A.23) um $b = 0$ mit den als Koeffizienten in dieser Entwicklung auftretenden Ausdrücken (A.26) ersetzt. Mit der Eigenschaft der Funktion $Q_{d,2}(y)$,

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{Q_{d+2,2}(y)}{y} \right) = -\frac{Q_{d,2}(y)}{4\pi y}, \quad (\text{A.31})$$

die anhand ihrer Definitionsgleichung (A.25) nachvollzogen werden kann, lässt sich das Integral des für $\Delta W_{d,\Omega}^{(0)}(x|L)$ hergeleiteten Ausdrucks (A.26a) sofort angeben, und man erhält

$$\Delta U_{d,\Omega}^{(0)}(r|L) \approx \Delta U_{d,\Omega}^{(0)}(0|L) - \left(1 - \lim_{r \rightarrow 0} \right) \frac{4\pi Q_{d+2,2}(rL^2)}{rL^{d+2}}. \quad (\text{A.32})$$

Die r -unabhängige Konstante

$$\Delta U_{d,\Omega}^{(0)}(0|L) \underset{L \rightarrow \infty}{\approx} \sum_{m=1}^{\infty} \int_{\mathbf{q}}^{(d)} \cos(q_1 mL) \log(q^2) \quad (\text{A.33})$$

ist bereits aus dem Fall rein kurzreichweitiger Wechselwirkungen bekannt [29, 30, 58] und auf einfache Weise zu berechnen, und ergibt sich zu

$$\Delta U_{d,\Omega}^{(0)}(0|L) \underset{L \rightarrow \infty}{\approx} L^{-d} \Delta_C^{\text{GM}}(d) \quad (\text{A.34})$$

mit der in Gleichung (2.76a) definierten Casimir-Amplituden $\Delta_C^{\text{GM}}(d)$ des Gaußschen Modells.

Für den Koeffizienten $\Delta U_{d,\Omega}^{(1)}(r|L)$ des Terms $\propto b$ in der Entwicklung (A.30b) des *Finite-Size*-Anteils der Modensumme $U_{d,\Omega}(r|L)$ um $b = 0$ folgt im Rahmen der hier verwendeten Approximation

$$\Delta U_{d,\Omega}^{(1)}(r|L) \approx - \sum_{m=1}^{\infty} \int_{\mathbf{q}}^{(d)} \frac{q^\sigma \cos(q_1 mL)}{r + q^2}. \quad (\text{A.35})$$

Er kann daher unter Verwendung von Gleichung (A.25) unmittelbar mit Hilfe der Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ dargestellt werden. Dazu wird in dem Integral auf der rechten Seite der vorangegangenen Gleichung wiederum für alle Integrationsvariablen q_α ($\alpha = 1, \dots, d$) die Substitution $q_\alpha \mapsto q_\alpha/L$ vorgenommen. Führt man nun die Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ ein, folgt schließlich

$$\Delta U_{d,\Omega}^{(1)}(r|L) \approx - \frac{Q_{d,\sigma+2}(rL^2)}{rL^{d+\sigma}}. \quad (\text{A.36})$$

A.3 Berechnung des freien Propagators $\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{\mathbf{b}})$

Dieser Abschnitt befasst sich mit der Berechnung des freien Propagators $\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}' | \overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{\mathbf{b}})$, der sich ausgehend von dem in Gleichung (3.28) angegebenen freien Propagator im allseits endlichen System durch Vollziehen des Limes $L_\alpha \rightarrow \infty$ für alle $\alpha > 1$ bei konstant gehaltenem Wert der Filmdicke $L_1 \equiv L$ unter Verwendung der Poissonschen Summationsformel (A.6) zu

$$\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}' | \overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{\mathbf{b}}) = \sum_{m_1=-\infty}^{\infty} \int_{\mathbf{q}_\parallel}^{(d-1)} \frac{\langle z | m_1 \rangle \langle m_1 | z' \rangle}{\overset{\circ}{\tau} + q^2 - \overset{\circ}{\mathbf{b}} q^\sigma} e^{i\mathbf{q}_\parallel \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (\text{A.37})$$

ergibt. Die folgenden Ausführungen beschränken sich dabei auf den bei der störungstheoretischen Behandlung des ϕ^4 -Modells in Kapitel 3 lediglich auftretenden Fall $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$.

Der freie Propagator $\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{\mathbf{b}})$ wird nun zunächst gemäß

$$\mathcal{G}_L^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{\mathbf{b}}) = \frac{1}{L} \int_{\mathbf{q}}^{(d-1)} \frac{1}{\overset{\circ}{\tau} + q^2 - \overset{\circ}{\mathbf{b}} q^\sigma} + \mathcal{G}_{\psi,L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{\mathbf{b}}) \quad (\text{A.38})$$

in seinen Anteil von der ($q_1 = 0$)-Mode und den in Gleichung (3.47) definierten freien ψ -Propagator zerlegt. Dieser umfasst die Beiträge von den ($q_1 \neq 0$)-Moden, und ergibt sich durch Umschreiben der m_1 -Summation in Gleichung (3.47) unter Verwendung der Poissonschen Summationsformel (A.6) zu

$$\mathcal{G}_{\psi,L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \overset{\circ}{\tau}, \overset{\circ}{\mathbf{b}}) = \left[\int_{\mathbf{q}}^{(d)} - \frac{1}{L} \int_{\mathbf{q}}^{(d-1)} \right] \frac{1}{\overset{\circ}{\tau} + q^2 - \overset{\circ}{\mathbf{b}} q^\sigma} + \sum_{m=1}^{\infty} \int_{\mathbf{q}}^{(d)} \frac{2 \cos(q_1 mL)}{\overset{\circ}{\tau} + q^2 - \overset{\circ}{\mathbf{b}} q^\sigma}. \quad (\text{A.39})$$

Der Argumentation in Abschnitt A.2 folgend, mit der im Hinblick auf die Herausarbeitung des kritischen Verhaltens die Linearisierung der Modensummen $U_{d,\Omega}(r|L)$ und $W_{d,\Omega}(r|L)$ im Parameter b begründet wurde, werden nun die beiden Anteile des freien Propagators in Gleichung (A.38) bis zur ersten Ordnung um $\dot{b} = 0$ entwickelt. Diese Entwicklungen lauten

$$\frac{1}{L} \int_{\mathbf{q}}^{(d-1)} \frac{1}{\dot{\tau} + q^2 - \dot{b}q^\sigma} = \frac{1}{L} \int_{\mathbf{q}}^{(d-1)} \frac{1}{\dot{\tau} + q^2} + \dot{b} \frac{1}{L} \int_{\mathbf{q}}^{(d-1)} \frac{q^\sigma}{(\dot{\tau} + q^2)^2} + O(\dot{b}^2) \quad (\text{A.40a})$$

beziehungsweise

$$\mathcal{G}_{\psi,L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\dot{\tau}, \dot{b}) = \mathcal{G}_{\psi,L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\dot{\tau}, 0) + \dot{b} \left[\frac{\partial}{\partial \dot{b}} \mathcal{G}_{\psi,L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\dot{\tau}, \dot{b}) \right] \Big|_{\dot{b}=0} + O(\dot{b}^2), \quad (\text{A.40b})$$

mit den Entwicklungskoeffizienten

$$\mathcal{G}_{\psi,L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\dot{\tau}, 0) = \left[\int_{\mathbf{q}}^{(d)} - \frac{1}{L} \int_{\mathbf{q}}^{(d-1)} \right] \frac{1}{\dot{\tau} + q^2} + \sum_{m=1}^{\infty} \int_{\mathbf{q}}^{(d)} \frac{2 \cos(q_1 mL)}{\dot{\tau} + q^2} \quad (\text{A.41a})$$

und

$$\left[\frac{\partial}{\partial \dot{b}} \mathcal{G}_{\psi,L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\dot{\tau}, \dot{b}) \right] \Big|_{\dot{b}=0} = \left[\int_{\mathbf{q}}^{(d)} - \frac{1}{L} \int_{\mathbf{q}}^{(d-1)} \right] \frac{q^\sigma}{(\dot{\tau} + q^2)^2} + \sum_{m=1}^{\infty} \int_{\mathbf{q}}^{(d)} \frac{2q^\sigma \cos(q_1 mL)}{(\dot{\tau} + q^2)^2}. \quad (\text{A.41b})$$

Diese Ausdrücke sollen nun im Rahmen von dimensioneller Regularisierung berechnet werden. Die im Folgenden angegebenen Resultate sind daher als analytische Fortsetzung in d zu verstehen. Dabei können mit Hilfe von Gleichung (3.241.2.) in [99] die \mathbf{q} -Integrationen in den Entwicklungskoeffizienten auf der rechten Seite von Gleichung (A.40a) ausgeführt werden. Dies ergibt

$$\frac{1}{L} \int_{\mathbf{q}}^{(d-1)} \frac{1}{\dot{\tau} + q^2} = -\frac{1}{L} A_{d-1} \dot{\tau}^{(d-3)/2} \quad (\text{A.42a})$$

und

$$\frac{1}{L} \int_{\mathbf{q}}^{(d-1)} \frac{q^\sigma}{(\dot{\tau} + q^2)^2} = -\frac{1}{L} B_{d-1,\sigma} \dot{\tau}^{(d+\sigma-5)/2} \quad (\text{A.42b})$$

mit den in den Gleichungen (2.35a) und (2.35b) definierten Konstanten A_d und $B_{d,\sigma}$. Auf entsprechende Weise kann mit den in eckigen Klammern befindlichen \mathbf{q} -Integralen in den Gleichungen (A.41) verfahren werden. Die jeweils letzten Terme auf den rechten Seiten dieser Gleichungen sind bereits in Abschnitt A.2 bei der Berechnung des *Finite-Size*-Anteils der Modensumme $W_{d,\Omega}(r|L)$ aufgetreten, und an dieser Stelle ausgewertet worden. Umschreiben auf die in Gleichung (A.25) definierte Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ ergab dabei die in den Gleichungen (A.26a) und (A.26b) aufgeführten Ausdrücke. Für die Koeffizienten in der Entwicklung (A.40b) des freien ψ -Propagators folgt daraus letztendlich

$$\mathcal{G}_{\psi,L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}|\dot{\tau}, 0) = \frac{1}{L} A_{d-1} \dot{\tau}^{(d-3)/2} - A_d \dot{\tau}^{(d-2)/2} + \frac{2Q_{d,2}(\dot{\tau}L^2)}{\dot{\tau}L^d} \quad (\text{A.43a})$$

und

$$\left[\frac{\partial}{\partial \mathring{b}} \mathcal{G}_{\psi, L}^{(d)}(\mathbf{x}; \mathbf{x} | \mathring{\tau}, \mathring{b}) \right] \Big|_{\mathring{b}=0} = \frac{1}{L} B_{d-1, \sigma} \mathring{\tau}^{(d+\sigma-5)/2} - B_{d, \sigma} \mathring{\tau}^{(d+\sigma-4)/2} + 2L^{-(d+\sigma-4)} Q'_{d, \sigma}(\mathring{\tau} L^2). \quad (\text{A.43b})$$

A.4 Berechnung der Funktionen $Q_{d, \sigma}(y)$ und $R_{d, \sigma}(y)$

Dieser Anhang widmet sich der in Gleichung (A.25) eingeführten Funktion $Q_{d, \sigma}(y)$ und der als Ableitung nach ihrem ersten Index definierten Funktion

$$R_{d, \sigma}(y) \equiv \frac{\partial Q_{d, \sigma}(y)}{\partial d}. \quad (\text{A.44})$$

Diese Funktionen treten in den Modensummen $W_{d, \Omega}$ und $U_{d, \Omega}$, den freien Propagatoren $\mathcal{G}_L^{(d)}$ und $\mathcal{G}_{\psi, L}^{(d)}$, sowie den Entwicklungen dieser Ausdrücke um $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen auf, und sollen nun berechnet werden. Dazu wird die Funktion $Q_{d, \sigma}(y)$ zunächst — ausgehend von ihrer Definitionsgleichung (A.25) — gemäß

$$Q_{d, \sigma}(y) = \frac{y}{2} \left[\sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{\mathbf{q}}^{(d)} \frac{q^{\sigma-2} e^{iq_1 m}}{y + q^2} - \int_{\mathbf{q}}^{(d)} \frac{q^{\sigma-2}}{y + q^2} \right] \quad (\text{A.45a})$$

$$= \frac{y}{2} \left[\sum_{q_1 \in 2\pi\mathbb{Z}} \int_{\mathbf{q}_{\parallel}}^{(d-1)} - \int_{\mathbf{q}}^{(d)} \right] \frac{q^{\sigma-2}}{y + q^2} \quad (\text{A.45b})$$

umgeformt, wobei der Vektor $\mathbf{q}_{\parallel} \equiv (q_2, \dots, q_d)$ die Impulskomponenten entlang der $d - 1$ Hauptrichtungen umfasst, in denen die Ausdehnung des Systems unbegrenzt ist. Die erste Zeile der Gleichungen (A.45) ergibt sich durch Addition und Subtraktion des ($m = 0$)-Terms in der Summe auf der rechten Seite von Gleichung (A.25) und Ersetzung des Kosinus durch seine Exponentialdarstellung. Die zweite Zeile folgt durch Umschreiben der m -Summation und der Integration über die Impulskoordinate q_1 in der ersten Zeile auf eine Summation über q_1 unter Verwendung der Poissonschen Summationsformel (A.6).

Mit Hilfe des Integrals

$$I_{d, \sigma}(q_1, y) = K_{d-1} \int_0^{\infty} dq_{\parallel} q_{\parallel}^{d-2} \frac{(q_1^2 + q_{\parallel}^2)^{(\sigma-2)/2}}{y + q_1^2 + q_{\parallel}^2}, \quad (\text{A.46})$$

K_d ist die in Gleichung (2.43) definierte Konstante, kann der in der zweiten Zeile der Gleichungen (A.45) erhaltene Ausdruck für die Funktion $Q_{d, \sigma}(y)$ geschrieben werden als

$$Q_{d, \sigma}(y) = \frac{y}{2} \left\{ \left[I_{d, \sigma}(0, 1) - I_{d+1, \sigma}(0, 1) \sqrt{y} \right] y^{(d+\sigma-5)/2} + \sum'_{q_1 \in 2\pi\mathbb{Z}} I_{d, \sigma}(q_1, y) \right\}. \quad (\text{A.47})$$

Dabei stehe hier und im Folgenden $\sum'_{q_1 \in 2\pi\mathbb{Z}}$ als Abkürzung für $\sum_{q_1 \in 2\pi\mathbb{Z} \setminus \{0\}}$.

Das Integral $I_{d,\sigma}(q_1, y)$, welches für $d+\sigma \geq 5$ ultraviolett divergent ist, soll nun im Rahmen von dimensioneller Regularisierung ausgewertet werden. Im Fall $q_1 = 0$ erhält man unter Verwendung von Gleichung (3.241 2.) in [99],

$$I_{d,\sigma}(0, y) = \frac{2^{1-d}\pi^{(3-d)/2}y^{(d+\sigma-5)/2}}{\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)\cos\left(\pi\frac{d+\sigma}{2}\right)}. \quad (\text{A.48})$$

Für von null verschiedene Werte des Impulses q_1 kann $I_{d,\sigma}(q_1, y)$ gemäß

$$I_{d,\sigma}(q_1, y) = \sum_{n=0}^{\infty} I_{d,\sigma}^{(0,n)}(q_1, 0) \frac{y^n}{n!} \quad (\text{A.49})$$

in eine Taylor-Reihe um den Punkt $y = 0$ entwickelt werden. Dabei bezeichnet $I_{d,\sigma}^{(0,n)}$ die n -te Ableitung von $I_{d,\sigma}(q_1, y)$ nach y , die sich im Fall $y = 0$ zu (siehe z.B. Gleichung (3.241 4.) in [99])

$$I_{d,\sigma}^{(0,n)}(q_1, 0) = \frac{(-1)^n n! \text{B}\left(\frac{d-1}{2}, \frac{2n+5-d-\sigma}{2}\right)}{(4\pi)^{(d-1)/2} |q_1|^{2n+5-d-\sigma} \Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)}, \quad (\text{A.50})$$

mit der Eulerschen Beta-Funktion $\text{B}(x, y) \equiv \Gamma(x)\Gamma(y)/\Gamma(x+y)$ ergibt.

Bei der in Gleichung (A.47) vorgenommenen Zerlegung der Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ gilt es zu berücksichtigen, dass sowohl in den Integralen $I_{d,\sigma}(0, 1)$ und $I_{d+1,\sigma}(0, 1)$ als auch in den zur Berechnung der Summanden in $\sum'_{q_1 \in 2\pi\mathbb{Z}}(\dots)$ auszuwertenden Integralen UV-Divergenzen auftreten. Die damit verbundenen Polterme heben sich auf, so dass die Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ insgesamt UV-endlich ist. Es ist daher sinnvoll, die divergenten Terme von $\sum'_{q_1 \in 2\pi\mathbb{Z}}(\dots)$ in Gleichung (A.47) abzuspalten und das UV-endliche Restglied separat zu behandeln. Um diese Aufspaltung vorzunehmen, wird nun ein über alle Werte des Impulses $q_1 \neq 0$ summierter Term aus der Reihenentwicklung (A.49) der Funktion $I_{d,\sigma}(q_1, y)$ betrachtet. Führt man bei großen Werten von $|q_1|$ einen Abschneideimpuls Λ ein, zeigt sich, dass die führende UV-Divergenz des Ausdrucks $\sum'_{q_1 \in 2\pi\mathbb{Z}} I_{d,\sigma}^{(0,n)}(q_1, 0)$ proportional zu $\Lambda^{d+\sigma-3-2n}$ ist. Folglich wird die Taylor-Reihe (A.49) UV-endlich, wenn man ihre Terme mit $n = \{0, \dots, \lfloor \frac{d+\sigma-4}{2} \rfloor\}$ subtrahiert. Das Symbol $\lfloor \dots \rfloor$ bezeichnet dabei die Floor-Funktion.

Diese Überlegungen motivieren eine Zerlegung der auf beiden Seiten über alle Werte des Impulses $q_1 \neq 0$ summierten Gleichung (A.49) von der Form

$$\sum'_{q_1 \in 2\pi\mathbb{Z}} I_{d,\sigma}(q_1, y) = \sum'_{q_1 \in 2\pi\mathbb{Z}} \sum_{n=0}^{\rho-1} I_{d,\sigma}^{(0,n)}(q_1, 0) \frac{y^n}{n!} + \mathcal{R}_{d,\sigma}(y|\rho), \quad (\text{A.51})$$

mit einem Hilfsparameter $\rho \in \mathbb{N}_0$, der auf den Wert $\lfloor \frac{d+\sigma-2}{2} \rfloor$ gesetzt werden muss, damit die Restgliedfunktion $\mathcal{R}_{d,\sigma}(y|\rho)$ UV-endlich ist. Setzt man für $I_{d,\sigma}^{(0,n)}(q_1, 0)$ nun den in Gleichung (A.50) angegebenen Ausdruck ein, kann die q_1 -Summation auf der rechten Seite von Gleichung (A.51) gemäß

$$\sum'_{q_1 \in 2\pi\mathbb{Z}} I_{d,\sigma}^{(0,n)}(q_1, 0) = 2I_{d,\sigma}^{(0,n)}(2\pi, 0)\zeta(2n+5-d-\sigma) \quad (\text{A.52})$$

mit der Riemannschen Zeta-Funktion

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s} \quad (\text{A.53})$$

analytisch ausgeführt werden. Den Gleichungen (A.51) und (A.52) entsprechend kann nun die Summe in dem für die Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ erhaltenen Ausdruck (A.47) ersetzt werden. Dies ergibt

$$Q_{d,\sigma}(y) = \frac{y}{2} \left\{ \left[I_{d,\sigma}(0,1) - I_{d+1,\sigma}(0,1)\sqrt{y} \right] y^{(d+\sigma-5)/2} + 2 \sum_{n=0}^{\rho-1} I_{d,\sigma}^{(0,n)}(2\pi,0) \zeta(2n+5-d-\sigma) \frac{y^n}{n!} + \mathcal{R}_{d,\sigma}(y|\rho) \right\}. \quad (\text{A.54})$$

Es bleibt nun eine praktikable Darstellung der Restgliedfunktion $\mathcal{R}_{d,\sigma}(y|\rho)$ herzuleiten, die sich gemäß den Gleichungen (A.49) und (A.51) in ihrer Potenzreihendarstellung zu

$$\mathcal{R}_{d,\sigma}(y|\rho) = \sum'_{q_1 \in 2\pi\mathbb{Z}} \sum_{n=\rho}^{\infty} I_{d,\sigma}^{(0,n)}(q_1,0) \frac{y^n}{n!} \quad (\text{A.55})$$

ergibt. Dazu wird zunächst die n -Summation in Gleichung (A.55) genauer betrachtet. Ersetzt man hier $I_{d,\sigma}^{(0,n)}(q_1,0)$ durch seinen expliziten Ausdruck (A.50) und verschiebt den Summationsindex n um $-\rho$, zeigt sich, dass die n -Summation in Gleichung (A.55) ein Spezialfall der Gaußschen hypergeometrischen Reihe (siehe z.B. § 15.1 in [122]) ist. Sie kann daher unter Verwendung von Gleichung (15.1.1) in [122] in geschlossen analytischer Form dargestellt werden. Man erhält

$$\sum_{n=\rho}^{\infty} I_{d,\sigma}^{(0,n)}(q_1,0) \frac{y^n}{n!} = (-y)^\rho \frac{\Gamma\left(\frac{2\rho+5-d-\sigma}{2}\right) {}_2F_1\left(1, \frac{2\rho+5-d-\sigma}{2}; \rho+2-\frac{\sigma}{2}; -\frac{y}{q_1^2}\right)}{(4\pi)^{(d-1)/2} |q_1|^{2\rho+5-d-\sigma} \Gamma\left(\frac{2\rho+4-\sigma}{2}\right)} \quad (\text{A.56})$$

mit der Gaußschen hypergeometrischen Funktion ${}_2F_1(a, b; c; z)$. Dieser Ausdruck wird nun auf der rechten Seite von Gleichung (A.55) eingesetzt und für die hypergeometrische Funktion unter Verwendung ihrer im Fall $\text{Re}(c) > \text{Re}(b) > 0$ gültigen Integraldarstellung (siehe z.B. Gleichung (9.111) in [99])

$${}_2F_1(a, b; c; z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(b)\Gamma(c-b)} \int_0^1 dt \frac{t^{b-1}(1-t)^{c-b-1}}{(1-tz)^a}, \quad (\text{A.57})$$

substituiert. Der Impuls q_1 kann nun durch $2\pi j$ ersetzt und die q_1 -Summation als $2 \sum_{j=1}^{\infty}$ geschrieben werden, da q_1 auf der rechten Seite von Gleichung (A.56) ausschließlich quadriert beziehungsweise über seinen Betrag eingeht. Dies liefert für die Restgliedfunktion den im Fall $d > 1$ gültigen Ausdruck

$$\mathcal{R}_{d,\sigma}(y|\rho) = \frac{2(-y)^\rho}{(4\pi)^{(d-1)/2} \Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} \int_0^1 dt \frac{(1-t)^{(d-3)/2}}{t^{(d+\sigma-2\rho-3)/2}} \left[\sum_{j=1}^{\infty} \frac{(2\pi j)^{d+\sigma-2\rho-3}}{ty + (2\pi j)^2} \right], \quad (\text{A.58})$$

der in den folgenden Abschnitten — zusammen mit Gleichung (A.54) — verwendet wird, um die Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ und die als Ableitung nach ihrem Index d definierte Funktion $R_{d,\sigma}(y)$ für die in dieser Arbeit relevanten Werte der Parameter d und σ zu berechnen.

A.4.1 Allgemeine Potenzreihendarstellung der Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$

Die in Gleichung (A.51) eingeführte Restgliedfunktion $\mathcal{R}_{d,\sigma}(y|\rho)$ verschwindet definitionsgemäß im Grenzfall $\rho \rightarrow \infty$. Wird also in Gleichung (A.54) dieser Limes vollzogen, erhält man eine allgemeine Potenzreihendarstellung der Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$. Diese ergibt sich durch Einsetzen der in den Gleichungen (A.48) und (A.50) aufgeführten expliziten Ausdrücke für $I_{d,\sigma}(0, y)$ und $I_{d,\sigma}^{(0,n)}(q_1, 0)$ zu

$$Q_{d,\sigma}(y) = \frac{2^{-d}\pi^{(3-d)/2}y^{(d+\sigma-3)/2}}{\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)\cos\left(\pi\frac{d+\sigma}{2}\right)} + \frac{2^{-d-1}\pi^{1-d/2}y^{(d+\sigma-2)/2}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)\sin\left(\pi\frac{d+\sigma}{2}\right)} - 2^{\sigma-2}\pi^{(d+2\sigma-5)/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Gamma\left(n + \frac{3-d-\sigma}{2}\right) \zeta(2n+3-d-\sigma)(-y)^n}{(2\pi)^{2n}\Gamma\left(n+1-\frac{\sigma}{2}\right)}, \quad (\text{A.59})$$

und besteht demgemäß aus einer unendlichen Reihe mit ganzzahligen Potenzen von y und zwei weiteren Termen, die bei $y = 0$ im Allgemeinen nichtanalytische Funktionen von y sind. Eine entsprechende Darstellung der Funktion $R_{d,\sigma}(y)$ kann durch Ableiten von Gleichung (A.59) nach dem Parameter d erhalten werden. Diese Operation führt jedoch zu einem recht umfangreichen Ausdruck auf dessen explizite Angabe verzichtet wird.

Die allgemeinen Potenzreihendarstellungen der Funktionen $Q_{d,\sigma}(y)$ und $R_{d,\sigma}(y)$ sind aus vielerlei Gründen nützlich. Einerseits ergibt sich aus Gleichung (A.59) unmittelbar das asymptotische Verhalten der Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ im Grenzfall $y \rightarrow 0$, das beispielsweise bei der Herleitung der Epsilon-Entwicklungen der Casimir-Amplituden benötigt wird. Andererseits bieten ihre Potenzreihendarstellungen eine weitere Option, die Funktionen $Q_{d,\sigma}(y)$ und $R_{d,\sigma}(y)$ numerisch zu berechnen. Dies ist jedoch nur für Werte von y möglich, die sich innerhalb des Konvergenzradius der unendlichen Reihe in Gleichung (A.59) befinden. Dieser kann beispielsweise mittels des Cauchyschen Quotientenkriteriums bestimmt werden. Dieses Kriterium besagt für eine unendliche Reihe von der Form $\sum_n a_n$, dass diese Reihe, abhängig vom Wert des Parameters $\kappa \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} |a_{n+1}/a_n|$, im Fall $\kappa < 1$ absolut konvergiert und im Fall $\kappa > 1$ divergiert. Ist $\kappa = 1$ kann anhand des Quotientenkriteriums keine Aussage über das Konvergenzverhalten der unendlichen Reihe getroffen werden.

Für die unendliche Reihe, die in der Potenzreihendarstellung (A.59) der Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ auftritt, ergibt sich der Wert des Parameters κ zu $|y|/(2\pi)^2$. Absolute Konvergenz liegt daher im Fall $|y| \in [0, 4\pi^2)$ vor. Da die Funktionen $Q_{d,\sigma}(y)$ und $R_{d,\sigma}(y)$ in dieser Arbeit jedoch für Werte ihres Argumentes $y \in [0, \infty)$ auszuwerten sind, werden neben den allgemeinen Potenzreihendarstellungen weitere Darstellungen dieser Funktionen benötigt. Deren Herleitung ist Gegenstand der folgenden Abschnitte.

A.4.2 Die Funktionen $Q_{d,2}(y)$ und $R_{d,2}(y)$

Zur Berechnung der Funktion $Q_{d,2}(y)$ werden in dem für die Restgliedfunktion $\mathcal{R}_{d,\sigma}(y|\rho)$ erhaltenen Ausdruck (A.58) $\rho = 0$ und $\sigma = 2$ gesetzt. Die t -Integration kann dann analytisch ausgeführt werden (siehe z.B. Gleichung (3.229) in [99]) und man erhält

$$\mathcal{R}_{d,2}(y|0) = 2(4\pi)^{(1-d)/2} \Gamma\left(\frac{3-d}{2}\right) \sum_{j=1}^{\infty} \left(y + 4\pi^2 j^2\right)^{(d-3)/2}. \quad (\text{A.60})$$

Die Summe auf der rechten Seite von Gleichung (A.60) soll nun unter Verwendung der analytischen Fortsetzung der sogenannten Epstein-Hurwitz Zeta-Funktion [123]

$$\sum_{j=1}^{\infty} (\alpha^2 + j^2)^{-s} = -\frac{1}{2\alpha^{2s}} + \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^{2s-1}\Gamma(s)} \left[\Gamma\left(\frac{2s-1}{2}\right) + \frac{4}{(\pi\alpha)^{(1-2s)/2}} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{K_{(1-2s)/2}(2\pi m\alpha)}{m^{(1-2s)/2}} \right] \quad (\text{A.61})$$

mit der modifizierten Bessel-Funktion zweiter Art $K_n(x)$ umgeschrieben werden. Dazu wird zunächst die in Gleichung (A.60) angegebene Restgliedfunktion $\mathcal{R}_{d,2}(y|0)$ in die Darstellung (A.54) der Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ mit $\rho = 0$ und $\sigma = 2$ eingesetzt. Ersetzt man nun die Summe über j gemäß Gleichung (A.61), heben sich die Ausdrücke proportional zu $I_{d,\sigma}(0,1)$ und $I_{d+1,\sigma}(0,1)$ mit den aus der Epstein-Hurwitz Zeta-Funktion resultierenden Termen $\propto \alpha^{-2s}$ und $\propto \alpha^{-(2s-1)}$ in Gleichung (A.61) auf. Es bleibt lediglich die Summe über die Bessel-Funktion und man erhält letztendlich

$$Q_{d,2}(y) = \frac{y^{(d+2)/4}}{(2\pi)^{d/2}} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{K_{(d-2)/2}(m\sqrt{y})}{m^{(d-2)/2}}. \quad (\text{A.62})$$

Ausgehend von dieser Identität soll im Folgenden gezeigt werden, dass die Funktion $Q_{d,2}(y)$ für ungerade Werte ihres Index $d > 0$ in geschlossen analytischer Form dargestellt werden kann. Dazu wird, in Übereinstimmung mit der in [123] beschriebenen Vorgehensweise, die Bessel-Funktion $K_n(x)$ durch ihre asymptotische Reihenentwicklung für große Werte ihres Argumentes (z.B. Gleichung (8.451 6.) in [99])

$$K_n(x) \underset{x \rightarrow \infty}{=} \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x} \left[\sum_{j=0}^{r-1} \frac{\Gamma(n+j+\frac{1}{2})}{(2x)^j j! \Gamma(n-j+\frac{1}{2})} + O(x^{-r}) \right] \quad (\text{A.63})$$

ersetzt. Die Reihenfolge der Summationen kann nun vertauscht und die m -Summation ausgeführt werden. Dies ergibt

$$Q_{d,2}(y) \underset{y \rightarrow \infty}{=} \frac{\pi y^{(d+1)/4}}{(2\pi)^{(d+1)/2}} \left[\sum_{j=0}^{r-1} \frac{\Gamma\left(\frac{d-1}{2} + j\right)}{\Gamma\left(\frac{d-1}{2} - j\right)} \frac{\text{Li}_{(d-1)/2+j}(e^{-\sqrt{y}})}{j! (2\sqrt{y})^j} + O\left(\frac{e^{-\sqrt{y}}}{y^{r/2}}\right) \right] \quad (\text{A.64})$$

mit der Polylogarithmus-Funktion

$$\text{Li}_p(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^p}. \quad (\text{A.65})$$

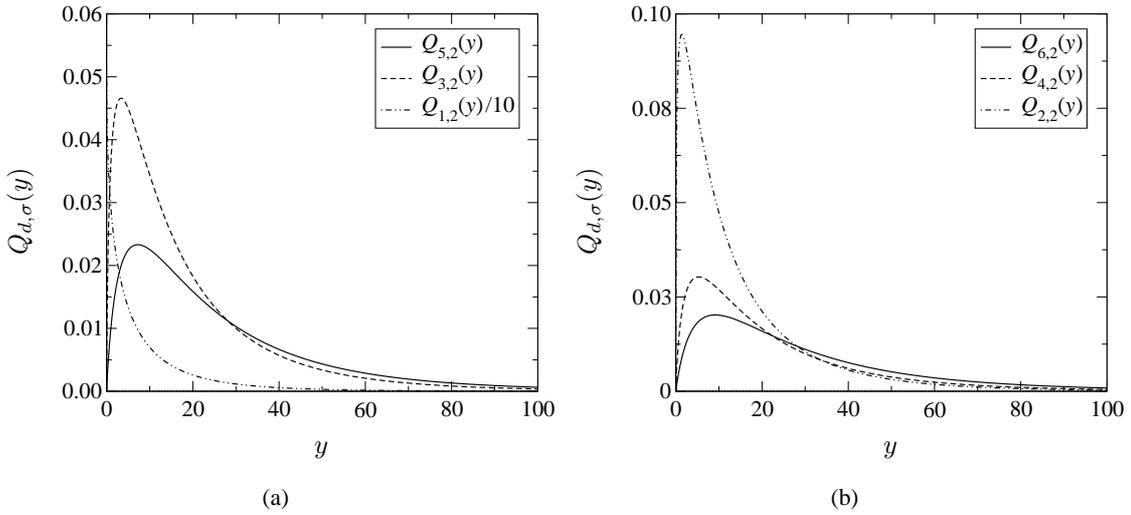


Abbildung 34: Auftragung der Funktionen $Q_{1,2}(y)$, $Q_{3,2}(y)$ und $Q_{5,2}(y)$ (a) und $Q_{2,2}(y)$, $Q_{4,2}(y)$ und $Q_{6,2}(y)$ (b).

Nimmt der Index $d > 0$ nun einen ungeraden Wert an, so durchläuft das Argument der Gamma-Funktion im Nenner auf der rechten Seite von Gleichung (A.64) die negativen ganzen Zahlen für Werte des Summationsindex j größer als $(d-1)/2$, und verschwindet wenn $j = (d-1)/2$. Diese Gamma-Funktion divergiert somit, wenn $j \geq (d-1)/2$, so dass die zugehörigen Terme in der j -Summe auf der rechten Seite von Gleichung (A.64) verschwinden. Die Summation kann daher an diesem Punkt abgebrochen werden, und auf diese Weise erhält man die für alle Werte $m \in \mathbb{N}$ gültige Identität

$$Q_{2m+1,2}(y) = \frac{\pi y^{(m+1)/2}}{(2\pi)^{m+1}} \sum_{j=0}^m \frac{\Gamma(m+j) \text{Li}_{m+j}(e^{-\sqrt{y}})}{j! \Gamma(m-j) (2\sqrt{y})^j}. \quad (\text{A.66})$$

Dabei ist anzumerken, dass diese Relation für alle Werte $y \in [0, \infty)$ gilt, obgleich zu ihrer Herleitung die auf der rechten Seite von Gleichung (A.62) auftretende Bessel-Funktion $K_{(d-2)/2}(m\sqrt{y})$ durch ihr asymptotisches Verhalten für große Werte ihres Arguments ersetzt wurde. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die asymptotische Entwicklung (A.63) der Bessel-Funktion $K_n(x)$ für halbzahlige Werte ihres Index $n > 0$ in eine für alle Werte $x \in [0, \infty)$ gültige Identität übergeht. In diesem Fall verschwinden die Terme $O(x^{-r})$ in Gleichung (A.63) und der in der oberen Grenze der j -Summation auftretende Parameter r ist durch $n + 1/2$ zu ersetzen.

Unter Verwendung von Gleichung (A.62) mit $d = 1$ und Gleichung (A.66) mit $m = 1$ beziehungsweise $m = 2$ können nun analytische Ausdrücke für die Funktionen $Q_{1,2}(y)$, $Q_{3,2}(y)$ und $Q_{5,2}(y)$, die in den *Finite-Size*-Anteilen der Modensummen $W_{d,\Omega}(r|L)$ und $U_{d,\Omega}(r|L)$ des dreidimensionalen *Mean-Sphärischen-Modells* auftreten, angegeben werden. Diese lauten

$$Q_{1,2}(y) = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{y}}{e^{\sqrt{y}} - 1}, \quad (\text{A.67a})$$

$$Q_{3,2}(y) = -\frac{y}{4\pi} \log\left(1 - e^{-\sqrt{y}}\right) \quad (\text{A.67b})$$

und

$$Q_{5,2}(y) = \frac{y}{8\pi^2} \left[\text{Li}_3\left(e^{-\sqrt{y}}\right) + \sqrt{y} \text{Li}_2\left(e^{-\sqrt{y}}\right) \right]. \quad (\text{A.67c})$$

Auftragungen dieser Funktionen finden sich in Abbildung 34(a).

Für gerade Werte des Index d ist die Funktion $Q_{d,2}(y)$ nicht in geschlossen analytischer Form darstellbar, da die j -Summation auf der rechten Seite von Gleichung (A.64) in diesem Fall nicht abgebrochen werden kann. Sie kann jedoch, beispielsweise unter Verwendung ihrer Reihendarstellung (A.62), numerisch berechnet werden. Die auf diese Weise erhaltenen Funktionen $Q_{2,2}(y)$, $Q_{4,2}(y)$ und $Q_{6,2}(y)$, die bei der Entwicklung der *Finite-Size*-Anteile der Modensummen $W_{d,\Omega}$ und $U_{d,\Omega}$ um $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen auftreten, sind in Abbildung 34(b) dargestellt.

Eine weitere, auf Residuenkalkül basierende Methode zur Regularisierung von unendlichen Reihen der in Gleichung (A.60) angegebenen Form, wird in [30] beschrieben. Diese führt zu einer Integraldarstellung der Funktion $Q_{d,2}(y)$ gegeben durch

$$Q_{d,2}(y) = \frac{y}{(4\pi)^{(d-1)/2} \Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} \int_0^\infty dp \frac{p^{d-2}}{\left(e^{\sqrt{y+p^2}} - 1\right) \sqrt{y+p^2}}, \quad (\text{A.68})$$

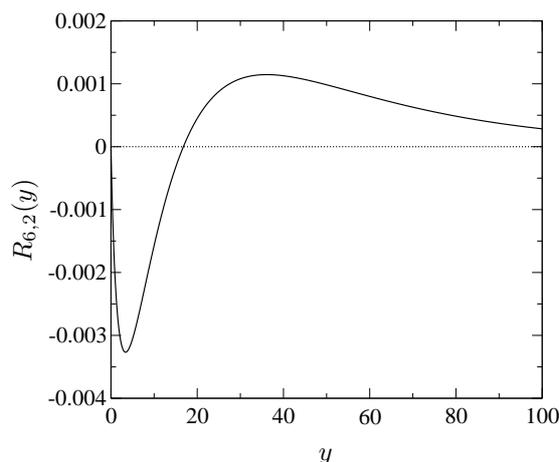
die ebenfalls zu ihrer numerischen Berechnung herangezogen werden kann. Um zu zeigen, dass die in den Gleichungen (A.62) und (A.68) angegebenen Ausdrücke äquivalent sind, muss lediglich die Bessel-Funktion $K_n(x)$ auf der rechten Seite von Gleichung (A.62) durch ihre, beispielsweise in Gleichung (8.432 3.) in [99] aufgeführte Integraldarstellung ersetzt werden. Nach Vertauschung von Integration und Summation kann letztere, welche einer geometrischen Reihe entspricht, ausgeführt werden. Die Integraldarstellung (A.68) kann dann durch entsprechende Substitution der Integrationsvariablen erhalten werden.

Neben der Funktion $Q_{d,2}(y)$ ist auch die als Ableitung nach ihrem Index d definierte Funktion $R_{d,2}(y)$ zu berechnen. Ableiten von Gleichung (A.62) nach d ergibt

$$R_{d,2}(y) = \frac{1}{2} \log\left(\frac{\sqrt{y}}{2\pi}\right) Q_{d,2}(y) - \frac{y^{(d+2)/4}}{2(2\pi)^{d/2}} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{K_{(d-2)/2}(m\sqrt{y}) \log(m) - K_{(d-2)/2}^{(1,0)}(m\sqrt{y})}{m^{(d-2)/2}}. \quad (\text{A.69})$$

Dabei bezeichnet $K_n^{(1,0)}(x)$ die Ableitung der Bessel-Funktion $K_n(x)$ nach ihrem Index n . Für positive ganzzahlige Werte von n kann die Bessel-Funktion $K_n(x)$ und ihre Ableitung $K_n^{(1,0)}(x)$ unter Verwendung der in Tabelle 9.8 und Gleichung (9.6.45) in [122] angegebenen Relationen durch Bessel-Funktionen $K_m(x)$ mit $m = \{0, 1, \dots, n-1\}$ ausgedrückt werden. Auf diese Weise folgt für die bei der Epsilon-Entwicklung der Modensumme $U_{d,\Omega}(r|L)$ auftretende Funktion $R_{6,2}(y)$,

$$R_{6,2}(y) = \frac{1}{2} \log\left(\frac{\sqrt{y}}{2\pi}\right) Q_{6,2}(y) - \frac{y^2}{(2\pi)^3} \sum_{m=1}^{\infty} \left[\sqrt{y} K_1(m\sqrt{y}) \frac{\log(m) - 1}{m^3} + K_0(m\sqrt{y}) \times \frac{m^2 \log(m)y - 2}{2m^4} \right]. \quad (\text{A.70})$$

Abbildung 35: Auftragung der Funktion $R_{6,2}(y)$.

Ihr Verlauf, der sich durch numerische Auswertung dieses Ausdrucks ergibt, ist in Abbildung 35 dargestellt.

A.4.3 Die Funktionen $Q_{3,3}(y)$, $Q_{4,3}(y)$ und $R_{4,3}(y)$

Um für $y \in [0, \infty)$ gültige Darstellungen der Funktionen $Q_{3,3}(y)$ und $Q_{4,3}(y)$ zu erhalten, werden zunächst mittels Gleichung (A.58) die zugehörigen Restgliedfunktionen berechnet. Damit diese frei von UV-Divergenzen sind, ist der Hilfsparameter ρ — wie zu Beginn des Abschnitts A.4 erläutert — auf den Wert $\lfloor \frac{d+\sigma-2}{2} \rfloor$ zu setzen. Dieser beträgt somit in beiden Fällen $\rho = 2$.

Setzt man in der Restgliedfunktion (A.58) nun $d = \sigma = 3$ und $\rho = 2$, kann die dort auftretende unendliche Reihe unter Verwendung der Reihendarstellung der Digamma-Funktion $\psi(x)$ (siehe z.B. Gleichung (8.362 1.) in [99]) in eine geschlossene Form gebracht werden. Die Restgliedfunktion lautet dann

$$\mathcal{R}_{3,3}(y|2) = \frac{y}{4\pi^2} \int_0^1 \frac{dt}{\sqrt{t}} \left\{ \gamma + \operatorname{Re} \left[\psi \left(i \frac{\sqrt{ty}}{2\pi} \right) \right] \right\}. \quad (\text{A.71})$$

Unter Berücksichtigung der Identität (2.69) kann die t -Integration ausgeführt werden und man erhält

$$\mathcal{R}_{3,3}(y|2) = \frac{y}{2\pi^2} \left\{ \gamma + \frac{2\pi}{\sqrt{y}} \operatorname{Im} \left[\log \Gamma \left(i \frac{\sqrt{y}}{2\pi} \right) \right] \right\}. \quad (\text{A.72})$$

Dieser Ausdruck für die Restgliedfunktion kann nun in die Darstellung (A.54) der Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ mit $d = \sigma = 3$ und $\rho = 2$ eingesetzt werden. Dabei gilt es zu beachten, dass in dieser Gleichung sowohl der Koeffizient $I_{d+1,\sigma}(0,1)$ des Terms $\propto y^{(d+\sigma-2)/2}$ in der ersten Zeile als auch die im $(n=1)$ -Term der Summe in der zweiten Zeile auftretende Zeta-Funktion $\zeta(7-d-\sigma)$ im Fall $d = \sigma = 3$ einfache Pole aufweisen. Entwickelt man die Summe dieser Terme zu nullter Ordnung um $d = \sigma = 3$, heben sich diese Pole auf und der Vorfaktor des y^2 -Terms wird modifiziert durch

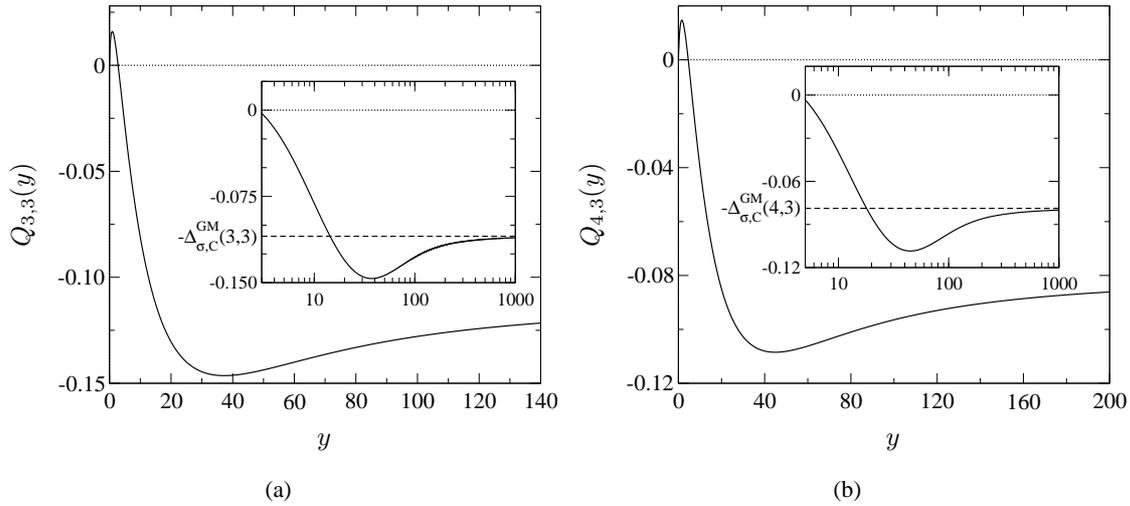


Abbildung 36: Auftragung der Funktionen $Q_{3,3}(y)$ (a) und $Q_{4,3}(y)$ (b). Die eingeschobenen Abbildungen zeigen halblogarithmische Auftragungen, die die Annäherung der beiden Funktionen an ihre Werte im Limes $y \rightarrow \infty$ illustrieren. Diese ergeben sich unter Verwendung der Gleichungen (A.85a) und (2.76b) zu $-\Delta_{\sigma,C}^{GM}(3,3) = -\pi^2/90$ beziehungsweise $-\Delta_{\sigma,C}^{GM}(4,3) = -3\zeta(5)/(2\pi)^2$.

einen Beitrag $\propto \log y$. Die Funktion $Q_{3,3}(y)$ ergibt sich damit letztendlich zu

$$Q_{3,3}(y) = \frac{y}{12} + \frac{y^2}{4\pi^2} \left[1 - \log\left(\frac{\sqrt{y}}{2\pi}\right) \right] + \frac{y^{3/2}}{2\pi} \left\{ \frac{\pi}{4} + \text{Im} \left[\log \Gamma\left(i\frac{\sqrt{y}}{2\pi}\right) \right] \right\}. \quad (\text{A.73})$$

Sie ist in Abbildung 36(a) dargestellt.

Zur Berechnung der Funktion $Q_{4,3}(y)$ wird vollkommen analog verfahren und dazu in der Restgliedfunktion (A.58) zunächst $d = 4$, $\sigma = 3$ und $\rho = 2$ gesetzt. Die j -Summe kann nun mit Hilfe der Reihendarstellung der Kotangenshyperbolicus-Funktion (siehe z.B. Gleichung (1.421 4.) in [99]) in eine geschlossene Form gebracht werden. Damit geht die Restgliedfunktion in das Integral

$$\mathcal{R}_{4,3}(y|2) = \frac{y}{8\pi^2} \int_0^1 dt \frac{\sqrt{1-t}}{t} \left[\sqrt{ty} \coth\left(\frac{\sqrt{ty}}{2}\right) - 2 \right] \quad (\text{A.74})$$

über, dessen Stammfunktion auf analytischem Wege nicht gefunden werden konnte. Seine Auswertung mittels numerischer Methoden ist jedoch unproblematisch.

Es bleiben nun die übrigen Terme in der Darstellung (A.54) der Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ auszuwerten. Sowohl der Koeffizient $I_{d,\sigma}(0,1)$ des Terms $\propto y^{(d+\sigma-3)/2}$ in der ersten Zeile, als auch der Term mit $n = 1$ in der Summe in der zweiten Zeile weisen im Fall $d = 4$ und $\sigma = 3$ einfache Pole auf. Diese heben sich wiederum auf und führen zu einem Beitrag $\propto \log y$ im Koeffizienten des y^2 -Terms. Zusammen mit der Integraldarstellung (A.74) der Restgliedfunktion $\mathcal{R}_{4,3}(y|2)$ folgt daraus

letztenendes

$$Q_{4,3}(y) = \frac{\zeta(3)y}{4\pi^2} - \frac{y^2}{4\pi^2} \left[1 - \log(2\sqrt{y}) \right] - \frac{y^{5/2}}{32\pi} + \frac{y^2}{16\pi^2} \int_0^1 \frac{dt \sqrt{1-t}}{t} \left[\sqrt{ty} \coth\left(\frac{\sqrt{ty}}{2}\right) - 2 \right]. \quad (\text{A.75})$$

Eine Auftragung dieser Funktion findet sich in Abbildung 36(b).

Das in diesem Abschnitt beschriebene Verfahren kann auch verwendet werden, um, neben ihrer allgemeinen Potenzreihendarstellung die aus Gleichung (A.59) abgeleitet werden kann, eine weitere Darstellung der Funktion $R_{4,3}(y)$ zu erhalten. Dies führt jedoch auf einen Ausdruck, dessen numerische Auswertung sich im Hinblick auf die dabei zu erzielende hohe Genauigkeit als schwierig erweist. Aus diesem Grund wird im Folgenden die beispielsweise in den Referenzen [19, 20] beschriebene Methode verwendet, um eine geeignetere Darstellung der Funktion $R_{4,3}(y)$ herzuleiten. Diese basiert auf der für $a < 1$ gültigen Integralidentität [19, 124]

$$\frac{q^{2a}}{y + q^2} = \int_0^\infty dt t^{-a} e^{-(q^2+y)t} \gamma^*(-a, -yt) \quad (\text{A.76})$$

mit der unvollständigen Gamma-Funktion (siehe z.B. § 6.5 und Gleichung (6.5.29) in [122])

$$\gamma^*(a, z) = e^{-z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\Gamma(a+n+1)} = \frac{1}{\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-z)^n}{(a+n)n!}. \quad (\text{A.77})$$

Dazu wird der als Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ definierte Ausdruck (A.25) unter Verwendung von Gleichung (A.76) umgeschrieben. Die q -Integrationen können dann unter Verwendung der Gleichungen (3.351 3.) und (3.896 4.) in [99] analytisch ausgeführt werden und man erhält die im Fall $\sigma < 4$ gültige Identität

$$Q_{d,\sigma}(y) = \frac{y}{(4\pi)^{d/2}} \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^\infty dt t^{(2-d-\sigma)/2} e^{-k^2/(4t)-yt} \gamma^*\left(\frac{2-\sigma}{2}, -yt\right). \quad (\text{A.78})$$

Diese kann beispielsweise anhand des Spezialfalls $\sigma = 2$ verifiziert werden. Da $\gamma^*(0, x) = 1$ kann das im Fall $\sigma = 2$ resultierende Integral über t gemäß Gleichung (3.471 9.) in [99] analytisch ausgeführt werden. Dies ergibt unmittelbar die Reihendarstellung (A.62) der Funktion $Q_{d,2}(y)$.

Die k -Summe in Gleichung (A.78) kann nun mit Hilfe der Jacobischen Theta-Funktion (siehe z.B. §§ 8.18 und 8.19 in [99])

$$\vartheta_3(z, q) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} q^{n^2} e^{2inz} \quad (\text{A.79})$$

dargestellt werden. Somit folgt

$$Q_{d,\sigma}(y) = \frac{y}{2(4\pi)^{d/2}} \int_0^\infty dt t^{(2-d-\sigma)/2} e^{-yt} \left[\vartheta_3\left(0, e^{-1/(4t)}\right) - 1 \right] \gamma^*\left(\frac{2-\sigma}{2}, -yt\right) \quad (\text{A.80})$$

und durch Ableiten dieses Ausdrucks nach dem Parameter d

$$R_{d,\sigma}(y) = -\frac{y}{4(4\pi)^{d/2}} \int_0^\infty dt t^{(2-d-\sigma)/2} e^{-yt} \left[\vartheta_3\left(0, e^{-1/(4t)}\right) - 1 \right] \gamma^*\left(\frac{2-\sigma}{2}, -yt\right) \log(4\pi t). \quad (\text{A.81})$$

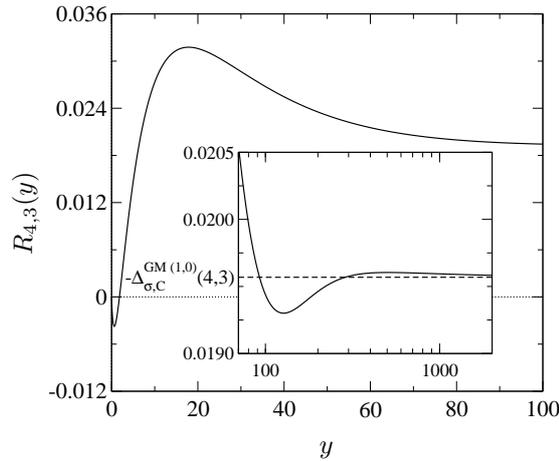


Abbildung 37: Auftragung der Funktion $R_{4,3}(y)$. Die eingeschobene Abbildung zeigt das Verhalten der Funktion bei großen Werten ihres Argumentes und die Annäherung an ihren Wert im Limes $y \rightarrow \infty$, der sich gemäß den Gleichungen (A.85b) und (A.87) mit $d = 4$ und $\sigma = 3$ zu $-\Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}(1,0)}(4,3) = 3\{\zeta(5)[\log(\pi) - \psi(\frac{5}{2})] - 2\zeta'(5)\}/(8\pi^2)$ ergibt.

Für vorgegebene Werte der Parameter d und σ kann dieses Integral mit Hilfe numerischer Verfahren ausgewertet werden. Dabei gilt für den im Fall $d = 4$ und $\sigma = 3$ auftretenden Wert der unvollständigen Gamma-Funktion gemäß den Gleichungen (6.5.16) und (6.5.23) in [122]

$$\gamma^*(-\frac{1}{2}, -x) = \frac{e^x}{\sqrt{\pi}} - \sqrt{x} \operatorname{erfi}(\sqrt{x}) \quad (\text{A.82})$$

mit der imaginären Fehlerfunktion $\operatorname{erfi}(z) \equiv -i \operatorname{erf}(iz)$.

Die auf diese Weise berechnete Funktion $R_{4,3}(y)$ ist in Abbildung 37 aufgetragen.

A.4.4 Asymptotisches Verhalten der Funktionen $Q_{d,\sigma}(y)$ und $R_{d,\sigma}(y)$

Im Folgenden soll das asymptotische Verhalten der Funktionen $Q_{d,\sigma}(y)$ und $R_{d,\sigma}(y)$ in den Grenzfällen $y \rightarrow \infty$ und $y \rightarrow 0$ untersucht werden. Dabei ist auch hier zwischen den Fällen $\sigma = 2$ und $\sigma \neq 2$ zu unterscheiden.

Um das asymptotische Verhalten der Funktion $Q_{d,2}(y)$ im Grenzfall $y \rightarrow \infty$ zu bestimmen, wird die Bessel-Funktion $K_n(x)$ auf der rechten Seite von Gleichung (A.62) durch den ersten Term ihrer asymptotischen Reihenentwicklung (A.63) für große Werte ihres Arguments ersetzt. Die m -Summation kann dann analytisch ausgeführt werden und eine Entwicklung des dabei erhaltenen Ausdrucks für große Werte von y ergibt einen exponentiellen Abfall der Funktion $Q_{d,2}(y)$ von der Form

$$Q_{d,2}(y) \underset{y \rightarrow \infty}{=} \frac{y^{(d+1)/4}}{2(2\pi)^{(d-1)/2}} e^{-\sqrt{y}} \left[1 + O(y^{-1/2}) \right]. \quad (\text{A.83a})$$

Das entsprechende asymptotische Verhalten der Funktion $R_{d,2}(y)$ kann durch Ableiten der vorangegangenen Gleichung nach d erhalten werden und lautet daher

$$R_{d,2}(y) \underset{y \rightarrow \infty}{=} \frac{y^{(d+1)/4} \log\left(\frac{\sqrt{y}}{2\pi}\right)}{4(2\pi)^{(d-1)/2}} e^{-\sqrt{y}} \left[1 + O(y^{-1/2})\right]. \quad (\text{A.83b})$$

Um den Fall $\sigma \neq 2$ zu behandeln, wird auf die in Gleichung (A.80) angegebene Integraldarstellung der Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ mit der unvollständigen Gamma-Funktion $\gamma^*(a, x)$ zurückgegriffen und diese durch ihre asymptotische Reihenentwicklung (siehe z.B. § 8.35 in [99])

$$\gamma^*(a, x) = x^{-a} - \frac{e^{-x}}{x\Gamma(a)} \left[\sum_{n=0}^{r-1} \frac{\Gamma(1-a+n)}{(-x)^n \Gamma(1-a)} + O(x^{-r}) \right] \quad (\text{A.84})$$

ersetzt. Die t -Integration kann dann ausgeführt werden und man erhält eine asymptotische Reihenentwicklung der Funktion $Q_{d,\sigma \neq 2}(y)$ nach inversen Potenzen von y gegeben durch

$$Q_{d,\sigma \neq 2}(y) \underset{y \rightarrow \infty}{=} -\Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d, \sigma) + \frac{2^{\sigma-2}}{\pi^{d/2}} \sum_{j=1}^{r-1} \frac{4^j \Gamma\left(\frac{d+\sigma}{2} + j - 1\right) \zeta(d + \sigma - 2 + 2j)}{(-y)^j \Gamma\left(1 - j - \frac{\sigma}{2}\right)} + O(y^{-r}) \quad (\text{A.85a})$$

mit der Casimir-Amplituden $\Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d, \sigma)$ des Gaußschen Modells, die in Gleichung (2.76b) definiert ist. Im Unterschied zu dem im Fall $\sigma = 2$ auftretenden exponentiellen Abfall, ist im Fall $\sigma \neq 2$ somit ein algebraischer Abfall der Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ für große Werte von y zu beobachten. Die asymptotische Reihenentwicklung der Funktion $R_{d,\sigma \neq 2}(y)$ folgt nun wiederum durch Ableiten von Gleichung (A.85a) nach d . Dies ergibt

$$\begin{aligned} R_{d,\sigma \neq 2}(y) \underset{y \rightarrow \infty}{=} & -\Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}(1,0)}(d, \sigma) + \frac{2^{\sigma-2}}{2\pi^{d/2}} \sum_{j=1}^{r-1} \left[\frac{4^j \Gamma\left(\frac{d+\sigma}{2} + j - 1\right)}{(-y)^j \Gamma\left(1 - j - \frac{\sigma}{2}\right)} \right. \\ & \times \left. \left\{ \zeta(d + \sigma - 2 + 2j) \left[\psi\left(\frac{d+\sigma}{2} + j - 1\right) - \log(\pi) \right] + 2\zeta'(d + \sigma - 2 + 2j) \right\} \right] \\ & + O(y^{-r}) \end{aligned} \quad (\text{A.85b})$$

mit der in Gleichung (2.69) eingeführten Digamma-Funktion $\psi(x)$, der Ableitung der Riemannschen Zeta-Funktion

$$\zeta'(s) \equiv \frac{d\zeta(s)}{ds}, \quad (\text{A.86})$$

und der Ableitung der Amplituden $\Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d, \sigma)$, Gleichung (2.76b), nach ihrem ersten Argument,

$$\Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}(1,0)}(d, \sigma) \equiv \frac{\partial \Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d, \sigma)}{\partial d} \quad (\text{A.87a})$$

$$= \frac{2^{\sigma-3} \Gamma\left(\frac{d+\sigma-2}{2}\right)}{\pi^{d/2} \Gamma\left(1 - \frac{\sigma}{2}\right)} \left\{ \zeta(d + \sigma - 2) \left[\log(\pi) - \psi\left(\frac{d+\sigma-2}{2}\right) \right] - 2\zeta'(d + \sigma - 2) \right\}. \quad (\text{A.87b})$$

Den asymptotischen Reihenentwicklungen (A.85a) und (A.85b) entsprechend, ergibt sich das führende asymptotische Verhalten der Funktionen $Q_{d,\sigma\neq 2}(y)$ und $R_{d,\sigma\neq 2}(y)$ im Grenzfall $y \rightarrow \infty$ zu

$$Q_{d,\sigma\neq 2}(y) \underset{y \rightarrow \infty}{=} -\Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}}(d, \sigma) - \frac{D(d, \sigma)}{y} + O(y^{-2}) \quad (\text{A.88a})$$

beziehungsweise

$$R_{d,\sigma\neq 2}(y) \underset{y \rightarrow \infty}{=} -\Delta_{\sigma,C}^{\text{GM}(1,0)}(d, \sigma) - \frac{D^{(1,0)}(d, \sigma)}{y} + O(y^{-2}) \quad (\text{A.88b})$$

mit dem Koeffizienten

$$D(d, \sigma) = \frac{2^\sigma \Gamma\left(\frac{d+\sigma}{2}\right) \zeta(d+\sigma)}{\pi^{d/2} \Gamma\left(-\frac{\sigma}{2}\right)} \quad (\text{A.89a})$$

und seiner Ableitung nach d ,

$$D^{(1,0)}(d, \sigma) \equiv \frac{\partial D(d, \sigma)}{\partial d} \quad (\text{A.89b})$$

$$= \frac{2^{\sigma-1} \Gamma\left(\frac{d+\sigma}{2}\right)}{\pi^{d/2} \Gamma\left(-\frac{\sigma}{2}\right)} \left\{ \zeta(d+\sigma) \left[\psi\left(\frac{d+\sigma}{2}\right) - \log(\pi) \right] + 2\zeta'(d+\sigma) \right\}. \quad (\text{A.89c})$$

Das asymptotische Verhalten der Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ im Grenzfall $y \rightarrow 0$ kann unmittelbar anhand ihrer allgemeinen Potenzreihendarstellung (A.59) bestimmt werden. Entwickelt man diese um den jeweiligen Wert des Parameters d bei vorgegebenem Wert des Parameters σ , so treten einfache Pole in dem Koeffizienten des Terms von der Ordnung $O(y^{\lfloor (d+\sigma-2)/2 \rfloor})$ auf. Diese Pole heben sich auf, und der Vorfaktor dieses Terms wird modifiziert durch einen Beitrag $\propto \log y$. Auf diese Weise ergeben sich die Entwicklungen der in dieser Arbeit benötigten Funktionen um $y = 0$ zu

$$Q_{1,2}(y) \underset{y \rightarrow 0}{=} \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{y}}{4} + \frac{y}{24} - \frac{y^2}{1440} + O(y^3), \quad (\text{A.90a})$$

$$Q_{2,2}(y) \underset{y \rightarrow 0}{=} \frac{\sqrt{y}}{4} + \left[\log\left(\frac{\sqrt{y}}{4\pi}\right) + \gamma \right] \frac{y}{4\pi} - \frac{\zeta(3)y^2}{32\pi^3} + O(y^3), \quad (\text{A.90b})$$

$$Q_{3,2}(y) \underset{y \rightarrow 0}{=} -\frac{y \log(y)}{8\pi} + \frac{y^{3/2}}{8\pi} - \frac{y^2}{96\pi} + O(y^3), \quad (\text{A.90c})$$

$$Q_{4,2}(y) \underset{y \rightarrow 0}{=} \frac{y}{24} - \frac{y^{3/2}}{8\pi} - \left[\log\left(\frac{\sqrt{y}}{4\pi}\right) + \gamma - \frac{1}{2} \right] \frac{y^2}{16\pi^2} + O(y^3), \quad (\text{A.90d})$$

$$Q_{5,2}(y) \underset{y \rightarrow 0}{=} \frac{\zeta(3)y}{8\pi^2} + \left[\log(y) - 1 \right] \frac{y^2}{32\pi^2} - \frac{y^{5/2}}{48\pi^2} + O(y^3), \quad (\text{A.90e})$$

$$Q_{6,2}(y) \underset{y \rightarrow 0}{=} \frac{\pi y}{360} - \frac{y^2}{96\pi} + \frac{y^{5/2}}{48\pi^2} + O(y^3), \quad (\text{A.90f})$$

und

$$Q_{3,3}(y) \underset{y \rightarrow 0}{=} \frac{y}{12} - \frac{y^{3/2}}{8} - \left[\log\left(\frac{\sqrt{y}}{2\pi}\right) + \gamma - 1 \right] \frac{y^2}{4\pi^2} + O(y^3), \quad (\text{A.90g})$$

$$Q_{4,3}(y) \underset{y \rightarrow 0}{=} \frac{\zeta(3)y}{4\pi^2} + \left[\log(4y) - 2 \right] \frac{y^2}{8\pi^2} - \frac{y^{5/2}}{32\pi} + O(y^3). \quad (\text{A.90h})$$

Die allgemeine Potenzreihendarstellung der Funktion $R_{d,\sigma}(y)$ kann durch Ableiten von Gleichung (A.59) nach d erhalten werden. Entwickelt man den sich auf diese Weise ergebenden Ausdruck um $(d, \sigma) = (6, 2)$ und $(d, \sigma) = (4, 3)$, folgt daraus

$$R_{6,2}(y) \underset{y \rightarrow 0}{=} \left[\gamma + \log(4\pi) - 240\zeta'(-3) - \frac{8}{3} \right] \frac{\pi y}{720} + \left[\gamma + \log(4\pi) - 24 \log(A) \right] \frac{y^2}{192\pi} \\ + \left[\log\left(\frac{y}{\pi}\right) + \gamma - \frac{8}{3} \right] \frac{y^{5/2}}{96\pi^2} + O(y^3 \log^2(y)) \quad (\text{A.91a})$$

und

$$R_{4,3}(y) \underset{y \rightarrow 0}{=} \left[2 - \log(4\pi) - \gamma + \frac{2\zeta'(3)}{\zeta(3)} \right] \frac{\zeta(3)y}{8\pi^2} + \left\{ c_1 [\log(4y) - 2] + c_2(y) \right\} \frac{y^2}{8\pi^2} \\ + \left[c_3(y) - \frac{c_1}{32\pi} \right] y^{5/2} + O(y^3) \quad (\text{A.91b})$$

mit der Glaisher-Kinkelin-Konstanten $A \equiv e^{1/12 - \zeta'(-1)} = 1.282427\dots$, den Koeffizienten

$$c_1 = \frac{\log(4\pi) + \gamma - 2}{2}, \quad (\text{A.92a})$$

$$c_2(y) = \frac{1}{8\pi^2} \left[\log^2\left(\frac{\sqrt{y}}{2\pi}\right) + 2 \log(4\pi) - \log^2(\pi) - \frac{\pi^2}{6} - 4 \log(2) \log(2\pi) + \gamma^2 + 2\gamma_1^2 \right], \quad (\text{A.92b})$$

$$c_3(y) = -\frac{1}{64\pi} \left[\log\left(\frac{y}{16\pi^2}\right) + 1 \right], \quad (\text{A.92c})$$

und der Stieltjes-Konstanten $\gamma_1 = -0.072815\dots$. Dabei gibt es, neben dem bereits erörterten Mechanismus der zu logarithmischen Beiträgen $\propto \log y$ in der Potenzreihenentwicklung der Funktion $Q_{d,\sigma}(y)$ um $y = 0$ führt, in der entsprechenden Entwicklung der Funktion $R_{d,\sigma}(y)$ eine weitere Quelle solcher Terme. Leitet man Gleichung (A.59) nach d ab, treten weitere Logarithmen von y in den Vorfaktoren der Terme proportional zu $y^{(d+\sigma-3)/2}$ und $y^{(d+\sigma-2)/2}$ auf, da

$$\frac{\partial y^{(d+\alpha)/2}}{\partial d} = \frac{1}{2} y^{(d+\alpha)/2} \log(y). \quad (\text{A.93})$$

Literaturverzeichnis

- [1] H. B. G. Casimir, *On the attraction between two perfectly conducting plates*, Proc. K. Ned. Akad. Wet., Ser. B, **51**, 793 (1948). → S. 1, 6
- [2] S. K. Lamoreaux, *Demonstration of the Casimir Force in the 0.6 to 6 μm Range*, Phys. Rev. Lett. **78**, 5 (1997), [Erratum: **81**, 5475 (1998)]. → S. 1, 6
- [3] U. Mohideen und A. Roy, *Precision Measurement of the Casimir force from 0.1 to 0.9 μm* , Phys. Rev. Lett. **81**, 4549 (1998). → S. 1, 7
- [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. Paris Série B **287**, 207 (1978). → S. 1, 2, 8, 10
- [6] H. Li und M. Kardar, *Fluctuation-induced Forces between Rough Surfaces*, Phys. Rev. Lett. **67**, 3275 (1991). → S. 1, 13
- [7] H. Li und M. Kardar, *Fluctuation-induced forces between manifolds immersed in correlated fluids*, Phys. Rev. A **46**, 6490 (1992). → S. 1, 10, 13
- [8] M. Kardar und R. Golestanian, *The “friction” of vacuum, and other fluctuation-induced Forces*, Rev. Mod. Phys. **71**, 1233 (1999). → S. 1, 13
- [9] 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, 10, 11, 13
- [10] M. Krech, *Fluctuation-induced forces in critical fluids*, J. Phys.: Condens. Matter **11**, R391 (1999). → S. 2, 3, 11, 14
- [11] S. Balibar und R. Ishiguro, *Critical Casimir forces and anomalous wetting*, Pramana–J. Phys. **64**, 743 (2005). → S. 2, 10, 14
- [12] F. London, *Zur Theorie und Systematik der Molekularkräfte*, Z. Phys. **63**, 245 (1930). → S. 2

- [13] 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. 2
- [14] H. Chamati und D. M. Dantchev, *Renormalization group treatment of the scaling properties of finite systems with subleading long-range interaction*, Eur. Phys. J. B **26**, 89 (2002). → S. 2, 4, 15, 33, 63
- [15] D. Iagolnitzer und B. Souillard, *Decay of correlations for slowly decreasing potentials*, Phys. Rev. A **16**, 1700 (1977). → S. 2, 20
- [16] D. Dantchev, *Two-point correlation function in systems with van der Waals type interaction*, Eur. Phys. J. B **23**, 211 (2001). → S. 2, 20, 21, 37
- [17] M. E. Fisher, *Correlation Functions and the Critical Region of Simple Fluids*, J. Math. Phys. **5**, 944 (1964). → S. 2, 9
- [18] X. S. Chen und V. Dohm, *Relation between bulk order-parameter correlation function and finite-size scaling*, Eur. Phys. J. B **15**, 283 (2000). → S. 2
- [19] D. Dantchev und J. Rudnick, *Subleading long-range interactions and violations of finite size scaling*, Eur. Phys. J. B **21**, 251 (2001). → S. 2, 120, 133
- [20] X. S. Chen und V. Dohm, *Nonuniversal size dependence of the free energy of confined systems near criticality*, Phys. Rev. E **66**, 016102 (2002), [Erratum: **66**, 059901 (2002)]. → S. 2, 17, 19, 20, 133
- [21] D. Dantchev, M. Krech und S. Dietrich, *Universality of the thermodynamic Casimir effect*, Phys. Rev. E **67**, 066120 (2003). → S. 2, 10
- [22] X. S. Chen und V. Dohm, *Non-universal critical Casimir force in confined ^4He near the superfluid transition*, Physica B **329–333**, 202 (2003). → S. 2, 17, 20, 63
- [23] D. Dantchev, F. Schlesener und S. Dietrich, *Interplay of critical Casimir and dispersion forces*, Phys. Rev. E **76**, 011121 (2007). → S. 3
- [24] M. Krech, *Casimir Effect in Critical Systems*, World Scientific, Singapore 1994. → S. 3, 10
- [25] M. Krech, *Casimir forces in binary liquid mixtures*, Phys. Rev. E **56**, 1642 (1997). → S. 3, 10, 93, 94, 108, 114
- [26] H. E. Stanley, *Spherical Model as the Limit of Infinite Spin Dimensionality*, Phys. Rev. **176**, 718 (1968). → S. 3
- [27] 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. 3

- [28] M. Kac und C. J. Thompson, *The Fully Finite Spherical Model*, Phys. Norv. **5**, 163 (1971).
→ S. 3
- [29] M. Krech und S. Dietrich, *Finite-Size Scaling for Critical Films*, Phys. Rev. Lett. **66**, 345 (1991), [Erratum: **67**, 1055 (1991)]. → S. 4, 10, 60, 93, 122
- [30] M. Krech und S. Dietrich, *Free energy and specific heat of critical films and surfaces*, Phys. Rev. A **46**, 1886 (1992). → S. 4, 10, 60, 61, 62, 77, 78, 79, 93, 94, 96, 98, 99, 100, 108, 122, 130
- [31] 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. 4, 21, 60, 78, 79, 80
- [32] H. W. Diehl, *The theory of boundary critical phenomena*, Int. J. Mod. Phys. B **11**, 3503 (1997). → S. 4, 60
- [33] 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*, Europhys. Lett. **75**, 241 (2006). → S. 4, 5, 61, 62, 64, 69, 72, 113
- [34] A. Hucht, unveröffentlicht. → S. 5, 10, 108, 114
- [35] P. Bachmann, *Analytische Zahlentheorie*, Bd. 2, Teubner, Leipzig 1894. → S. 5
- [36] E. Landau, *Handbuch der Lehre von der Verteilung der Primzahlen*, Teubner, Leipzig 1909, Nachdruck: Chelsea, New York 1953. → S. 5
- [37] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, G. Musiol und H. Mühlig, *Taschenbuch der Mathematik*, Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt/Main, 3. Aufl. 1997. → S. 5
- [38] S. Wolfram, *The Mathematica Book*, Wolfram Media, Cambridge University Press, 4. Aufl. 1999. → S. 5
- [39] 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. 5, 15, 16, 33, 86
- [40] D. Grüneberg und H. W. Diehl, *Thermodynamic Casimir effects involving interacting field theories with zero modes* (2007), eingereicht und akzeptiert bei Phys. Rev. B, cond-mat/0710.4436. → S. 5, 78
- [41] 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. 6

- [42] B. V. Derjaguin und I. I. Abrikosova, *Direct measurement of the molecular attraction of solid bodies. I. Statement of the problem and method of measuring forces by using negative feedback*, Sov. Phys.-JETP **3**, 819 (1957). → S. 6
- [43] M. J. Sparnaay, *Measurements of attractive forces between flat plates*, Physica **24**, 751 (1958). → S. 6
- [44] 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. 6
- [45] J. Blocki, J. Randrup, W. J. Swiatecki und C. F. Tsang, *Proximity forces*, Ann. Phys. (N.Y.) **105**, 427 (1977). → S. 7
- [46] G. Bressi, G. Carugno, R. Onofrio und G. Ruoso, *Measurement of the Casimir force between parallel metallic surfaces*, Phys. Rev. Lett. **88**, 041804 (2002). → S. 8
- [47] T. Ederth, *Template-stripped gold surfaces with 0.4-nm rms roughness suitable for force measurements: Application to the Casimir force in the 20-100-nm range*, Phys. Rev. A **62**, 062104 (2000). → S. 8
- [48] M. Bordag, U. Mohideen und V. M. Mostepanenko, *New Developments in the Casimir Effect*, Phys. Rep. **353**, 1 (2001). → S. 8
- [49] K. A. Milton, *The Casimir effect: Recent controversies and progress*, J. Phys. A **37**, R209 (2004). → S. 8
- [50] V. Mostepanenko und N. N. Trunov, *The Casimir Effect and its Applications*, Clarendon Press, Oxford, UK 1997. → S. 8
- [51] K. A. Milton, *The Casimir Effect*, World Scientific Pub. Co., 1. Aufl. 2001. → S. 8
- [52] V. Privman, *Universal size dependence of the free energy of finite systems near criticality*, Phys. Rev. B **38**, 9261 (1988). → S. 9
- [53] M. N. Barber, *Finite-size Scaling*, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, herausgegeben von C. Domb und J. L. Lebowitz, Bd. 8, Kap. 2, Academic Press, New York 1983. → S. 9, 15
- [54] 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. 9, 15, 17

- [55] M. E. Fisher, *The Theory of Critical Point Singularities*, in *Critical Phenomena*, herausgegeben von M. S. Green, Proceedings of the 51st Enrico Summer School, Varenna, Italy, S. 73–98, Academic Press, New York 1971. → S. 9, 15
- [56] H. B. Tarko und M. E. Fisher, *Theory of critical point scattering and correlations. III. The Ising model below T_c and in a field*, Phys. Rev. B **11**, 1217 (1975). → S. 9, 37, 74
- [57] 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. 9, 10, 23, 24, 25, 27, 28, 29, 37, 94
- [58] K. Symanzik, *Schrödinger Representation and Casimir Effect in Renormalizable Quantum Field Theory*, Nucl. Phys. B **190**, 1 (1981). → S. 10, 60, 122
- [59] M. P. Nightingale und J. O. Indekeu, *Effect of Criticality on Wetting Layers*, Phys. Rev. Lett. **54**, 1824 (1985). → S. 10
- [60] 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 (1992). → S. 10
- [61] E. Eisenriegler, M. Krech und S. Dietrich, *Absence of Hyperuniversality in Critical Films*, Phys. Rev. Lett. **70**, 619 (1993). → S. 10
- [62] M. Krech, E. Eisenriegler und S. Dietrich, *Energy density profiles in critical films*, Phys. Rev. E **52**, 1345–1376 (1995). → S. 10
- [63] P. DiFrancesco, P. Mathieu und D. Senechal, *Conformal field theory*, Springer, Berlin 1997. → S. 10
- [64] D. M. Danchev, *Exact three-dimensional Casimir force amplitude, C function, and Binder's cumulant ratio: Spherical model results*, Phys. Rev. E **58**, 1455 (1998). → S. 10, 50
- [65] D. Dantchev und M. Krech, *The critical Casimir force and its fluctuations in lattice spin models: exact and Monte Carlo results*, Phys. Rev. E **69**, 046119–1–20 (2004). → S. 10, 114
- [66] M. Krech und D. P. Landau, *Casimir effect in critical systems: A Monte Carlo simulation*, Phys. Rev. E **53**, 4414 (1996). → S. 10, 114
- [67] A. Hucht, *The Thermodynamic Casimir Effect in ^4He Films near T_λ : Monte Carlo Results*, Phys. Rev. Lett. **99**, 185301 (2007). → S. 10, 13, 106, 114
- [68] O. Vasilyev, A. Gambassi, A. Maciołek und S. Dietrich, *Monte Carlo simulation for critical Casimir forces*, Europhys. Lett. **80**, 60009 (2007). → S. 10

- [69] A. Mukhopadhyay und B. M. Law, *Critical Casimir Effect in Binary Liquid Wetting Films*, Phys. Rev. Lett. **83**, 772 (1999). → S. 10
- [70] A. Mukhopadhyay und B. M. Law, *Casimir effect in critical films of binary liquid mixtures*, Phys. Rev. E **62**, 5201 (2000). → S. 10
- [71] T. Ueno, S. Balibar, T. Mizusaki, F. Caupin und E. Rolley, *Critical Casimir effect and wetting by helium mixtures*, Phys. Rev. Lett. **90**, 116102–1–4 (2003). → S. 10
- [72] R. Ishiguro und S. Balibar, *New Measurement of Wetting by Helium Mixtures*, J. Low Temp. Phys. **140**, 29 (2005). → S. 10
- [73] 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. 10
- [74] 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. 10, 13
- [75] R. Garcia und M. H. W. Chan, *Critical Casimir effect in dilute ^3He - ^4He mixture films*, Physica B **280**, 55 (2000). → S. 10
- [76] R. Garcia und M. H. W. Chan, *Preliminary Measurement of the Critical Casimir Effect near the Tricritical Point in ^3He - ^4He Mixture Films*, J. Low Temp. Phys. **121**, 495 (2000). → S. 10
- [77] R. Garcia und M. H. W. Chan, *Boundary conditions and critical Casimir forces in helium*, Physica B **329–333**, 238 (2003). → S. 11
- [78] D. J. Wallace und R. K. P. Zia, *Singularities induced by Goldstone modes*, Phys. Rev. B **12**, 5340 (1975). → S. 12
- [79] J. Engels, L. Fromme und M. Seniuch, *Correlation lengths and scaling functions in the three-dimensional $O(4)$ model*, Nucl. Phys. B **675**, 533 (2003). → S. 12
- [80] R. Zandi, J. Rudnick und M. Kardar, *Casimir forces, surface fluctuations, and thinning of superfluid films*, Phys. Rev. Lett. **93**, 155302 (2004). → S. 13, 14
- [81] G. A. Williams, *Vortex Fluctuations in the Critical Casimir Effect of Superfluid and Superconducting Films*, Phys. Rev. Lett. **92**, 197003 (2004), [Reply: **95**, 259702 (2005)]. → S. 13
- [82] D. Dantchev, M. Krech und S. Dietrich, *Thermodynamic Casimir Force in Models of ^4He Films*, Phys. Rev. Lett. **95**, 259701 (2005). → S. 13

- [83] 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. 13
- [84] U. Wolff, *Collective Monte Carlo updating for spin systems*, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989). → S. 13, 106
- [85] A. Hucht, private Mitteilung. → S. 14
- [86] F. Wegner, *Corrections to scaling laws*, Phys. Rev. B **5**, 4529 (1972). → S. 16
- [87] M. E. Fisher, *Scaling, Universality and Renormalization Group Theory*, in *Critical Phenomena*, herausgegeben von F. J. W. Hahne, Bd. 186 von *Lecture Notes in Physics*, S. 1–139, Springer-Verlag, Berlin 1983. → S. 16
- [88] H. Kleinert und V. I. Yukalov, *Self-similar variational perturbation theory for critical exponents*, Phys. Rev. E **71**, 026131 (2005). → S. 16, 32
- [89] K. G. Wilson, *Feynman-Graph Expansion for Critical Exponents*, Phys. Rev. Lett. **28**, 548 (1972). → S. 22, 100
- [90] W. Lenz, *Beitrag zum Verständnis der magnetischen Erscheinungen in festen Körpern*, Z. Phys. **21**, 613 (1920). → S. 23
- [91] E. Ising, *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*, Z. Phys. **31**, 253 (1925). → S. 23
- [92] L. Onsager, *Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition*, Phys. Rev. **65**, 117 (1944). → S. 23
- [93] M. Kac, *The work of T. H. Berlin in statistical mechanics: A personal reminiscence*, Phys. Today **17**, 40 (1964). → S. 23
- [94] T. H. Berlin und M. Kac, *The spherical model of a ferromagnet*, Phys. Rev. **86**, 821 (1952). → S. 23
- [95] H. W. Lewis und G. H. Wannier, *Spherical model of a ferromagnet*, Phys. Rev. **88**, 682 (1952), [Erratum: **90**, 1131 (1953)]. → S. 23
- [96] M. E. Fisher, S. k. Ma und B. G. Nickel, *Critical Exponents for Long-Range Interactions*, Phys. Rev. Lett. **29**, 917 (1972). → S. 26
- [97] M. Moshe und J. Zinn-Justin, *Quantum field theory in the large N limit: a review*, Phys. Rep. **385**, 69 (2003). → S. 34, 119
- [98] F. J. Wegner und E. K. Riedel, *Logarithmic Corrections to the Molecular-Field Behavior of Critical and Tricritical Systems*, Phys. Rev. B **7**, 248 (1973). → S. 34

- [99] I. S. Gradshteyn und I. M. Ryzhik, *Table of integrals, series, and products; corrected and enlarged edition*, Academic Press, London 1980. → S. 39, 117, 123, 125, 126, 128, 130, 131, 132, 133, 135
- [100] S. Sachdev, *Polylogarithm identities in a conformal field theory in three dimensions*, Phys. Lett. B **309**, 285 (1993). → S. 50
- [101] D. O'Connor, C. R. Stephens und A. J. Bray, *Dimensional crossover in the large- N limit*, J. Stat. Phys. **87**, 273 (1997). → S. 61
- [102] M. E. Fisher und M. N. Barber, *Scaling Theory for Finite-Size Effects in the Critical Region*, Phys. Rev. Lett. **28**, 1516 (1972). → S. 61
- [103] F. Freire, D. O'Connor und C. R. Stephens, *Dimensional Crossover and Finite-Size Scaling below T_c* , J. Stat. Phys. **74**, 219 (1994). → S. 61, 74
- [104] E. Brézin und J. Zinn-Justin, *Finite Size Effects in Phase Transitions*, Nucl. Phys. B **257**, 867 (1985). → S. 62
- [105] J. Rudnick, H. Guo und D. Jasnow, *Finite-Size Scaling and the Renormalization Group*, J. Stat. Phys. **41**, 353 (1985). → S. 62
- [106] H. W. Diehl, *Finite Size Effects in Critical Dynamics and the Renormalization Group*, Z. Phys. B **66**, 211 (1987). → S. 62
- [107] Y. Y. Goldschmidt, *Finite size scaling effects in dynamics*, Nucl. Phys. B **280**, 340 (1987). → S. 62
- [108] J. C. Niel und J. Zinn-Justin, *Finite size effects in critical dynamics*, Nucl. Phys. B **280**, 355 (1987). → S. 62
- [109] D. Grüneberg, *Untersuchung der kritischen Eigenschaften zweidimensionaler Isingmodelle mit langreichweitigen Wechselwirkungen: Theorie und Simulation*, Diplomarbeit, Universität Duisburg-Essen, Campus Duisburg 2003. → S. 62, 109
- [110] D. Grüneberg und A. Hucht, *Universal finite-size scaling analysis of Ising models with long-range interactions at the upper critical dimensionality: Isotropic case*, Phys. Rev. E **69**, 036104 (2004). → S. 62, 109
- [111] H. Chamati, *Finite-size scaling in systems with long-range interaction*, Eur. Phys. J. B **24**, 241 (2001). → S. 63
- [112] D. J. Amit, *Field theory, the renormalization group, and critical phenomena*, World Scientific, Singapore, 2. Aufl. 1984. → S. 64, 76, 77

- [113] N. Goldenfeld, *Lectures on phase transitions and the renormalization group*, Addison-Wesley 1992. → S. 66
- [114] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, International series of monographs on physics, Clarendon Press, Oxford, 3. Aufl. 1996. → S. 67, 76
- [115] M. L. Bellac, *Quantum and Statistical Field Theory*, Clarendon Press, Oxford, 1. Aufl. 1991. → S. 69, 76, 95
- [116] A. Hucht, *On the symmetry of universal finite-size scaling functions in anisotropic systems*, J. Phys A: Math. Gen. **35**, L481 (2002). → S. 109
- [117] E. Luijten und H. W. J. Blöte, *Monte Carlo method for spin models with long-range interactions*, Int. J. Mod. Phys. C **6**, 359 (1995). → S. 109
- [118] E. Luijten und H. W. J. Blöte, *Classical critical behavior of spin models with long-range interactions*, Phys. Rev. B **56**, 8945 (1997). → S. 109
- [119] E. Brézin, J. C. Le Guillou und J. Zinn-Justin, *Field Theoretical Approach to Critical Phenomena*, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, herausgegeben von C. Domb und M. S. Green, Bd. 6, Kap. 3, S. 125–247, Academic, London 1976. → S. 115
- [120] I. M. Gel'fand und G. E. Shilov, *Generalized Functions*, Bd. 1, S. 1–423, Academic, New York und London (1964). → S. 116
- [121] P. M. Morse und M. Feshbach, *Methods Of Theoretical Physics, Part I*, McGraw-Hill, New York 1953. → S. 116
- [122] M. Abramowitz und I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publ., New York, 9. Aufl. 1972. → S. 126, 130, 133, 134
- [123] E. Elizalde und A. Romeo, *Expressions for the zeta-function regularized Casimir energy*, J. Math. Phys. **30**, 1133 (1989), [Erratum: **31**, 771 (1990)]. → S. 128
- [124] E. R. Korutcheva und N. S. Tonchev, *Finite-size effects in a field-theoretic model with long-range exchange interaction*, J. Stat. Phys. **62**, 553 (1991). → S. 133

Abbildungsverzeichnis

1	Die von Casimir betrachtete Zweiplattengeometrie	6
2	Versuchsaufbau und Messergebnisse von Mohideen und Roy	7
3	Versuchsaufbau und Messergebnisse von Garcia und Chan	11
4	Experimentell bestimmte <i>Finite-Size</i> -Skalenfunktion ϑ von Garcia und Chan	13
5	<i>Finite-Size</i> -Skalenfunktion ϑ im XY-Modell mit offenen Randbedingungen in $d = 3$	14
6	Die Skalenfunktion $R_0(\check{r}_\infty, 0)$	40
7	Die Skalenfunktion $R_\sigma(\check{r}_\infty, 0; L)$ mit $L = 20, 50, 100, 500$	40
8	Die Skalenfunktion $R_\omega(\check{r}_\infty, 0)$	40
9	Die Skalenfunktion $Y_0(\check{r}_\infty, 0)$	51
10	Die Skalenfunktion $Y_\sigma(\check{r}_\infty, 0; L)$ mit $L = 20, 50, 100, 500$	51
11	Die Skalenfunktion $Y_\omega(\check{r}_\infty, 0)$	51
12	Exzess-Freie-Energie mit $L = 50, b = 0$ und $b = 2/3$ über L/ξ_∞	53
13	Exzess-Freie-Energie mit $L = 20, 50, 100, 500, \infty$ und $b = 2/3$ über L/ξ_∞	53
14	Die Skalenfunktion $\vartheta_0(\check{r}_\infty, 0)$	57
15	Die Skalenfunktion $\vartheta_\sigma(\check{r}_\infty, 0; L)$ mit $L = 20, 50, 100, 500$	57
16	Die Skalenfunktion $\vartheta_\omega(\check{r}_\infty, 0)$	57
17	Casimir-Kraft mit $L = 50, b = 0$ und $b = 2/3$ über L/ξ_∞	59
18	Casimir-Kraft mit $L = 20, 50, 100, 500, \infty$ und $b = 2/3$ über L/ξ_∞	59
19	Die Skalenfunktion $\mathcal{R}_0(\check{r}_\infty)$	85
20	Die Skalenfunktion $\mathcal{R}_\sigma(\check{r}_\infty)$	85
21	Die Skalenfunktion $\mathcal{R}_\omega(\check{r}_\infty)$	85
22	Die Skalenfunktion $\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty)$	97
23	Die Skalenfunktion $\mathcal{Y}_\sigma(\check{r}_\infty)$	97
24	Die Skalenfunktion $\mathcal{Y}_\omega(\check{r}_\infty)$	97
25	Die Skalenfunktionen $\mathcal{Y}_0(\check{r}_\infty)$ und $\tilde{\mathcal{Y}}_0(\check{r}_\infty)$ mit $\epsilon = 1$ und $n = 1$ über L/ξ_∞	98
26	Exzess-Freie-Energie mit $L = 50, g_\sigma = 0$ und $g_\sigma = 2/3$ über L/ξ_∞	101
27	Exzess-Freie-Energie mit $L = 20, 50, 100, 500, \infty$ und $g_\sigma = 2/3$ über L/ξ_∞	101

28	Die Skalenfunktion $\Theta_0(\check{r}_\infty)$	105
29	Die Skalenfunktion $\Theta_\sigma(\check{r}_\infty)$	105
30	Die Skalenfunktion $\Theta_\omega(\check{r}_\infty)$	105
31	Casimir-Kraft mit $L = 50$, $g_\sigma = 0$ und $g_\sigma = 2/3$ über L/ξ_∞	107
32	Casimir-Kraft mit $L = 20, 50, 100, 500, \infty$ und $g_\sigma = 2/3$ über L/ξ_∞	107
33	Vergleich der Skalenfunktion $\Theta_0(\check{r}_\infty)$ mit Monte Carlo-Resultaten	108
34	Die Funktionen $Q_{d,2}(y)$ mit $d = 1, 2, 3, 4, 5, 6$	129
35	Die Funktion $R_{6,2}(y)$	131
36	Die Funktionen $Q_{3,3}(y)$ und $Q_{4,3}(y)$	132
37	Die Funktion $R_{4,3}(y)$	134

Tabellenverzeichnis

1	Werte der Exponenten η und ω im $O(n)$ -symmetrischen Modell in $d = 3$	16
2	Schätzwerte für die Casimir-Amplitude $\Delta_C(d, n)$ in $d = 3$	93

Danksagung

Zunächst möchte ich Prof. Dr. Hans Werner Diehl ganz herzlich für seine Unterstützung und die freundliche Betreuung dieser Arbeit danken, und nichtzuletzt auch für die vielen ergebnisreichen Diskussionen, die in großem Maße zum Gelingen der Arbeit beigetragen haben.

Für viele hilfreiche Diskussionen und die gute Arbeitsatmosphäre danke ich auch Dr. Alfred Hucht, Prof. Dr. Daniel Dantchev, Dr. Mykola Shpot, Dr. Sergej Rutkevich, Dr. Olaf Stenull, Dr. Hassan Chamati und unseren drei (Noch-)Diplomanden Matthias Burgsmüller, Denis Comtesse und Felix Schmidt.

Bei Sascha Brand bedanke ich mich für seine Mithilfe beim Korrekturlesen der Arbeit.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danke ich für die Förderung im Rahmen des Projektes Die-378/5.

Meiner Mutter Claudia Grüneberg und meiner Familie danke ich schließlich dafür, dass sie mich stets in jeglicher Hinsicht unterstützt haben.