

Kapitel 2

Feldquantisierung in absorbierenden Medien

Wie aus der Photonik bzw. der Atomphysik bekannt ist, wird das uns umgebene elektromagnetische Feld durch seine quantenmechanischen Eigenschaften charakterisiert, die wesentlich zum Verständnis elementarer Prozesse wie der spontaner Emission oder der Lambverschiebung von Atomen beitragen. Diese Phänomene rühren von den Quantenfluktuationen des elektromagnetischen Feldes, die selbst im quantenmechanischen Grundzustand vorliegen, her. Wir werden in diesem Kapitel sehen, wie zum Einen eine konsistente Quantentheorie des Lichts in Anwesenheit von Medien konstruiert werden kann, und zum Anderen wie die daraus resultierenden modifizierten Feldfluktuationen zu physikalisch messbaren Konsequenzen führen.

2.1 Feldquantisierung im freien Raum

Wir beginnen zunächst mit einer kurzen Zusammenfassung der wichtigsten Schritte der Feldquantisierung im freien Raum.¹ Beginnend mit den Maxwell'schen Gleichungen im freien Raum und ohne äußere Quellen,

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\dot{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, t), \quad (2.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \dot{\mathbf{D}}(\mathbf{r}, t), \quad (2.1b)$$

¹Eine ausführliche Darstellung finden Sie in Kap.6 meines Vorlesungsskripts 'Grundlagen der Photonik' bzw. in den in der Literaturliste angegebenen Quantenoptiklehrbüchern.

findet man unter Zuhilfenahme der Materialgleichungen ($\varepsilon_0\mu_0 = 1/c^2$)

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_0\mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\mu_0}\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \quad (2.2)$$

zunächst den Satz von Gleichungen

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\dot{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, t), \quad (2.3a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad \nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c^2}\dot{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, t) \quad (2.3b)$$

für das elektrische Feld $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ und das Induktionsfeld $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$. Die Gleichungen (2.3a) werden durch die Einführung des Vektorpotentials $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ und des skalaren Potentials $\phi(\mathbf{r}, t)$ über

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla\phi(\mathbf{r}, t) - \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \quad (2.4)$$

identisch gelöst. Die verbleibenden Gleichungen (2.3b) liefern dann Differentialgleichungen für die Potentiale. In der Coulombbeziehung (oder transversalen Eichung)

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.5)$$

reduzieren sich diese auf die Wellengleichung²

$$\Delta\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c^2}\ddot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (2.6)$$

Die Lösungen der Wellengleichung (2.6) erhält man durch einen Separationsansatz, in dem das Vektorpotential in Produkte von Funktionen, die nur vom Ort bzw. der Zeit abhängen, aufgespalten wird,

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\lambda} c_{\lambda}\mathbf{A}_{\lambda}(\mathbf{r})u_{\lambda}(t). \quad (2.7)$$

Mit der Separationskonstanten ω_{λ}^2/c^2 zerfällt Gl. (2.6) in

$$\Delta\mathbf{A}_{\lambda}(\mathbf{r}) + \frac{\omega_{\lambda}^2}{c^2}\mathbf{A}_{\lambda}(\mathbf{r}) = 0, \quad \ddot{u}_{\lambda}(t) + \omega_{\lambda}^2u_{\lambda}(t) = 0. \quad (2.8)$$

Die Helmholtzgleichung für die räumlichen Modenfunktionen $\mathbf{A}_{\lambda}(\mathbf{r})$ kann als Eigenwertgleichung des hermiteschen Operators $-\Delta$ mit den Eigenwerten

²Mit den notwendigen Randbedingungen im Unendlichen verschwindet das skalare Potential $\phi(\mathbf{r}, t)$.

ω_λ^2/c^2 und den Eigenfunktionen $\mathbf{A}_\lambda(\mathbf{r})$ angesehen werden. Letztere bilden somit ein vollständiges Orthonormalsystem, das heißt, es gilt

$$|c_\lambda|^2 \int d^3r \mathbf{A}_\lambda^*(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}_{\lambda'}(\mathbf{r}) = \delta_{\lambda\lambda'}, \quad \sum_\lambda |c_\lambda|^2 \mathbf{A}_\lambda(\mathbf{r}) \otimes \mathbf{A}_\lambda^*(\mathbf{r}') = \boldsymbol{\delta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \quad (2.9)$$

Beispiele für solche Funktionen sind transversale ebene Wellen, $\mathbf{A}_\lambda(\mathbf{r}) \propto \mathbf{e}_\sigma e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ [$\lambda = (\mathbf{k}\sigma)$] mit orthogonalen Polarisationsvektoren \mathbf{e}_σ und Wellenzahlen $|\mathbf{k}| = \omega/c$, Zylinderwellen oder Kugelwellen.

Die zeitlichen Amplitudenfunktionen $u_\lambda(t)$ hingegen beschreiben harmonische Oszillationen mit den Frequenzen ω_λ . Teilt man diese in ihre Real- und Imaginärteile derart auf, dass

$$q_{\mathbf{k}\sigma} = \sqrt{\varepsilon_0} (u_{\mathbf{k}\sigma} + u_{\mathbf{k}\sigma}^*), \quad p_{\mathbf{k}\sigma} = -i\omega\sqrt{\varepsilon_0} (u_{\mathbf{k}\sigma} - u_{\mathbf{k}\sigma}^*) \quad (2.10)$$

gilt, dann kann man zeigen, dass die klassische Hamiltonfunktion des elektromagnetischen Feldes, also die elektromagnetische Feldenergie, als

$$H = \frac{1}{2} \sum_\sigma \int d^3k (p_{\mathbf{k}\sigma}^2 + \omega^2 q_{\mathbf{k}\sigma}^2) \quad (2.11)$$

geschrieben werden kann. Mit dieser Darstellung wird klar, dass es sich bei dem elektromagnetischen Feld um eine Ansammlung unendlich vieler ungekoppelter harmonischer Oszillatoren handelt. Diese können nun wie in der gewöhnlichen Quantenmechanik quantisiert werden, indem die klassischen c -Zahlfunktionen q_λ und p_λ zu Hilbertraumoperatoren \hat{q}_λ und \hat{p}_λ mit der Vertauschungsregel

$$[\hat{q}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{p}_{\mathbf{k}'\sigma'}] = i\hbar\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\delta_{\sigma\sigma'} \quad (2.12)$$

erhoben werden.

Mithilfe der nichthermiteschen Leiteroperatoren

$$\hat{a}_\sigma(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}} \left(\hat{q}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{i\hat{p}_{\mathbf{k}\sigma}}{\omega} \right), \quad \hat{a}_\sigma^\dagger(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}} \left(\hat{q}_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{i\hat{p}_{\mathbf{k}\sigma}}{\omega} \right) \quad (2.13)$$

folgt dann die Modenentwicklung des Vektorpotentials für beliebige orthogonale Moden mit Index λ im Schrödingerbild als

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) = \sum_\lambda \left[\mathbf{A}_\lambda(\mathbf{r}) \hat{a}_\lambda + \mathbf{A}_\lambda^*(\mathbf{r}) \hat{a}_\lambda^\dagger \right], \quad c_\lambda = \sqrt{\frac{2\omega_\lambda \varepsilon_0}{\hbar}}. \quad (2.14)$$

Die klassische Hamiltonfunktion wird zum quantenmechanischen Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \hbar\omega_{\lambda} \left(\hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\lambda} + \hat{a}_{\lambda} \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \right) = \sum_{\lambda} \hbar\omega_{\lambda} \left(\hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\lambda} + \frac{1}{2} \right), \quad (2.15)$$

wobei wir in der letzten Gleichung die Vertauschungsregeln für die Leiteroperatoren,

$$\left[\hat{a}_{\lambda}, \hat{a}_{\lambda'}^{\dagger} \right] = \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (2.16)$$

verwendet haben.

Mithilfe der Vertauschungsregeln für die Leiteroperatoren, der Darstellung der elektromagnetischen Felder durch das Vektorpotential sowie der Orthogonalitäts- und Vollständigkeitsrelationen der räumlichen Modenfunktionen kann man zeigen, dass für die Feldoperatoren die gleichzeitigen Vertauschungsregel

$$\left[\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}') \right] = -\frac{i\hbar}{\varepsilon_0} \nabla \times \boldsymbol{\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.17)$$

gilt. Diese Relation kann man intuitiv verstehen, wenn man bedenkt, dass das Vektorpotential die generalisierte Koordinate für die Lagrangefunktion des elektromagnetischen Feldes darstellt und das transversale elektrische Feld, genauer, $-\varepsilon_0 \mathbf{E}^{\perp}(\mathbf{r})$, den dazugehörigen generalisierten Impuls.³

2.1.1 Grundzustandsenergie des freien Feldes

Aus Gl. (2.15) ist ersichtlich, dass die Energie des quantisierten elektromagnetischen Feldes selbst im Grundzustand, in dem keine elektromagnetischen Anregungen (Photonen) vorliegen, unendlich groß ist. Jede Mode λ trägt mit $\hbar\omega_{\lambda}/2$, also der Energie eines 'halben Photons', zur Grundzustandsenergie

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \hbar\omega_{\lambda} \quad (2.18)$$

bei. Von diesem unendlichen hohen Niveau aus werden nun alle Photonenenergien gemessen. Damit stellt sich sofort die Frage, ob diese Grundzustandsenergie nur ein konstanter, unphysikalischer Offset ist oder ob die Grundzustandsenergie physikalische Konsequenzen nach sich zieht.

³Siehe Kap.2 der Vorlesung 'Grundlagen der Photonik'.

Bevor wir diese Frage eingehender untersuchen, stellen wir noch fest, dass die Existenz der nichtverschwindenden Vertauschungsregeln der Leiteroperatoren äquivalent zu dem Auftreten von Grundzustandsfluktuationen des elektromagnetischen Feldes ist. Dazu berechnen wir den Vakuumerwartungswert und die Varianz des Operators der elektrischen Feldstärke

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) = i \sum_{\lambda} \omega_{\lambda} \left[\mathbf{A}_{\lambda}(\mathbf{r}) \hat{a}_{\lambda} - \mathbf{A}_{\lambda}^*(\mathbf{r}) \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \right] \quad (2.19)$$

mit dem Ergebnis, dass

$$\langle \{0\} | \hat{E}_k(\mathbf{r}) | \{0\} \rangle = 0 \quad (2.20)$$

und

$$\langle \{0\} | [\Delta \hat{E}_k(\mathbf{r})]^2 | \{0\} \rangle = \langle \{0\} | \hat{E}_k^2(\mathbf{r}) | \{0\} \rangle = \sum_{\lambda} \omega_{\lambda}^2 |A_{\lambda k}(\mathbf{r})|^2, \quad (2.21)$$

wobei die letztere Beziehung wieder durch Anwendung der Vertauschungsregeln folgt. Wir können also festhalten, dass die Grundzustandsenergie gleichbedeutend mit der Energie der Vakuumfluktuationen ist.

2.1.2 Modifikation von E_0 durch Randbedingungen

Wir wollen uns nun der Frage zuwenden, ob die Grundzustandsenergie E_0 in Gl. (2.18) immer eine, wenn auch unendlich große, Konstante ist. Offensichtlich ist E_0 von der Struktur und der genauen Anzahl der Moden λ abhängig. Stellen wir uns eine physikalische Situation vor, in der das elektromagnetische Feld zwischen zwei parallelen, unendlich gut leitenden Platten eingesperrt ist (Abb. 2.1). Die Platten zwingen das elektrische Feld dazu, auf deren Oberfläche zu verschwinden. Damit ist in der Richtung der Plattennormalen nur ein diskreter Satz von elektromagnetischen Feldmoden mit $k_z = n\pi/d$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) erlaubt. Die Anzahl dieser Moden — und die damit verbundene Grundzustandsenergie — hängt nunmehr vom Abstand d der beiden Platten ab. Denken wir uns den Plattenabstand um die Hälfte verkleinert, so reduziert sich die Anzahl der erlaubten Moden ebenfalls. Damit folgt für die Grundzustandsenergie, dass

$$E_0(d/2) < E_0(d). \quad (2.22)$$

Eine abstandsabhängige Energie ist aber äquivalent zu einer Kraftwirkung, die die beiden Platten sich gegenseitig anziehen lässt. Dies ist eine der intuitiven Erklärungen der *Casimirkraft*, auf die wir später noch genauer eingehen werden.

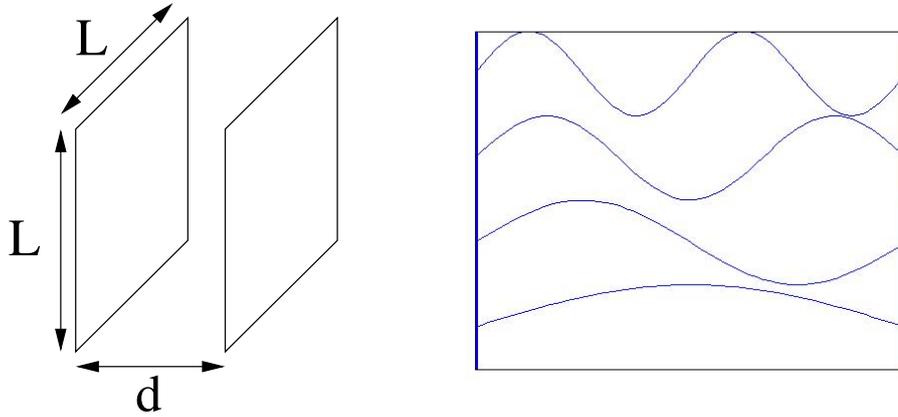


Abbildung 2.1: Anordnung zweier unendlich gut leitender Platten im Abstand d (links). Energetisch niedrigste erlaubte Moden zwischen den Platten (rechts).

Die Casimirkraft stellt also eine physikalische Manifestation der Grundzustandsenergie des quantisierten elektromagnetischen Feldes dar. Die Größenordnung der Casimirkraft zwischen den Platten lässt sich in der folgenden Weise abschätzen. Die Grundzustandsenergie ist eine extensive Größe und damit proportional zum eingeschlossenen Volumen L^2d . Die Summation bzw. Integration über die erlaubten Wellenzahlen ist von unten durch $1/d$ begrenzt. Also ist die Grundzustandsenergie in etwa

$$E_0(d) \propto (L^2d) \int_{1/d}^{\Lambda} k^2 dk \hbar\omega(k) = \hbar c L^2 d \int_{1/d}^{\Lambda} k^3 dk \propto \hbar c L^2 \left(d\Lambda^4 - \frac{1}{d^3} \right), \quad (2.23)$$

wobei wir das Integral bei einer oberen Wellenzahl Λ abgeschnitten haben, um es endlich zu halten, und die Dispersionsrelation $k = \omega/c$ für das Vakuum benutzt haben. Die Kraft pro Flächeneinheit auf die Platten, $\mathcal{F} = F/L^2$, ist dann⁴

$$\mathcal{F} \propto -\frac{\hbar c}{d^4}. \quad (2.24)$$

⁴Man beachte, dass dasselbe Resultat auch durch einfache Dimensionsanalyse erhalten werden kann. Da es sich bei der Grundzustandsenergie um einen quantenmechanischen Effekt handelt, muss \hbar vorkommen. Der elektromagnetische Charakter wird durch die Lichtgeschwindigkeit c getragen. Dann gibt es genau eine Kombination aus \hbar , c und d , die zu einer Flächenkraftdichte führt.

Es ist wie erwartet eine anziehende Kraft, die aber mit größer werdendem Plattenabstand d sehr stark abfällt. Damit wird klar, dass die Casimirkraft nur bei sehr kleinen Abständen wirksam wird. Setzt man Zahlenwerte ein, so findet man für $d = 1 \mu\text{m}$ eine Kraftdichte $\mathcal{F} \propto -0.03 \text{Nm}^{-2}$. Dieser Wert ist bis auf einen numerischen Faktor, den wir im Folgenden berechnen werden, richtig.

2.1.3 Casimirkraft zwischen zwei Platten

Die oben angegebenen heuristischen Argumente liefern zwar das richtige Skalenverhalten der Casimirkraft, aber nicht quantitative das exakte Ergebnis. Dieses wollen wir nun durch eine genauere Berechnung erhalten. Dazu schreiben wir die Grundzustandsenergie als

$$\begin{aligned}
 E_0(d) &= \sum_{\lambda} \frac{1}{2} \hbar \omega_{\lambda} = \frac{\hbar c}{2} \sum_{\lambda} |\mathbf{k}_{\lambda}| \\
 &= \frac{\hbar c}{2} \int L^2 \frac{d^2 k_{\parallel}}{(2\pi)^2} \left[|\mathbf{k}_{\parallel}| + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\mathbf{k}_{\parallel}^2 + \frac{n^2 \pi^2}{d^2} \right)^{1/2} \right], \quad (2.25)
 \end{aligned}$$

wobei die Modensumme parallel zu den Platten als Integral geschrieben und beachtet wurde, dass es zwei transversale Polarisationsmoden außer für $k_z = 0$ gibt. Die Grundzustandsenergie (2.25) ist offensichtlich unendlich groß. Um diesem Ausdruck Sinn zu verleihen, subtrahieren wir die Grundzustandsenergie desselben Volumens in Abwesenheit der Platten,

$$\begin{aligned}
 E_0(\infty) &= \frac{\hbar c}{2} \int L^2 \frac{d^2 k_{\parallel}}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d \frac{dk_z}{2\pi} 2 \sqrt{\mathbf{k}_{\parallel}^2 + k_z^2} \\
 &= \frac{\hbar c}{2} \int L^2 \frac{d^2 k_{\parallel}}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} dn 2 \sqrt{\mathbf{k}_{\parallel}^2 + \frac{n^2 \pi^2}{d^2}}. \quad (2.26)
 \end{aligned}$$

Diese Energie ist ebenfalls unendlich groß. Wir führen nun Polarkoordinaten für die transversalen Wellenvektoren ein und finden für die Differenz der

Flächenenergiedichten

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \frac{E_0(d) - E_0(\infty)}{L^2} \\ &= \frac{\hbar c}{2\pi} \int_0^\infty k dk \left(\frac{k}{2} + \sum_{n=1}^\infty \sqrt{k^2 + \frac{n^2\pi^2}{d^2}} - \int_0^\infty dn \sqrt{k^2 + \frac{n^2\pi^2}{d^2}} \right). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Selbst dieses Integral scheint für große Werte von k zu divergieren. Der Trick besteht nun darin, das Integral für Werte $k > k_{\max}$ abzuschneiden und die Regularisierung am Ende der Rechnung wieder aufzuheben in der Hoffnung, dass das Resultat nicht von der Wahl der Regularisierung abhängt. Dieses Verfahren kann man physikalisch begründen, indem man sich klar macht, dass jedes Material bei sehr hohen Frequenzen, die größer sind als die Plasmafrequenz, spätestens aber im VUV- oder Röntgenbereich, durchsichtig wird. Wir führen nun eine cut-off-Funktion $f(k)$ mit den folgenden asymptotischen Eigenschaften ein:

$$f(k) = \begin{cases} 1, & k < k_{\max} \\ 0, & k \gg k_{\max} \end{cases}. \quad (2.28)$$

Abgesehen davon kann $f(k)$ beliebig gewählt werden (Abb. 2.2). Mit der neu-

Abbildung 2.2: Cut-off-Funktion $f(k)$ aus Gl. (2.28).

en Variablen $u = d^2 k^2 / \pi^2$ finden wir für die Differenz der Flächenenergiedichten

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \hbar c \frac{\pi^2}{4d^3} \int_0^\infty du \left[\frac{\sqrt{u}}{2} f\left(\frac{\pi}{d}\sqrt{u}\right) + \sum_{n=1}^\infty \sqrt{u+n^2} f\left(\frac{\pi}{d}\sqrt{u+n^2}\right) \right. \\ &\quad \left. - \int_0^\infty dn \sqrt{u+n^2} f\left(\frac{\pi}{d}\sqrt{u+n^2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Führen wir nun die Funktion

$$F(n) = \int_0^\infty du \sqrt{u+n^2} f\left(\frac{\pi}{d}\sqrt{u+n^2}\right) \quad (2.30)$$

ein, so können wir Gl. (2.29) in der Form

$$\mathcal{E} = \hbar c \frac{\pi^2}{4d^3} \left[\frac{1}{2} F(0) + \sum_{n=1}^{\infty} F(n) - \int_0^{\infty} dn F(n) \right]. \quad (2.31)$$

schreiben.

Der Ausdruck in den eckigen Klammern kann durch die sogenannte Euler-MacLaurin-Resummationsformel weiter ausgewertet werden. Diese besagt, dass

$$\frac{1}{2} F(0) + \sum_{n=1}^{\infty} F(n) - \int_0^{\infty} dn F(n) = -\frac{1}{2!} B_2 F'(0) - \frac{1}{4!} B_4 F'''(0) + \dots \quad (2.32)$$

gilt, wobei die B_n die Bernoullizahlen mit $B_2 = 1/6$, $B_4 = -1/30$ sind. Schreiben wir die Funktion $F(n)$ um in

$$F(n) = \int_{n^2}^{\infty} du \sqrt{u} f\left(\frac{\pi}{d} \sqrt{u}\right), \quad F'(n) = -2n^2 f\left(\frac{n\pi}{d}\right), \quad (2.33)$$

so finden wir, dass $F'''(0) = -4$ ist. Alle anderen Ableitungen verschwinden aufgrund der Annahme, dass die Ableitungen der cut-off-Funktion $f(k)$ bei $k = 0$ verschwinden. Damit erhalten wir das endgültige Resultat zu

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar c \pi^2}{d^3} \frac{B_4}{4!} = -\frac{\pi^2}{720} \frac{\hbar c}{d^3}. \quad (2.34)$$

Man beachte, dass die cut-off-Funktion $f(k)$ in dem Endergebnis nicht mehr auftaucht. Damit ist sichergestellt, dass das Resultat nicht von der Regularisierung abhängt, wie wir ursprünglich gefordert hatten.

Die auf die parallelen Platten wirkende Kraft ist somit

$$\mathcal{F} = -\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial d} = -\frac{\pi^2}{240} \frac{\hbar c}{d^4}. \quad (2.35)$$

Gleichung (2.35) ist das gesuchte exakte Ergebnis. Wir sehen, dass es mit unserem heuristischen Resultat bis auf den numerischen Faktor $\pi^2/240$ übereinstimmt. Setzt man wieder einen Abstand von $d = 1 \mu\text{m}$ ein, so erhält man $\mathcal{F} = -1.3 \text{ mNm}^{-2}$.

2.1.4 Proximity-force approximation (PFA)

Um die Casimirkraft experimentell nachzuweisen, ist es sicherlich nicht sinnvoll, die Konfiguration zweier paralleler Platten zu wählen. Es bedarf einigen Aufwands, zwei Platten mit Kantenlängen von Millimetern oder Zentimetern auf einem Abstand in der Größenordnung von Mikrometern parallel anzuordnen. Viel einfacher ist es, eine oder beide Platten durch einen gekrümmten Körper zu ersetzen, so dass das Problem der Ausrichtung entfällt. In der Tat werden moderne Präzisionsmessungen der Casimirkraft meist in einer Konfiguration mit einer Platte und einer Kugel durchgeführt.

Die Berechnung der Grundzustandsenergie in Konfigurationen mit geringerer Symmetrie erfordert enormen Rechenaufwand und kann meist nur numerisch bewältigt werden. In solchen Fällen behilft man sich mit einer Näherung, die für nicht zu stark gekrümmte, gut leitende Körper zu brauchbaren Ergebnissen führt. Dazu teilt man den/die Körper in kleine planparallele Flächenstücke ein und summiert/integriert die resultierenden Casimirenergien auf. Dies ist die sogenannte *proximity-force approximation* (PFA). Die Casimirenergie wird demnach zu

$$E_{\text{PFA}} = \iint_S dx dy \mathcal{E}(z(x, y)), \quad (2.36)$$

wobei S die Oberfläche der Körper bezeichnet, die durch den positionsabhängigen Abstand $z(x, y)$ charakterisiert wird.

Als Beispiel berechnen wir die Casimirenergie zwischen einer Kugel mit Radius R und einer planparallelen Platte, die in einem Abstand a voneinander positioniert sind (Abb. 2.3). Die Platte befinde sich bei $z_1(x, y) = 0$, die Oberfläche der Kugel ist dann parametrisiert durch

$$z_2(x, y) = a + R - \sqrt{R^2 - x^2 - y^2} \equiv z(x, y). \quad (2.37)$$

Eingesetzt in Gl. (2.34) wird die Casimirenergie in Polarkoordinaten zu

$$E_{\text{PFA}} = -\frac{\pi^2 \hbar c}{720} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R \varrho d\varrho \left(a + R - \sqrt{R^2 - \varrho^2} \right)^{-3} = -\frac{\pi^3 \hbar c}{720} \frac{R^2}{a^2(a + R)}. \quad (2.38)$$

Für eine sehr große Kugel, die sich sehr nahe an der Platte befindet, gilt $R \gg a$, und die Casimirenergie kann durch

$$E_{\text{PFA}} \stackrel{R \gg a}{\simeq} -\frac{\pi^3 \hbar c R}{720 a^2} \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{a}{R}\right) \right) \quad (2.39)$$

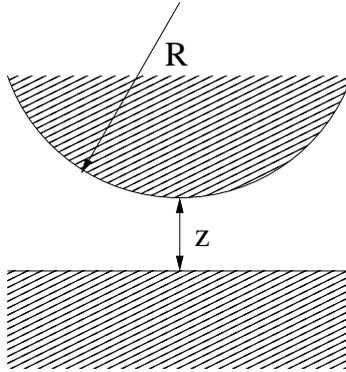


Abbildung 2.3: Eine Kugel mit Radius R befindet sich im Abstand a von einer planparallelen Platte. In PFA werden die Flächenenergiedichten der Flächenstücke im Abstand $z(x, y)$ aufsummiert.

approximiert werden.

Obwohl die PFA weite Verbreitung findet, ist sie doch nur eine Näherung, die ihre Grenzen besitzt. Es wird schließlich davon ausgegangen, dass die Körper perfekt leiten, was zwar für Metalle annähernd richtig sein wird, sicherlich aber nicht für dielektrische Materialien. Trotzdem existiert auch zwischen Dielektrika eine Casimirkraft, die aber anders erklärt und berechnet werden muss. Dies wird Bestandteil eines späteren Kapitels sein.

2.2 Die makroskopischen Maxwell'schen Gleichungen

Wir werden nun ein paar Bemerkungen zu den phänomenologischen Maxwell'schen Gleichungen in Medien machen und zeigen, dass sie nicht direkt zu einer konsistenten Feldquantisierung führen können. Gewöhnlich wird ein dielektrisches Medium durch einen (konstanten) Brechungsindex n beschrieben, der sich aus der (relativen) Permittivität ε und der Permeabilität μ zu $n = \sqrt{\varepsilon\mu}$ ergibt. In den Maxwell'schen Gleichungen tauchen diese Größen nur in Form der Materialgleichungen auf, die hier

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\mu_0 \mu} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \quad (2.40)$$

lauten. In Coulombbeichung wird die Wellengleichung für das Vektorpotential zu

$$\Delta \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \frac{n^2}{c^2} \ddot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (2.41)$$

für deren Lösung wieder der Separationsansatz benutzt wird, der zu der Helmholtzgleichung

$$\Delta \mathbf{A}_\lambda(\mathbf{r}) + \frac{n^2 \omega_\lambda^2}{c^2} \mathbf{A}_\lambda(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.42)$$

führt. Deren Lösungen in kartesischen Koordinaten sind wiederum ebene Wellen der Form $\exp(in\mathbf{k}_\lambda \cdot \mathbf{r})$, deren Wellenzahl um den Faktor n modifiziert wurde, $k_\lambda \mapsto nk_\lambda$.

Bisher wurde vorausgesetzt, dass der Brechungsindex eine konstante reelle Größe sein sollte. Dies ist sicherlich in gewissen Frequenzbereichen richtig, in denen die Absorption eines Materials vernachlässigt werden kann, aber bestimmt nicht über den gesamten Frequenzbereich, der zur vollständigen Quantisierung des elektromagnetischen Feldes notwendig ist. In der Vorlesung 'Grundlagen der Photonik'⁵ hatten wir gesehen, dass aus Gründen der makroskopischen Kausalität die linearen Suszeptibilitäten und damit auch der Brechungsindex notwendigerweise komplexe Funktionen der Frequenz sind, deren Real- und Imaginärteile den Kramers–Kronig-Relationen

$$\operatorname{Re}\chi^{(1)}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Im}\chi^{(1)}(\omega')}{\omega - \omega'}, \quad \operatorname{Im}\chi^{(1)}(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Re}\chi^{(1)}(\omega')}{\omega - \omega'} \quad (2.43)$$

genügen. Für den komplexen Brechungsindex $n(\omega) = \eta(\omega) + i\kappa(\omega)$ gelten analog die Kramers–Kronig-Relationen

$$\eta(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} d\omega' \frac{\omega' \kappa(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2}, \quad \kappa(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} d\omega' \frac{\eta(\omega') - 1}{\omega'^2 - \omega^2}. \quad (2.44)$$

Eingesetzt in den Lösungsansatz der ebenen Welle finden wir

$$e^{in(\omega)\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{i\eta(\omega)\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{-\kappa(\omega)\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2.45)$$

die nunmehr durch das Auftreten des (nichtnegativen) Absorptionskoeffizienten $\kappa(\omega)$ gedämpfte Wellen sind. Diese sind aber weder orthogonal noch

⁵Siehe dort Kap.4 'Wellenausbreitung in linearen und nichtlinearen Medien'.

vollständig und können somit nicht für eine Modenentwicklung verwendet werden, da der quantenstatistische Charakter der Modenfunktionen bzw. des vollständigen elektromagnetischen Feldes verloren geht. Der Grund hierfür ist in der zu stark vereinfachten Beschreibung der Wechselwirkung des elektromagnetischen Feldes mit der Materie zu suchen. Quantenmechanisch betrachtet handelt es sich hierbei um ein System aus Feld und Materie, die nur gemeinsam eine unitäre Zeitentwicklung vollführen. Eine Reduzierung auf die Freiheitsgrade des Feldes allein führt dazu, dass die im Feld gespeicherte Energie keine Erhaltungsgröße mehr ist und nicht mehr als Basis für einen hermiteschen Hamiltonoperator dienen kann. Eine Möglichkeit, diese Probleme zu umgehen, besteht natürlich immer darin, das Gesamtsystem, bestehend aus elektromagnetischem Feld und absorbierender Materie, quantenmechanisch zu beschreiben und das volle Bewegungsproblem zu lösen, was angesichts der riesigen Anzahl der Freiheitsgrade vollkommen unmöglich ist. Wir suchen demnach nach einem statistischen Zugang zur Feldquantisierung in absorbierenden Medien, der sich dennoch auf die makroskopische Beschreibung der Medien durch Suszeptibilitäten stützen soll.

2.2.1 Gedämpfter harmonischer Oszillator

Wir konstruieren zunächst ein Beispiel, das veranschaulicht, wie eine phänomenologische Beschreibung aussehen könnte, die trotz Dämpfung bzw. Absorption zu einer quantenmechanisch konsistenten Beschreibung eines Systems führt. Dazu betrachten wir eine gedämpfte harmonische Oszillatormode, die durch Leiteroperatoren \hat{a} und \hat{a}^\dagger beschrieben wird. Nehmen wir an, die Zeitentwicklung des Erwartungswertes habe die Form

$$\langle \hat{a}(t) \rangle = e^{-(i\omega + \Gamma/2)t} \langle \hat{a}(0) \rangle, \quad (2.46)$$

die Mode sei also gedämpft. Versucht man, von Gl. (2.46) zu rekonstruieren, wie die zugrundeliegende Bewegungsgleichung aussieht, so würde man zunächst wieder für den Erwartungswert

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{a} \rangle = -(i\omega + \Gamma/2) \langle \hat{a} \rangle \quad (2.47)$$

finden. In Operatorform gilt diese Differentialgleichung aber keineswegs. Aus

$$\dot{\hat{a}} = -(i\omega + \Gamma/2)\hat{a} \quad (2.48)$$

folgt zwar die formale Lösung $\hat{a}(t) = e^{-(i\omega+\Gamma/2)t}\hat{a}(0)$, die jedoch die Vertauschungsregeln der Leiteroperatoren zerstört. Wenn nämlich zum Zeitpunkt $t = 0$ die übliche Beziehung $[\hat{a}(0), \hat{a}^\dagger(0)] = 1$ gilt, dann wird daraus zu einem späteren Zeitpunkt $[\hat{a}(t), \hat{a}^\dagger(t)] = e^{-\Gamma t}$. Die Leiteroperatoren verlieren also mit der Zeit ihren bosonischen Charakter.

Wir versuchen nun, die gleichzeitigen Vertauschungsregeln zu retten, indem wir zu Gl. (2.48) einen Operator \hat{f} dazuaddieren, dessen Eigenschaften so gewählt werden, dass auch die Zeitentwicklung der Erwartungswerte, Gl. (2.46), reproduziert wird. Dazu setzen wir

$$\dot{\hat{a}} = -(i\omega + \Gamma/2)\hat{a} + \hat{f}(t) \quad (2.49)$$

und integrieren die Differentialgleichung formal nach der Zeit,

$$\hat{a}(t) = e^{-(i\omega+\Gamma/2)t}\hat{a}(0) + \int_0^t dt' e^{-(i\omega+\Gamma/2)(t-t')} \hat{f}(t'). \quad (2.50)$$

Setzt man diese Beziehung in den gleichzeitigen Kommutator für die Leiteroperatoren ein und benutzt $[\hat{a}(0), \hat{a}^\dagger(0)] = 1$, so erhält man

$$\begin{aligned} [\hat{a}(t), \hat{a}^\dagger(t)] &= e^{-\Gamma t} + e^{-(i\omega+\Gamma/2)t} \int_0^t dt' [\hat{a}(0), \hat{f}^\dagger(t')] e^{-(-i\omega+\Gamma/2)(t-t')} \\ &\quad + e^{-(-i\omega+\Gamma/2)t} \int_0^t dt' [\hat{f}(t'), \hat{a}^\dagger(0)] e^{-(i\omega+\Gamma/2)(t-t')} \\ &\quad + e^{-\Gamma t} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' [\hat{f}(t'), \hat{f}^\dagger(t'')] e^{i\omega(t'-t'')+\Gamma/2(t'+t'')}. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Wählt man nun die folgenden zeitabhängigen Vertauschungsregeln

$$[\hat{f}(t_1), \hat{f}^\dagger(t_2)] e^{i\omega(t_1-t_2)} = \Gamma\delta(t_1 - t_2), \quad (2.52a)$$

$$[\hat{a}(t_1), \hat{f}^\dagger(t_2)] = 0 \quad (t_2 > t_1), \quad (2.52b)$$

dann folgt in der Tat, dass die gleichzeitigen Vertauschungsregeln für die Leiteroperatoren für alle Zeiten

$$[\hat{a}(t), \hat{a}^\dagger(t)] = 1 \quad (2.53)$$

sind. Damit die richtige Lösung (2.46) für die Erwartungswerte herauskommt, muss der Erwartungswert des Operators \hat{f} verschwinden, $\langle \hat{f}(t) \rangle = 0$. Die Dämpfungskonstante erhält man aus der Vertauschungsrelation (2.52a) zu

$$\Gamma = \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \left[\hat{f}(t), \hat{f}^\dagger(0) \right]. \quad (2.54)$$

Die Operatoren $\hat{f}(t)$ sind Beispiele für sogenannte *Langevinoperatoren*, die in der Theorie offener Quantensysteme eine wichtige Rolle spielen. Ihre Aufgabe besteht im Wesentlichen darin, in Anwesenheit von Dämpfung (oder Absorption) die gleichzeitigen Vertauschungsregeln von Systemoperatoren zu garantieren. Durch das Verschwinden ihrer Erwartungswerte können sie als Rauschoperatoren interpretiert werden, deren Korrelationsfunktion gerade der Dämpfungskonstanten Γ entspricht.

2.2.2 Offene Quantensysteme und Langevingleichungen

Die phänomenologische Einführung der Operatoren $\hat{f}(t)$ ist sicher nicht zufriedenstellend, sagt sie doch nichts über deren physikalische Herkunft aus. Wir werden nun in einem Modellsystem solche Operatoren explizit konstruieren. Dazu betrachten wir ein Quantensystem (kurz 'System' genannt), das durch einen Hamiltonian \hat{H}_{sys} beschrieben wird. Dieses soll an ein quantenmechanisches Reservoir angekoppelt sein, das seinerseits von einem Hamiltonian \hat{H}_{res} beschrieben wird. Die Kopplung wird über den Wechselwirkungshamiltonian \hat{H}_{int} definiert. Der vollständige Hamiltonian lautet also

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{sys}} + \hat{H}_{\text{res}} + \hat{H}_{\text{int}}. \quad (2.55)$$

In unserem Beispiel seien die Leiteroperatoren \hat{a} und \hat{a}^\dagger einer harmonischen Oszillatormode die Systemoperatoren, die an ein Reservoir, bestehend aus sehr vielen harmonischen Oszillatoren mit Leiteroperatoren \hat{b}_i und \hat{b}_i^\dagger , koppeln sollen.⁶ Der Reservoirhamiltonian und der Wechselwirkungshamiltonian sind dann

$$\hat{H}_{\text{res}} = \sum_i \hbar \omega_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i, \quad \hat{H}_{\text{int}} = \hbar \sum_i g_i \hat{a}^\dagger \hat{b}_i + \text{h.c.} \quad (2.56)$$

⁶Dieses Modell ist auch unter dem Namen Caldeira–Leggett-Modell benannt.

mit den Kopplungskonstanten g_i .

Die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen für die System- und Reservoiroperatoren lauten dann

$$\dot{\hat{a}} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{a}, \hat{H}] = -i\omega\hat{a} - i \sum_i g_i \hat{b}_i, \quad (2.57a)$$

$$\dot{\hat{b}}_i = \frac{1}{i\hbar} [\hat{b}_i, \hat{H}] = -i\omega_i \hat{b}_i - i g_i^* \hat{a}. \quad (2.57b)$$

Formale Lösung von Gl. (2.57b) liefert

$$\hat{b}_i(t) = e^{-i\omega_i t} \hat{b}_i(0) - i g_i^* \int_0^t dt' e^{-i\omega_i(t-t')} \hat{a}(t'). \quad (2.58)$$

Eingesetzt in Gl. (2.57a) ergibt

$$\dot{\hat{a}} = -i\omega\hat{a} - \sum_i |g_i|^2 \int_0^t dt' e^{-i\omega_i(t-t')} \hat{a}(t') - i \sum_i g_i e^{-i\omega_i t} \hat{b}_i(0). \quad (2.59)$$

Das Integral kann in der *Markovnäherung* gelöst werden. Dabei wird zunächst die schnelle Zeitentwicklung des Systemoperators abgespalten und angenommen, dass die verbleibende Zeitentwicklung langsam genug ist, so dass der langsam veränderliche Operator an der oberen Integralgrenze vor das Integral gezogen werden kann. Damit schreiben wir für das Integral

$$\begin{aligned} \int_0^t dt' e^{-i\omega_i(t-t')} \hat{a}(t') &= \int_0^t dt' e^{-i\omega_i(t-t')} e^{i\omega t'} \hat{\tilde{a}}(t') \\ &\simeq \hat{\tilde{a}}(t) \int_0^t dt' e^{-i\omega_i(t-t')} e^{i\omega t'} = \hat{a}(t) \int_0^t dt' e^{i(\omega-\omega_i)(t-t')}. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Die Integrodifferentialgleichung (2.59) reduziert sich somit zu einer Differentialgleichung, in der alle Operatoren zur selben Zeit t vorkommen. In der Markovnäherung sind also alle Gedächtniseffekte ausgelöscht, die die Operatoren über ihre Wechselwirkung zu vergangenen Zeiten gehabt haben

könnten. Das verbliebene gewöhnliche Integral kann für lange Wechselwirkungszeiten weiter vereinfacht werden:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t dt' e^{i(\omega - \omega_i)(t-t')} = \pi \delta(\omega - \omega_i) + i\mathcal{P} \frac{1}{\omega - \omega_i}. \quad (2.61)$$

Fassen wir nun alle Terme zusammen, dann reduziert sich Gl. (2.59) zu

$$\dot{\hat{a}} = -(i\omega + i\delta\omega + \Gamma/2)\hat{a} + \hat{f}(t) \quad (2.62)$$

mit den Notationen

$$\Gamma = 2\pi \sum_i |g_i|^2 \delta(\omega - \omega_i), \quad (2.63a)$$

$$\delta\omega = \sum_i |g_i|^2 \mathcal{P} \frac{1}{\omega - \omega_i}, \quad (2.63b)$$

$$\hat{f}(t) = -i \sum_i g_i e^{-i\omega_i t} \hat{b}_i(0). \quad (2.63c)$$

Die Differentialgleichung (2.62) ist identisch zu der, die wir bei unserer heuristischen Einführung der Langevinoperatoren definiert haben.

Im Rahmen dieses Modells haben wir nun gefunden, dass die Langevinoperatoren $\hat{f}(t)$ durch die Anfangsbedingungen der Reservoiroperatoren gegeben sind. Mithilfe der expliziten Darstellung verifiziert man die Vertauschungsrelation

$$[\hat{f}(t), \hat{f}^\dagger(0)] = \sum_i |g_i|^2 e^{-i\omega_i t}, \quad (2.64)$$

deren Korrelationsfunktion gerade wegen

$$\int_0^\infty dt e^{i\omega t} [\hat{f}(t), \hat{f}^\dagger(0)] = \pi \sum_i |g_i|^2 \delta(\omega - \omega_i) \equiv \Gamma/2 \quad (2.65)$$

die Dämpfungskonstante $\Gamma/2$ ergibt. Aus dem Markovintegral entsteht neben der Dissipationskonstanten auch noch eine Frequenzverschiebung $\delta\omega$, die ebenfalls der Wechselwirkung des Systemoperators mit dem Reservoir zuzurechnen ist. Diese Aussagen sind nicht nur auf dieses spezielle Modell beschränkt, sondern viel allgemeiner gültig, wie wir später sehen werden.

2.2.3 Lineares Fluktuations-Dissipations-Theorem

Der Zusammenhang zwischen Dissipation bzw. Dämpfung und Fluktuationen im System ist ganz allgemein gültig und wird über das sogenannte lineare Fluktuations-Dissipations-Theorem (FDT) ausgedrückt, welches wir hier allgemein herleiten wollen. Dazu gehen wir von einem System im thermischen Gleichgewicht aus, dessen Dichteoperator also ein Gibbszustand $\hat{G} = e^{-\beta\hat{H}_0}/Z$ mit der inversen Temperatur $\beta = (k_B T)^{-1}$ ist. Wenn der Zustand des Systems durch eine äußere Störung aus dem Gleichgewicht verschoben wird, ist seine Zeitentwicklung im Wechselwirkungsbild durch die von Neumann-Gleichung

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_I(t) = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{\rho}_I(t), \hat{H}_I(t) \right] \quad (2.66)$$

gegeben. Integriert man diese auf beiden Seiten, so erhält man die dazugehörige Integralgleichung

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{\rho}_I(t_0) + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t ds \left[\hat{\rho}_I(s), \hat{H}_I(s) \right], \quad (2.67)$$

die durch sukzessive Approximation gelöst werden kann. In der ersten Iteration ersetzt man $\hat{\rho}_I(s)$ mit der Anfangsbedingung $\hat{\rho}_I(t_0) = \hat{G}$. Im Limes $t_0 \rightarrow -\infty$ ergibt das den linearen Response

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{G} + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t ds \left[\hat{G}, \hat{H}_I(s) \right] \quad (2.68)$$

des Zustands eines Systems auf eine äußere Störung.

Sei nun der Hamiltonian in der Form

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 - \lambda(t)\hat{V} \quad (2.69)$$

gegeben, wobei der Gibbszustand bezüglich des ungestörten Hamiltonians \hat{H}_0 stationär ist, $[\hat{G}, \hat{H}_0] = 0$. Dann wird Gl. (2.68) zu

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{G} - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t ds \lambda(s) \left[\hat{G}, \hat{V}_I(s) \right] \quad (2.70)$$

und, nach Rücktransformation in das Schrödingerbild,

$$\hat{\varrho}(t) = \hat{G} - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t ds \lambda(s) \left[\hat{G}, \hat{V}(s-t) \right]. \quad (2.71)$$

Der Erwartungswert einer Observablen \hat{O} ist dann

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr}[\hat{\varrho}(t)\hat{O}] = \text{Tr}[\hat{G}\hat{O}] + \int_0^{\infty} d\tau \lambda(t-\tau) \Gamma(\hat{O}\hat{V}; \tau) \quad (2.72)$$

mit der linearen Responsefunktion

$$\Gamma(\hat{O}\hat{V}; \tau) = \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left\{ \hat{G}[\hat{O}(\tau), \hat{V}] \right\} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{O}(\tau), \hat{V}] \rangle. \quad (2.73)$$

Als nächstes betrachten wir die symmetrisierte Korrelationsfunktion zweier Operatoren \hat{A} und \hat{B} ,

$$K(\hat{A}\hat{B}; \tau) = \frac{1}{2} \langle \hat{A}(t+\tau)\hat{B}(\tau) + \hat{B}(\tau)\hat{A}(t+\tau) \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle, \quad (2.74)$$

die durch die Stationarität des Gibbszustandes auch als

$$K(\hat{A}\hat{B}; \tau) = \frac{1}{2} \langle \hat{A}(\tau)\hat{B} + \hat{B}\hat{A}(\tau) \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle \quad (2.75)$$

geschrieben werden kann, und vergleichen dies mit der linearen Responsefunktion $\Gamma(\hat{A}\hat{B}; \tau) = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{A}(\tau), \hat{B}] \rangle$.

In beiden Funktionen tauchen Operatorprodukte der Form $\hat{A}(\tau)\hat{B}$ und $\hat{B}\hat{A}(\tau)$ auf, deren Erwartungswerte im thermischen Gleichgewicht zu berechnen sind. Da eine zeitliche Translation und der Gibbszustand dieselbe funktionale Form besitzen, folgt mit

$$\hat{A}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{i\hat{H}t/\hbar} \quad (2.76)$$

die Beziehung

$$\hat{A}(\tau) e^{-\beta\hat{H}} = e^{\beta\hat{H}} e^{-\beta\hat{H}} \hat{A}(\tau) e^{-\beta\hat{H}} = e^{-\beta\hat{H}} \hat{A}(\tau - i\hbar\beta), \quad (2.77)$$

was direkt zu der *Kubo–Martin–Schwinger*-Beziehung

$$\langle \hat{B}\hat{A}(\tau) \rangle = \langle \hat{A}(\tau - i\hbar\beta)\hat{B} \rangle \quad (2.78)$$

führt.

Wir definieren nun die Funktion

$$f(\tau) = \langle \hat{A}(\tau) \hat{B} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle, \quad (2.79)$$

mit deren Hilfe sowohl die lineare Responsefunktion als auch die symmetrierte Korrelationsfunktion ausgedrückt werden können,

$$\Gamma(\hat{A}\hat{B}; \tau) = \frac{i}{\hbar} f(\tau) - \frac{i}{\hbar} f(\tau - i\hbar\beta), \quad (2.80a)$$

$$K(\hat{A}\hat{B}; \tau) = \frac{1}{2} f(\tau) + \frac{1}{2} f(\tau - i\hbar\beta). \quad (2.80b)$$

Deren Fouriertransformationen drücken wir nun über die Fouriertransformierte von $f(\tau)$ aus,

$$f(\tau) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\tau} \tilde{f}(\omega), \quad f(\tau - i\hbar\beta) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\tau} \tilde{f}(\omega) e^{-\beta\hbar\omega}, \quad (2.81)$$

mit dem Ergebnis, dass

$$\Gamma(\hat{A}\hat{B}; \tau) = \frac{i}{\hbar} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\tau} \tilde{f}(\omega) [1 - e^{-\beta\hbar\omega}], \quad (2.82a)$$

$$K(\hat{A}\hat{B}; \tau) = \frac{1}{2} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\tau} \tilde{f}(\omega) [1 + e^{-\beta\hbar\omega}]. \quad (2.82b)$$

Damit besteht die Beziehung

$$\tilde{K}(\hat{A}\hat{B}; \omega) = \frac{\hbar}{2i} \coth \frac{\beta\hbar\omega}{2} \tilde{\Gamma}(\hat{A}\hat{B}; \omega) \quad (2.83)$$

zwischen den Fouriertransformierten der linearen Responsefunktion und der Korrelationsfunktion.

Aufgrund der Tatsache, dass $\Gamma(\hat{A}\hat{B}; \tau)$ eine kausale Funktion ist, ist ihre halbseitige Fouriertransformation gerade die (verallgemeinerte) Suszeptibilität $\chi(\hat{A}\hat{B}; \omega)$, die mit der ganzseitigen Fouriertransformierten $\tilde{\Gamma}(\hat{A}\hat{B}; \omega)$ über

$$\tilde{\Gamma}(\hat{A}\hat{B}; \omega) = \chi(\hat{A}\hat{B}; \omega) - \chi^*(\hat{B}\hat{A}; \omega) \equiv 2i\chi_I(\omega) \quad (2.84)$$

verknüpft ist, was nichts anderes als den Imaginärteil der Suszeptibilität darstellt. Die Fouriertransformierte der Korrelationsfunktion stellt aber gerade

das Spektrum $S(\hat{A}\hat{B};\omega) \equiv S(\omega)$ (besser, die spektrale Dichte) der Fluktuationen dar, so dass Gl. (2.83) in das *lineare Fluktuations-Dissipations-Theorem*

$$S(\omega) = \hbar \coth \frac{\beta \hbar \omega}{2} \chi_I(\omega) \quad (2.85)$$

übergeht. Dieses besagt nun, dass die Stärke der Fluktuationen mit dem dissipativen Anteil der Suszeptibilität zusammenhängt.

Wenn also eine physikalische Größe (klassisch oder quantenmechanisch) über eine kausale Responsefunktion linear von einer anderen physikalischen Größe abhängt, kann man deren Fluktuationen immer über den Imaginärteil der Responsefunktion ausdrücken. Beispielsweise kann ein Dipol in einem Atom durch ein äußeres elektrisches Feld induziert werden. Im Frequenzraum lautet die Beziehung

$$\hat{\mathbf{d}}(\omega) = \varepsilon_0 \boldsymbol{\alpha}(\omega) \cdot \hat{\mathbf{E}}(\omega) \quad (2.86)$$

mit der Dipolpolarisierbarkeit $\boldsymbol{\alpha}(\omega)$. Unter Verwendung des Fluktuations-Dissipations-Theorems folgt nun, dass für $T = 0$

$$\langle \hat{\mathbf{d}}(\omega) \otimes \hat{\mathbf{d}}^\dagger(\omega') \rangle = 2\pi \hbar \varepsilon_0 \text{Im} \boldsymbol{\alpha}(\omega) \delta(\omega - \omega') \quad (2.87)$$

gilt.

2.2.4 Feldquantisierung in Medien

Mit diesen Vorarbeiten sind wir nun in der Lage, eine Feldtheorie für das quantisierte elektromagnetische Feld in absorbierenden Medien zu formulieren. Aufgrund der Absorption entsprechen alle Feldmoden gedämpften harmonischen Oszillatoren, denen jeweils Langevinoperatoren zugeordnet werden müssen. Da es sich beim elektromagnetischen Feld um unendlich viele harmonische Oszillatoren handelt, fügen sich die Langevinoperatoren ebenfalls zu einem Quantenfeld zusammen.

Die Materialgleichungen, die in die Maxwell'schen Gleichungen eingehen, haben für rein dielektrische Materialien⁷ die Form

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{P}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t). \quad (2.88)$$

⁷Im Verlauf dieser Vorlesung werden wir uns ausschließlich auf solche Medien konzentrieren. In der Tat zeigen die meisten natürlich vorkommenden Materialien nur einen extrem schwachen Paramagnetismus.

Hier ist $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ das Polarisierungsfeld, das die Reaktion des Mediums auf ein von außen angelegtes elektrisches Feld beschreibt.

Für schwache Felder ist die Polarisierung linear in dem angelegten elektrischen Feld. Die lineare Suszeptibilität $\chi(\mathbf{r}, t)$ ist mit der Permittivität im Frequenzraum durch $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) = 1 + \chi(\mathbf{r}, \omega)$ verknüpft. Für kausalen linearen Response fanden wir, dass $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon_{\text{R}}(\mathbf{r}, \omega) + i\varepsilon_{\text{I}}(\mathbf{r}, \omega)$ eine komplexe Funktion der Frequenz ist. Die Dämpfung einer monochromatischen Welle der Frequenz ω ist also proportional zu $\varepsilon_{\text{I}}(\mathbf{r}, \omega)$. Die dazugehörige Rauschgröße muss demnach proportional zu $\sqrt{\varepsilon_{\text{I}}(\mathbf{r}, \omega)}$ sein. Zusammengefasst können wir also für den Operator der Polarisierung im Frequenzraum

$$\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon_0 [\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) - 1] \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) + \hat{\mathbf{P}}_{\text{N}}(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.89)$$

schreiben, wobei die Rauschpolarisierung $\hat{\mathbf{P}}_{\text{N}}(\mathbf{r}, \omega)$ über die Beziehung

$$\hat{\mathbf{P}}_{\text{N}}(\mathbf{r}, \omega) = i\sqrt{\frac{\hbar\varepsilon_0}{\pi}} \varepsilon_{\text{I}}(\mathbf{r}, \omega) \hat{\mathbf{f}}(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.90)$$

mit dem bosonischen Feld $\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{r}, \omega)$, das die Langevinoperatoren für die harmonischen Oszillatoren ersetzt, verknüpft ist. Die Vorfaktoren sind genau so gewählt, dass die gleichzeitigen Vertauschungsregeln der Feldoperatoren

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) = \int_0^{\infty} d\omega \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) + \text{h.c.} \quad (2.91)$$

erhalten werden.

Die Greensche Funktion

Eingesetzt in die Maxwell'schen Gleichungen, findet man für die Frequenzkomponenten des elektrischen Feldes die vektorielle Helmholtzgleichung

$$\nabla \times \nabla \times \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{\omega^2}{\varepsilon_0 c^2} \hat{\mathbf{P}}_{\text{N}}(\mathbf{r}, \omega), \quad (2.92)$$

die nun, obwohl keine äußeren Quellen für das elektromagnetische Feld vorhanden sind, eine inhomogene Differentialgleichung darstellt, die von der Rauschpolarisierung getrieben wird. Das bedeutet, dass die Rauschoperatoren in dieser Formulierung die eigentlichen dynamischen Variablen sind, die die Evolution sämtlicher Feldoperatoren bestimmen.

Die Helmholtzgleichung (2.92) besitzt eine eindeutige Lösung, die mithilfe ihrer Fundamentallösung oder Greenscher Funktion dargestellt werden kann,

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{\omega^2}{\varepsilon_0 c^2} \int d^3 s \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \omega) \cdot \hat{\mathbf{P}}_N(\mathbf{s}, \omega), \quad (2.93)$$

wobei

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \omega) = \boldsymbol{\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{s}) \quad (2.94)$$

zusammen mit den Randbedingungen $\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \omega) \stackrel{|\mathbf{r}-\mathbf{s}| \rightarrow \infty}{\rightarrow} \mathbf{0}$ gilt. Die Greensche Funktion $\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \omega)$ ist neben der Rauschpolarisierung bzw. den dynamischen Variablen $\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{r}, \omega)$ die zentrale Größe der Quantenelektrodynamik in Medien. Viele ihrer analytischen Eigenschaften übernimmt sie von der Permittivität $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)$. So ist sie holomorph in der oberen komplexen ω -Halbebene und erfüllt das Schwarzsche Reflexionsprinzip,

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{s}, -\omega^*) = \mathbf{G}^*(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \omega). \quad (2.95a)$$

Desweiteren erfüllt sie die Lorentz–Onsagersche Reziprozitätsrelation,

$$\mathbf{G}(\mathbf{s}, \mathbf{r}, \omega) = \mathbf{G}^T(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \omega), \quad (2.95b)$$

das im Wesentlichen besagt, dass die Wellenausbreitung zwischen zwei Raumpunkten \mathbf{r} und \mathbf{s} genauso wie in umgekehrter Richtung verläuft.

Aus der Helmholtzgleichung (2.94) und unter Ausnutzung der Eigenschaften (2.95a) und (2.95b) erhält man die wichtige Integralrelation

$$\frac{\omega^2}{c^2} \int d^3 s \varepsilon_1(\mathbf{s}, \omega) \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \omega) \cdot \mathbf{G}^*(\mathbf{s}, \mathbf{r}', \omega) = \text{Im } \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega). \quad (2.96)$$

Diese Beziehung ist ein Ausdruck des linearen Fluktuations-Dissipations-Theorems. Dazu betrachten wir die Vakuumfluktuationen der Frequenzkomponenten des elektrischen Feldes und finden zunächst

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) \otimes \hat{\mathbf{E}}^\dagger(\mathbf{r}', \omega') | 0 \rangle &= \frac{\omega^2}{\varepsilon_0 c^2} \frac{\omega'^2}{\varepsilon_0 c^2} \\ &\times \int d^3 s \int d^3 s' \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \omega) \cdot \langle 0 | \hat{\mathbf{P}}_N(\mathbf{s}, \omega) \otimes \hat{\mathbf{P}}_N^\dagger(\mathbf{s}', \omega') | 0 \rangle \cdot \mathbf{G}^*(\mathbf{s}', \mathbf{r}', \omega'). \end{aligned} \quad (2.97)$$

Den Vakuumerwartungswert der Rauschpolarisierung findet man mithilfe ihrer Darstellung über die dynamischen Variablen $\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{r}, \omega)$ und deren Vertauschungsregeln

$$\left[\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{r}, \omega), \hat{\mathbf{f}}^\dagger(\mathbf{r}', \omega') \right] = \boldsymbol{\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\omega - \omega') \quad (2.98)$$

zu

$$\langle 0 | \hat{\mathbf{P}}_N(\mathbf{s}, \omega) \otimes \hat{\mathbf{P}}_N^\dagger(\mathbf{s}', \omega') | 0 \rangle = \frac{\hbar \varepsilon_0}{\pi} \varepsilon_I(\mathbf{s}, \omega) \boldsymbol{\delta}(\mathbf{s} - \mathbf{s}') \delta(\omega - \omega'). \quad (2.99)$$

Die Feldfluktuationen werden damit zu

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) \otimes \hat{\mathbf{E}}^\dagger(\mathbf{r}', \omega') | 0 \rangle &= \frac{\hbar \omega^4}{\pi \varepsilon_0 c^4} \int d^3 s \varepsilon_I(\mathbf{s}, \omega) \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \omega) \cdot \mathbf{G}^*(\mathbf{s}, \mathbf{r}', \omega) \\ &= \frac{\hbar \omega^2}{\pi \varepsilon_0 c^2} \text{Im } \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega), \end{aligned} \quad (2.100)$$

wobei wir im letzten Schritt die Integralrelation (2.96) verwendet haben. Damit haben wir gezeigt, dass die Fluktuationen des elektrischen Feldes proportional zum Imaginärteil der dazugehörigen Responsefunktion ist, wenn man Gl. (2.93) als lineare Responsorelation liest.

Es gibt hier offensichtlich zwei ineinander verzahnte lineare Responsorelationen. Zum Einen reagiert die Polarisierung linear auf ein externes elektrisches Feld, die Antwortfunktion ist hierbei die dielektrische Suszeptibilität. Zum Anderen kann eben die Darstellung des elektrischen Feldes selbst durch die Rauschpolarisierung als lineare Antwort angesehen werden. Die Stärke der Fluktuationen ist im ersten Fall durch $\varepsilon_I(\mathbf{r}, \omega)$, im zweiten durch $\text{Im } \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ gegeben.

Die Greensche Funktion im freien Raum

Die Greensche Funktion lässt sich nur für hochsymmetrische Probleme analytisch aufschreiben. Dazu gehören der freie Raum bzw. homogene, unendlich weit ausgedehnte Materialien, sowie Vielschichtstrukturen.⁸ Im freien Raum mit $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \equiv 1$ kann die Greensche Funktion $\mathbf{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \omega)$ durch Fouriertransformation gefunden werden. Da dort offensichtlich Translationsinvarianz gilt,

⁸Damit sind Strukturen gemeint, die noch eine Zylinder- oder Kugelsymmetrie besitzen, für die sich der Helmholtzoperator trennen lässt. Die Greensche Funktion ist dann über eine Entwicklung nach Vektorwellenfunktionen gegeben.

ist $\mathbf{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \omega) = \mathbf{G}^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{s}, \omega)$. Wir führen dazu die Variable $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r} - \mathbf{s}$ ein und schreiben die Helmholtzgleichung (2.94) als

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{G}^{(0)}(\boldsymbol{\rho}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{G}^{(0)}(\boldsymbol{\rho}, \omega) = \boldsymbol{\delta}(\boldsymbol{\rho}), \quad (2.101)$$

die nach Fouriertransformation zu

$$-\mathbf{k} \times \mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{G}}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{\mathbf{G}}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = \mathbf{I} \quad (2.102)$$

wird, wobei \mathbf{I} die dreidimensionale Einheitsmatrix bezeichnet. Das doppelte Kreuzprodukt $-\mathbf{k} \times \mathbf{k} \times$ ist aber gerade die Fouriertransformierte der doppelten Rotation, so dass

$$-\mathbf{k} \times \mathbf{k} \times = k^2 \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{k} \otimes \mathbf{k}}{k^2} \right) \quad (2.103)$$

gilt. Der Ausdruck in Klammern ist nichts anderes als der Projektor $\mathbf{I}^\perp = \mathbf{I} - \mathbf{I}^\parallel$ auf die transversalen Freiheitsgrade. Damit zerfällt Gl. (2.102) in zwei getrennte Gleichungen für die transversalen und longitudinalen Anteile der Greenschen Funktion,

$$\left(k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \right) \tilde{\mathbf{G}}^{(0)\perp}(\boldsymbol{\rho}, \omega) = \mathbf{I}^\perp, \quad -\frac{\omega^2}{c^2} \tilde{\mathbf{G}}^{(0)\parallel}(\boldsymbol{\rho}, \omega) = \mathbf{I}^\parallel. \quad (2.104)$$

Die Greensche Funktion ist also durch die Fouriertransformation

$$\mathbf{G}^{(0)}(\boldsymbol{\rho}, \omega) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}} \left(\frac{c^2}{k^2 c^2 - \omega^2} \mathbf{I}^\perp - \frac{c^2}{\omega^2} \mathbf{I}^\parallel \right) \quad (2.105)$$

gegeben. Das Integral wird durch Contourintegration gelöst und liefert

$$\mathbf{G}^{(0)}(\boldsymbol{\rho}, \omega) = (\nabla \otimes \nabla + q^2 \mathbf{I}) \frac{e^{iq\rho}}{4\pi q^2 \rho}, \quad q = \frac{\omega}{c}, \quad \rho = |\boldsymbol{\rho}|. \quad (2.106)$$

Nach Ausführen der Differentiationen erhält man die recht kompakte Form

$$\mathbf{G}^{(0)}(\boldsymbol{\rho}, \omega) = -\frac{c^2}{3\omega^2} \boldsymbol{\delta}(\boldsymbol{\rho}) + \frac{\omega}{4\pi c} \left[f\left(\frac{c}{\omega\rho}\right) \mathbf{I} - g\left(\frac{c}{\omega\rho}\right) \frac{\boldsymbol{\rho} \otimes \boldsymbol{\rho}}{\rho^2} \right] e^{i\rho\omega/c} \quad (2.107)$$

mit den Funktionen $f(x) = x + ix^2 - x^3$ und $g(x) = x + 3ix^2 - 3x^3$. Die Greensche Funktion ist singular, genauer gesagt, eine Distribution. Für die spätere

Verwendung ist es wichtig, dass der Imaginärteil der Greenschen Funktion im Koinzidenzlimit $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{s}$ zu

$$\text{Im } \mathbf{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega) = \frac{\omega}{6\pi c} \mathbf{I} \quad (2.108)$$

wird. Als Funktion der Frequenz ω fällt die Greensche Funktion im Unendlichen wie

$$\mathbf{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \simeq -\frac{c^2}{\omega^2} \boldsymbol{\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.109)$$

was für verschiedene Beweise wichtig ist.

Bornreihe für die Greensche Funktion

Bevor wir uns den Schichtsystemen zuwenden, betrachten wir zunächst die allgemeine Situation eines Ensembles beliebig geformter Körper mit Permittivität $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)$. Die Helmholtzgleichung lautet in diesem Fall

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \boldsymbol{\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.110)$$

die sich gewöhnlich nicht geschlossen lösen lässt. Nehmen wir nun an, wir würden die Greensche Funktion für ein vereinfachtes Problem mit Permittivität $\varepsilon_0(\mathbf{r}, \omega)$ kennen, das heißt, wir kennen die Lösung zu

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_0(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \boldsymbol{\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.111)$$

Zum Beispiel könnte $\varepsilon_0(\mathbf{r}, \omega)$ ein homogenes Dielektrikum oder einfach nur den freien Raum beschreiben.

Subtrahiert man Gl. (2.111) von (2.110), so bekommt man

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{G}_S(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_0(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{G}_S(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{\omega^2}{c^2} \delta\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \quad (2.112)$$

mit den Definitionen $\mathbf{G}_S(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - \mathbf{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ und $\delta\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) - \varepsilon_0(\mathbf{r}, \omega)$. Gleichung (2.112) ist nun aber nichts anderes als die Helmholtzgleichung (2.111), die von der Störung $\delta\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)$ getrieben wird. Ihre Lösung ist gerade die ungestörte Lösung $\mathbf{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ gefaltet mit der Inhomogenität auf der rechten Seite von Gl. (2.112),

$$\mathbf{G}_S(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{\omega^2}{c^2} \int d^3 s' \mathbf{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{s}', \omega) \delta\varepsilon(\mathbf{s}', \omega) \mathbf{G}(\mathbf{s}', \mathbf{r}', \omega). \quad (2.113)$$

Die Integralgleichung (2.113) kann iterativ gelöst werden, indem man zunächst auf der rechten Seite für \mathbf{G} die ungestörte Lösung \mathbf{G}_0 einsetzt, das Ergebnis wieder unter das Integral setzt und dieses Verfahren beliebig oft wiederholt.

Das Resultat ist die Bornreihe

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_S(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) &= \frac{\omega^2}{c^2} \int d^3 s' \mathbf{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{s}', \omega) \delta\varepsilon(\mathbf{s}', \omega) \mathbf{G}_0(\mathbf{s}', \mathbf{r}', \omega) \\ &+ \left(\frac{\omega^2}{c^2}\right)^2 \int d^3 s' \int d^3 s'' \mathbf{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{s}', \omega) \delta\varepsilon(\mathbf{s}', \omega) \mathbf{G}_0(\mathbf{s}', \mathbf{s}'', \omega) \delta\varepsilon(\mathbf{s}'', \omega) \mathbf{G}_0(\mathbf{s}'', \mathbf{r}', \omega) \\ &+ \dots, \end{aligned} \quad (2.114)$$

die eine einfache Interpretation durch Vielfachstreuereignisse erlaubt. Da die Greensche Funktion $\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ die Propagation einer monochromatischen Welle der Frequenz ω vom Punkt \mathbf{r}' zum Punkt \mathbf{r} beschreibt, ist Gl. (2.114) eine Entwicklung des Propagators in Streuereignisse, die an Streuzentren \mathbf{s}' mit Amplituden $(\omega^2/c^2)\delta\varepsilon(\mathbf{s}', \omega)$ geschehen (siehe Abb. 2.4). Zum Beispiel

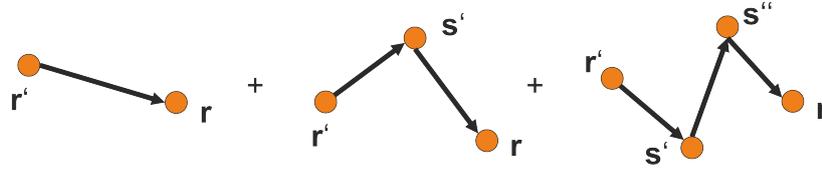


Abbildung 2.4: Diagrammatische Darstellung der Bornreihe (2.114) durch Vielfachstreuereignisse.

beschreibt der erste Term auf der rechten Seite von Gl. (2.114) die freie Propagation von \mathbf{r}' nach \mathbf{s}' , die dort durch den Faktor $(\omega^2/c^2)\delta\varepsilon(\mathbf{s}', \omega)$ modifiziert wird, sowie die weitere freie Propagation von \mathbf{s}' nach \mathbf{r} . Das Integral summiert über alle Streubeiträge. Der nächste Term in der Bornreihe beschreibt alle doppelten Streuprozesse usw. Für Anwendungen reicht meist die erste Näherung aus, in allgemeinen Beweisen ist die Struktur der Bornreihe wichtig.

Greensche Funktionen für Schichtsysteme

Die Bornreihe (2.114) konvergiert nur für schwache Störungen gut und wird meist nur irregulär geformte Körper eingesetzt. Für reguläre Streuobjekte

wie beispielsweise Grenzflächen zwischen homogenen Materialien, die planare, Zylinder- oder Kugeloberflächen bilden, kann man die Entwicklung nach Vektorwellenfunktionen nutzen, um halbanalytische Lösungen zu bekommen.

Zuerst halten wir fest, dass aufgrund der Linearität der Helmholtzgleichung die Greensche Funktion immer in einen Anteil $\mathbf{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$, der die Propagation in einem homogenen Hintergrundmedium beschreibt, und einen Streuanteil $\mathbf{G}_S(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ aufgeteilt werden kann. Das bedeutet, dass die Greensche Funktion in einem Schichtsystem immer als

$$\mathbf{G}^{(fs)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \mathbf{G}_0^{(f)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)\delta_{fs} + \mathbf{G}_S^{(fs)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \quad (2.115)$$

geschrieben werden kann, wobei die Indizes f und s für die Region des Aufpunktes (*f*inal region) und die des Quellpunktes (*s*ource region) stehen. Die Kontinuität der elektromagnetischen Felder an der Grenzfläche zweier Medien impliziert, dass die Greensche Funktion an der Grenzfläche die Bedingungen

$$\mathbf{n} \times \mathbf{G}^{(fs)} = \mathbf{n} \times \mathbf{G}^{[(f+1)s]}, \quad \mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{G}^{(fs)} = \mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{G}^{[(f+1)s]} \quad (2.116)$$

erfüllt, wobei \mathbf{n} der Normalenvektor auf der Grenzfläche ist. Die erste der beiden Bedingungen beschreibt die Kontinuität der Tangentialkomponenten des elektrischen Feldes, die zweite die des magnetischen Feldes. Hier wurde angenommen, dass keine Oberflächenladungen existieren.

Um die Helmholtzgleichung mit den Randbedingungen an den Grenzflächen zu lösen, entwickelt man die Greensche Funktion in ein vollständiges System von orthogonalen Vektorfunktionen, die der Symmetrie der Randbedingungen angepasst sind. Dies funktioniert gerade in denjenigen Koordinatensystemen, in denen der Helmholtzoperator separierbar ist.

Die Vektorwellenfunktionen werden wie folgt eingeführt. In einem quellenfreien Gebiet, das mit einem homogenen Medium gefüllt ist, erfüllen das elektrische und das magnetische Feld die vektorielle Helmholtzgleichung

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{F}(\mathbf{r}) - k_0^2 \mathbf{F}(\mathbf{r}) = \mathbf{0}, \quad k_0^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega). \quad (2.117)$$

Die Lösung von Gl. (2.117) erhält man aus der Lösung der skalaren Helmholtzgleichung

$$(\Delta + k_0^2)\psi(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = 0. \quad (2.118)$$

Wir wählen nun einen konstanten Pilotvektor \mathbf{c} . Die Vektorwellenfunktionen

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \nabla \times [\mathbf{c}\psi(\mathbf{r}, \mathbf{k})], \quad \mathbf{N}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \frac{1}{k} \nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \quad (2.119)$$

sind nun Lösungen der vektoriellen Helmholtzgleichung (2.117). Diese beiden Funktionen sind divergenzfrei, aber nicht rotationsfrei, demnach sind es solenoidale Vektorwellenfunktionen. Um die Entwicklung zu vervollständigen, führen wir noch die Funktionen

$$\mathbf{L}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \nabla\psi(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \quad (2.120)$$

ein, die rotationsfrei sind.

Die Funktionen $\mathbf{L}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$, $\mathbf{M}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ und $\mathbf{N}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ sind jeweils orthogonal zueinander und können somit zur Entwicklung der Greenschen Funktion herangezogen werden. Die Orthogonalitätsbeziehungen sind

$$\int d^3r \mathbf{M}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}, -\mathbf{k}') = k_{\parallel}^2 (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (2.121a)$$

$$\int d^3r \mathbf{N}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}, -\mathbf{k}') = k_{\parallel}^2 (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (2.121b)$$

$$\int d^3r \mathbf{L}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \cdot \mathbf{L}(\mathbf{r}, -\mathbf{k}') = k^2 (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (2.121c)$$

mit $k^2 = k_{\parallel}^2 + k_z^2$. Die Vollständigkeitsrelation lautet

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \otimes \mathbf{M}(\mathbf{r}', -\mathbf{k})}{k_{\parallel}^2} + \frac{\mathbf{N}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \otimes \mathbf{N}(\mathbf{r}', -\mathbf{k})}{k_{\parallel}^2} + \frac{\mathbf{L}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \otimes \mathbf{L}(\mathbf{r}', -\mathbf{k})}{k^2} \right]. \quad (2.122)$$

Entwickelt man die Greensche Funktion nun nach diesen Vektorwellenfunktionen

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} [\mathbf{M}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \otimes \mathbf{a}(\mathbf{k}) + \mathbf{N}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \otimes \mathbf{b}(\mathbf{k}) + \mathbf{L}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \otimes \mathbf{C}(\mathbf{k})] \quad (2.123)$$

und setzt diese Entwicklung in die Helmholtzgleichung ein, so erhält man nach Vergleich der Koeffizienten

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \otimes \mathbf{M}(\mathbf{r}', -\mathbf{k})}{(k^2 - k_0^2)k_{\parallel}^2} + \frac{\mathbf{N}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \otimes \mathbf{N}(\mathbf{r}', -\mathbf{k})}{(k^2 - k_0^2)k_{\parallel}^2} + \frac{\mathbf{L}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \otimes \mathbf{L}(\mathbf{r}', -\mathbf{k})}{k_0^2 k^2} \right]. \quad (2.124)$$

Das Integral kann vereinfacht werden, indem man die k_z -Integration ausführt. Dabei entstehen mehrere Polbeiträge. Die ersten beiden Terme in Gl. (2.124) haben jeweils Pole bei $k_z = \pm\sqrt{k_0^2 - k^2}$, der zweite zusätzlich noch bei $k = 0$ wegen $\mathbf{N} = (1/k)\nabla \times \mathbf{M}$. Letzterer wird aber gerade durch den analogen Polbeitrag im dritten Term aufgehoben. Versucht man nun, die Integrationscontour in der oberen Halbebene zu schließen, so trifft man auf eine weitere Schwierigkeit, nämlich dass der dritte Term sich wie $\mathbf{L}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \otimes \mathbf{L}(\mathbf{r}', -\mathbf{k}) \sim \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z k_z^2 e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}$ verhält. Subtrahiert man den divergenten Anteil, der gerade proportional zu $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ ist, so erhält man

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{i}{8\pi^2} \int d^2 k_{\parallel} \left[\frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}, \mathbf{k}_{\parallel}, \pm k_{0z}) \otimes \mathbf{M}(\mathbf{r}', -\mathbf{k}_{\parallel}, \mp k_{0z})}{k_{0z} k_{\parallel}^2} + \frac{\mathbf{N}(\mathbf{r}, \mathbf{k}_{\parallel}, \pm k_{0z}) \otimes \mathbf{N}(\mathbf{r}', -\mathbf{k}_{\parallel}, \mp k_{0z})}{k_{0z} k_{\parallel}^2} \right] - \frac{\mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z}{k_0^2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.125)$$

Gleichung (2.125) ist eine spezielle Darstellung der Greenschen Funktion, die es ermöglicht, Schichtsysteme zu beschreiben.

Die bisher noch allgemeine Theorie der Entwicklung nach dyadischen Produkten von Vektorwellenfunktionen wollen wir nun auf ein wichtiges Beispiel anwenden. Wir betrachten hierzu zwei unendlich ausgedehnte Halbräume, die eine planare Grenzfläche miteinander teilen (siehe Abb. 2.5). Das Problem

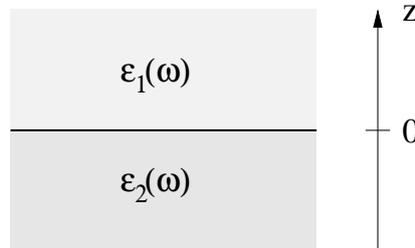


Abbildung 2.5: Zwei Halbräume mit Permittivitäten $\varepsilon_1(\omega)$ und $\varepsilon_2(\omega)$ stoßen in der Ebene $z = 0$ aneinander.

besitzt Zylindersymmetrie, so dass wir zylindrische Vektorwellenfunktionen konstruieren müssen. Dazu benötigen zunächst die Lösung der skalaren Helmholtzgleichung in Zylinderkoordinaten, die wir in gerade (*even*) und ungerade (*odd*) Funktionen bezüglich des Azimutwinkels φ aufteilen,

$$\psi_n(k_\rho, k_z, \mathbf{r}) = J_n(k_\rho \rho) \begin{cases} \cos \\ \sin \end{cases} n\varphi e^{ik_z z}, \quad (2.126)$$

so dass die Vektorwellenfunktionen zu

$$\mathbf{M}_{\circ n}^{e_n}(k_z) = \left[\mp \frac{nJ_n(k_\rho \rho)}{\rho} \frac{\sin n\phi}{\cos n\phi} \mathbf{e}_\rho - \frac{dJ_n(k_\rho \rho)}{d\rho} \frac{\cos n\phi}{\sin n\phi} \mathbf{e}_\phi \right] e^{ik_z z}, \quad (2.127a)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{N}_{\circ n}^{e_n}(k_z) = \frac{1}{k} \left[ik_z \frac{dJ_n(k_\rho \rho)}{d\rho} \frac{\cos n\phi}{\sin n\phi} \mathbf{e}_\rho \mp \frac{ik_z n J_n(k_\rho \rho)}{\rho} \frac{\sin n\phi}{\cos n\phi} \mathbf{e}_\phi \right. \\ \left. + k_\rho^2 J_n(k_\rho \rho) \frac{\cos n\phi}{\sin n\phi} \mathbf{e}_z \right] e^{ik_z z}. \end{aligned} \quad (2.127b)$$

werden. Setzt man die Entwicklungen (2.127a) und (2.127b) in die dyadische Greensche Funktion (2.125) ein und führt die Integration über k_ϕ aus, von der die Vektorwellenfunktionen nicht abhängen, so findet man die Darstellung der Greenschen Funktion eines homogenen Mediums zu

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\frac{\mathbf{e}_z \mathbf{e}_z}{k_s^2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \frac{i}{4\pi} \int_0^\infty dk_\rho \sum_{n=0}^\infty \frac{2 - \delta_{n0}}{k_\rho k_{sz}} \\ \times \begin{cases} \mathbf{M}_{\circ n}^{e_n}(k_{sz}) \otimes \mathbf{M}'_{\circ n}(-k_{sz}) + \mathbf{N}_{\circ n}^{e_n}(k_{sz}) \otimes \mathbf{N}'_{\circ n}(-k_{sz}), & z \geq z' \\ \mathbf{M}_{\circ n}^{e_n}(-k_{sz}) \otimes \mathbf{M}'_{\circ n}(k_{sz}) + \mathbf{N}_{\circ n}^{e_n}(-k_{sz}) \otimes \mathbf{N}'_{\circ n}(k_{sz}), & z \leq z' \end{cases}, \end{aligned} \quad (2.128)$$

wobei die Notation \mathbf{M}' bzw. \mathbf{N}' bedeutet, dass die jeweilige Vektorwellenfunktion am Raumpunkt \mathbf{r}' zu nehmen ist. Aus den Definitionen (2.127a) und (2.127b) ist ersichtlich, dass positive (negative) Wellenzahlen $k_z > 0$ ($k_z < 0$) sich in positive (negative) z -Richtung ausbreitende Wellen beschreiben. Je nachdem wie Quellpunkt \mathbf{r}' und Aufpunkt \mathbf{r} zueinander liegen, beschreiben die dyadischen Produkte in Gl. (2.128) direkte (geradlinige) Aufwärts- bzw. Abwärtsbewegung von \mathbf{r}' nach \mathbf{r} .

Die Streuteile der Greenschen Funktion können nun in ähnlicher Weise aus den Vektorwellenfunktionen konstruiert werden. Für die Geometrie in Abb. 2.5 benötigen wir insgesamt vier verschiedene Anteile, die die Reflexionen von oben und unten an der Grenzschicht sowie die Transmission in beide Richtungen durch die Grenzschicht beschreiben. Wir beginnen mit der Reflexion einer von oben ($z > 0$) einlaufenden Welle. Dazu müssen wir ein dyadisches Produkt so konstruieren, dass die Welle, ausgehend von \mathbf{r}' , in negative z -Richtung propagiert, nach der Reflexion aber in positiver z -Richtung

nach \mathbf{r} läuft,

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_S^{(11)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) &= \frac{i}{4\pi} \int_0^\infty dk_\rho \sum_{n=0}^\infty \frac{2 - \delta_{n0}}{k_\rho k_{1z}} \\ &\times \left[R_M^{(11)} \mathbf{M}_{e_n}^{e_n}(k_{1z}) \otimes \mathbf{M}'_{e_n}(k_{1z}) + R_N^{(11)} \mathbf{N}_{e_n}^{e_n}(k_{1z}) \otimes \mathbf{N}'_{e_n}(k_{1z}) \right]. \end{aligned} \quad (2.129a)$$

Die Reflexionskoeffizienten $R_{M,N}^{(11)}$ müssen noch aus den Randbedingungen für die Greensche Funktion an der Grenzschicht bestimmt werden. Die anderen drei Streuteile werden in analoger Weise konstruiert,

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_S^{(12)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) &= \frac{i}{4\pi} \int_0^\infty dk_\rho \sum_{n=0}^\infty \frac{2 - \delta_{n0}}{k_\rho k_{2z}} \\ &\times \left[T_M^{(12)} \mathbf{M}_{e_n}^{e_n}(k_{1z}) \otimes \mathbf{M}'_{e_n}(-k_{2z}) + T_N^{(12)} \mathbf{N}_{e_n}^{e_n}(k_{1z}) \otimes \mathbf{N}'_{e_n}(-k_{2z}) \right], \end{aligned} \quad (2.129b)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_S^{(21)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) &= \frac{i}{4\pi} \int_0^\infty dk_\rho \sum_{n=0}^\infty \frac{2 - \delta_{n0}}{k_\rho k_{1z}} \\ &\times \left[T_M^{(21)} \mathbf{M}_{e_n}^{e_n}(-k_{2z}) \otimes \mathbf{M}'_{e_n}(k_{1z}) + T_N^{(21)} \mathbf{N}_{e_n}^{e_n}(-k_{2z}) \otimes \mathbf{N}'_{e_n}(k_{1z}) \right], \end{aligned} \quad (2.129c)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_S^{(22)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) &= \frac{i}{4\pi} \int_0^\infty dk_\rho \sum_{n=0}^\infty \frac{2 - \delta_{n0}}{k_\rho k_{2z}} \\ &\times \left[R_M^{(22)} \mathbf{M}_{e_n}^{e_n}(-k_{2z}) \otimes \mathbf{M}'_{e_n}(-k_{2z}) + R_N^{(22)} \mathbf{N}_{e_n}^{e_n}(-k_{2z}) \otimes \mathbf{N}'_{e_n}(-k_{2z}) \right]. \end{aligned} \quad (2.129d)$$

Die Aufgabe besteht nun darin, die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten aus den Randbedingungen (2.116) zu bestimmen. Diese stellen aber getrennte Bedingungen für die Koeffizienten, die die Vektorwellenfunktionen \mathbf{M} und \mathbf{N} verknüpfen, dar. Dies liegt daran, dass an einer planaren Grenzfläche die zwei unabhängigen transversalen Polarisationen (s und p bzw. TE und TM) nicht miteinander vermischt werden.⁹ Die elektrischen Randbedingungen für die TE-Moden werden dann zu

$$\mathbf{e}_z \times \left[\mathbf{G}_0^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \mathbf{G}_S^{(11)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \right] = \mathbf{e}_z \times \mathbf{G}_S^{(21)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \Rightarrow 1 + R_M^{(11)} = T_M^{(21)}, \quad (2.130a)$$

⁹Dies ist an jeder Grenzfläche der Fall. Beispielsweise koppeln an einer zylindrischen Grenzfläche alle TE- und TM-Moden miteinander, was die Analyse erheblich erschwert.

$$\mathbf{e}_z \times \mathbf{G}_S^{(12)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \mathbf{e}_z \times \left[\mathbf{G}_0^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \mathbf{G}_S^{(22)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \right] \Rightarrow T_M^{(12)} = 1 + R_M^{(22)}. \quad (2.130b)$$

Analog dazu ergeben die magnetischen Randbedingungen

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_z \times \nabla \times \left[\mathbf{G}_0^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \mathbf{G}_S^{(11)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \right] &= \mathbf{e}_z \times \nabla \times \mathbf{G}_S^{(21)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \\ \Rightarrow k_{1z}(-1 + R_M^{(11)}) &= -k_{2z}T_M^{(21)}, \end{aligned} \quad (2.131a)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_z \times \nabla \times \mathbf{G}_S^{(12)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) &= \mathbf{e}_z \times \nabla \times \left[\mathbf{G}_0^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \mathbf{G}_S^{(22)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \right] \\ \Rightarrow k_{1z}T_M^{(12)} &= k_{2z}(1 - R_M^{(22)}). \end{aligned} \quad (2.131b)$$

Aus den vier Gleichungen für die vier Reflexions- und Transmissionskoeffizienten findet man die eindeutige Lösung

$$R_M^{(11)} = \frac{k_{1z} - k_{2z}}{k_{1z} + k_{2z}}, \quad (2.132a)$$

$$T_M^{(21)} = \frac{2k_{1z}}{k_{1z} + k_{2z}}, \quad (2.132b)$$

$$T_M^{(12)} = \frac{2k_{2z}}{k_{2z} + k_{1z}}, \quad (2.132c)$$

$$R_M^{(22)} = \frac{k_{2z} - k_{1z}}{k_{2z} + k_{1z}}. \quad (2.132d)$$

Diese Größen sind in der klassischen Optik als *Fresnelkoeffizienten* bekannt. Zwischen ihnen bestehen die Beziehungen $T_M^{(21)} = 1 + R_M^{(11)}$, $T_M^{(12)} = 1 + R_M^{(22)}$ sowie $R_M^{(11)} = -R_M^{(22)}$.

[TO DO: TM-Koeffizienten]

Alternative Form der Greenschen Funktion

In der Literatur wird häufig eine alternative Darstellung der Greenschen Funktion verwendet, die unter Umständen viele Rechnungen vereinfacht. Dazu sehen wir uns die dyadischen Produkte aus den Vektorwellenfunktionen genauer an und stellen fest, dass sich die Drehimpulssumme analytisch ausführen lässt. Als Beispiel nehmen wir das dyadische Produkt $\mathbf{M}_{\circ n}^e(k_{1z}) \otimes \mathbf{M}'_{\circ n}(k_{1z})$, das in den Reflexionsanteil der Greenschen Funktion auftaucht,

und bilden zunächst die Summe über den Paritätsindex und erhalten

$$\begin{aligned}
& \sum_{e,o} \mathbf{M}_{\sigma n}^e(k_{1z}) \otimes \mathbf{M}'_{\sigma n}(k_{2z}) e^{-ik_{1z}(z+z')} \\
&= k_\rho^2 \cos n(\varphi - \varphi') \left[\frac{n^2 J_n(k_\rho \rho) J_n(k_\rho \rho')}{(k_\rho \rho)(k_\rho \rho')} \mathbf{e}_\rho \otimes \mathbf{e}_\rho + J'_n(k_\rho \rho) J'_n(k_\rho \rho') \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi \right] \\
&+ k_\rho^2 \sin n(\varphi - \varphi') \left[\frac{n J_n(k_\rho \rho) J'_n(k_\rho \rho')}{(k_\rho \rho)} \mathbf{e}_\rho \otimes \mathbf{e}_\varphi - \frac{n J_n(k_\rho \rho') J'_n(k_\rho \rho)}{(k_\rho \rho')} \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\rho \right].
\end{aligned} \tag{2.133}$$

Legen wir das Koordinatensystem so, dass die Projektion des Vektors $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ in die Grenzflächenebene in x -Richtung zeigt, dann gilt $\rho = x$, $\rho' = x'$, $\varphi = \varphi'$, $\mathbf{e}_\rho = \mathbf{e}_x$ und $\mathbf{e}_\varphi = \mathbf{e}_y$. Unter Verwendung der Beziehungen

$$\begin{aligned}
& \sum_{n=0}^{\infty} (2 - \delta_{n0}) n^2 J_n(x) J_n(x') = \frac{xx' J_1(x - x')}{x - x'}, \\
& \frac{J_1(x)}{x} = \frac{J_0(x) + J_2(x)}{2}, \quad J'_1(x) = \frac{J_0(x) - J_2(x)}{2}
\end{aligned} \tag{2.134}$$

folgt somit ($x_- = x - x'$)

$$\begin{aligned}
& \sum_{n=0}^{\infty} (2 - \delta_{n0}) \sum_{e,o} \mathbf{M}_{\sigma n}^e(k_{1z}) \otimes \mathbf{M}'_{\sigma n}(k_{2z}) e^{-ik_{1z}(z+z')} \\
&= \frac{k_\rho^2}{2} \left\{ \left[J_0(k_\rho x_-) + J_2(k_\rho x_-) \right] \mathbf{e}_x \otimes \mathbf{e}_x + \left[J_0(k_\rho x_-) - J_2(k_\rho x_-) \right] \mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_y \right\}.
\end{aligned} \tag{2.135}$$

Bedenkt man, dass die Besselfunktionen aus einer Integraldarstellung

$$2\pi i^n J_n(x) = \int_0^\infty d\varphi e^{ix \cos \varphi} \cos n\varphi \tag{2.136}$$

folgen, so kann man sich vergewissern, dass die dyadischen Produkte von Vektorwellenfunktionen auch in der Form

$$\begin{aligned}
& \frac{i}{4\pi} \int_0^\infty dk_\rho \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2 - \delta_{n0}}{k_\rho k_{1z}} \mathbf{M}_{\sigma n}^e(k_{1z}) \otimes \mathbf{M}'_{\sigma n}(k_{1z}) \\
&= \frac{i}{8\pi^2} \int d^2 k_\parallel \frac{e^{i\mathbf{k}_\parallel \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{k_{1z}} \mathbf{e}_s^+ \otimes \mathbf{e}_s^- e^{ik_{1z}(z+z')}
\end{aligned} \tag{2.137}$$

mit den Einheitsvektoren

$$\mathbf{e}_s^\pm = \sin \varphi \mathbf{e}_x - \cos \varphi \mathbf{e}_y \quad (2.138)$$

für in positive bzw. negative z -Richtung propagierende s -polarisierte Wellen geschrieben werden kann. Analog dazu kann man zeigen, dass für p -polarisierte Wellen die Darstellung

$$\begin{aligned} & \frac{i}{4\pi} \int_0^\infty dk_\rho \sum_{n=0}^\infty \frac{2 - \delta_{n0}}{k_\rho k_{1z}} \mathbf{N}_{\sigma n}^e(k_{1z}) \otimes \mathbf{N}'_{\sigma n}(k_{1z}) \\ &= \frac{i}{8\pi^2} \int d^2 k_\parallel \frac{e^{i\mathbf{k}_\parallel \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{k_{1z}} \mathbf{e}_p^+ \otimes \mathbf{e}_p^- e^{ik_{1z}(z+z')} \end{aligned} \quad (2.139)$$

mit den Einheitsvektoren

$$\mathbf{e}_p^\pm = \pm \frac{ik_{1z}}{k_1} [\cos \varphi \mathbf{e}_x + \sin \varphi \mathbf{e}_y] - \frac{ik_\parallel}{k_1} \mathbf{e}_z \quad (2.140)$$

gilt. Damit wird der Streuanteil $\mathbf{G}_S^{(11)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ zu

$$\mathbf{G}_S^{(11)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{i}{8\pi^2} \int d^2 k_\parallel \frac{e^{i\mathbf{k}_\parallel \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{k_{1z}} \sum_{\sigma=s,p} R_\sigma^{(11)} \mathbf{e}_\sigma^+ \otimes \mathbf{e}_\sigma^- e^{ik_{1z}(z+z')}. \quad (2.141)$$

Diese Darstellung hat Vorteile bei der Auswertung von einfachen Schichtsystemen, die beispielsweise bei der Theorie der Propagation nichtklassischen Lichts durch Medien oder der Theorie der Dispersionskräfte zum physikalischen Verständnis beitragen.