arXiv:2603.03888v1 [quant-ph] 4 Mar 2026

使用不连续伽勒金时域方法数值计算卡西米尔力

Carles Mart´ı Farr`as ,[1], * Bettina Beverungen, [1]Philip Trøst Kristensen, [2] Francesco Intravaia, [1] 和 Kurt Busch [1,3]
[1]*Institut für Physik, Humboldt Universität zu Berlin, Newtonstraße 15, 12489 Berlin, Germany*
[2]*DTU Electro, Technical University of Denmark, Ørsteds Plads 343, 2800 Kgs. Lyngby, Denmark*
[3]*Max-Born-Institut, Max-Born-Straße 2a, 12489 Berlin, Germany*

我们提出了一种基于麦克斯韦应力张量形式、用于计算卡西米尔力的时域方案，并给出了采用基于有限元的不连续伽勒金时域方法实现该方案的具体方法。该方法能够在有限温度下，对各种几何结构和材料性质中的卡西米尔–利夫希茨相互作用进行精确计算。该方法的核心是将电磁格林张量表示为系统对偶极子激励的响应，从而将麦克斯韦应力张量转化为一组由电偶极子和磁偶极子驱动的经典散射问题。我们通过与零温和非零温条件下平行半空间之间卡西米尔相互作用的参考计算结果进行比较，验证了该方法。我们还展示了该方法在有限圆柱对称几何结构中的适用性；对于这类结构，无法获得闭式解，而我们的计算结果与基于物理考量得出的渐近预测高度吻合。这些发现表明，该方法有望用于研究现实微米和纳米尺度结构中的卡西米尔相互作用，助力纳米器件设计及实验研究。

I. 引言

由电磁场的量子涨落和热涨落引起的涨落诱导现象，带来了超越经典电动力学范畴的迷人效应。一个典型例子是卡西米尔效应，即电中性宏观物体之间通常表现为吸引力的作用。H. B. G. Casimir 最初针对真空中的理想反射镜作出预测，并将其归因于量子电磁场的零点涨落 [1], ；随后，Lifshitz 将其推广到真实材料，并纳入了有限温度下的色散和耗散等性质 [2]。卡西米尔力可视为整个系统量子涨落的宏观表现，其中包括材料内部的量子涨落。从这个意义上说，它涵盖了 van der Waals 相互作用。这种相互作用最初由 van der Waals 提出，后来 London 将其描述为紧密相邻、具有涨落偶极矩的粒子之间的吸引力 [3]。Casimir 和 Polder 将 London 的理论拓展至包含迟滞效应，描述了原子与宏观表面之间的相互作用 [4], ；由此产生的涨落诱导现象通常称为卡西米尔–珀德相互作用。

尽管在宏观尺度上可以忽略不计，卡西米尔力在亚微米距离下会变得显著，并随着间距减小而迅速增大。除了理论意义之外，卡西米尔效应还通过实验观测得到了持续证实 [5]。现代测量依赖于精密仪器，例如扭摆 [6], 、原子力显微镜 [7–9], 以及微机电扭转振荡器 [10–13]。这些实验装置通常采用靠近基底的曲面，以尽量减小对准误差。随后使用近邻力近似（PFA） [14], 估算相互作用，该近似将其描述为无穷多个微小平行平板单元贡献之和。平面–平面测量也已成功实现 [15]。实验灵敏度的提升使得检测有限温度修正成为可能 [16–20], ，尽管一些相关争议仍未解决 [11, 21, 22]。从技术角度来看，纳米结构器件不断小型化，使卡西米尔效应在纳米和微机电系统设计中的重要性日益凸显，并引起了实验与理论研究界的广泛关注 [23, 24]。其后果之一是，由于卡西米尔效应通常具有吸引性，它可能导致静摩擦粘连——即可动部件发生非预期粘附——从而损害器件性能 [25–27]。

在这一背景下，卡西米尔相互作用的理论描述对于理解几何形状和材料依赖效应、设计纳米结构

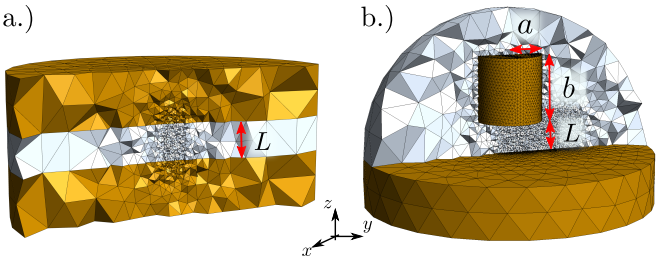


图 1。使用 Gmsh [28] 生成的具有代表性的四面体网格，分别用于 (a) 平面–平面和 (b) 圆柱–平面几何结构。 L 为最小表面间距，而a 和 b 分别表示圆柱半径和高度。

* marticar@physik.hu-berlin.de

器件以及优化实验装置至关重要。随着时间推移，人们发展出基于散射方法的半解析方法，用于描述实际系统，包括复杂几何结构、真实材料模型和有限温度修正 [29–35]。然而，这些方法仍高度依赖几何形状。作为替代方案，数值技术提供了更灵活的框架，可在不增加数学复杂度的情况下处理任意三维构型。常见方法包括边界元方法 [36–39], 以及频域有限差分（FDFD） [40] 和时域有限差分（FDTD） [41, 42]。这些方法纳入温度效应 [43], 、广泛的材料模型和任意几何形状，揭示了有趣的现象，例如非单调的力行为 [44, 45], 、圆柱形物体位于穿孔板上方时的几何诱导排斥 [39, 46, 47], ，或流体中由材料诱导的悬浮 [48, 49]。在这一背景下，对于具有任意几何形状和材料性质的完整三维系统，如何在一致纳入有限温度效应的同时，实现数值精确的卡西米尔力计算，仍是一项技术挑战，因为其中存在多个相关长度尺度。

在本工作中，我们扩展了 Kristensen 等人提出的数值框架， [50]该框架原用于高准确性的卡西米尔–波尔德计算；扩展后，它可在麦克斯韦应力张量形式下处理卡西米尔相互作用和有限温度修正。我们采用间断伽勒金时域方法（DGTD） [51],——一种用于在时域内数值求解麦克斯韦方程组的有限元技术。作为代表性示例，我们考察图1所示的几何构型。首先，我们研究两个金属半空间之间的卡西米尔相互作用，并将结果与已有的半解析解进行比较 [2]。此外，我们还考察有限圆柱体与半空间之间的相互作用。此前，只有在圆盘半径小于间距、且圆盘为理想导体时，才有针对这一构型的半解析研究 [52]。有限圆柱体缺乏实现高效半解析处理所需的对称性。尽管近期已有关于快速收敛的多重散射展开的报道 [53, 54], 但色散耗散有限圆柱体的半解析解仍不可得。因此，我们通过验证圆柱半径相对于间距在大间距和小间距极限下预期的渐近行为，来检验我们的结果。

本框架基于 Rodriguez 等人 [41, 42], 的早期工作，该工作采用了时域有限差分方法。该方法计算了人工耗散系统中由扩展源的谐波展开激发的场，通过重新表述介电常数以变形复频率积分路径，从而有效减少了模拟次数和所需的模拟时间。与之不同，我们的方法采用物理上真实的耗散系统，并配合定制的宽带偶极子源，将其放置在高斯求积方案的节点处，以确保后处理中时间积分和曲面积分的收敛。与依赖空间和时间规则交错网格的标准时域有限差分方法相比， [55], 间断伽勒金时域方法通过局部多项式基函数、自适应网格划分和高效的时间步进方案实现了更高阶的收敛 [51]。

本文的组织结构如下。在第II节中，我们概述了采用麦克斯韦应力张量方法评估卡西米尔相互作用的理论框架。第III 节介绍了数值实现及其与时域经典散射问题的关系。在第IV节中，我们展示两个案例研究：（i）两个半空间之间的卡西米尔力，阐释时间积分方案及其收敛特性；（ii）有限尺寸金属圆柱体与半空间之间的相互作用，并介绍处理缺乏平移对称性的系统所需的曲面积分方案。最后，第V节总结研究结果，并概述未来可能的研究方向。

II. 麦克斯韦应力张量方法

我们采用麦克斯韦应力张量形式，计算热平衡系统中的涨落诱导力。具体而言，我们考虑温度为 T、嵌入真空中的一组形状任意且互不重叠的物体。由电磁场的量子涨落和热涨落产生的任一物体所受合力，等于该系统热态中麦克斯韦应力张量算符期望值的曲面积分

$$\mathbf{F} = \oiint_S \mathrm{d}S \, \langle \hat{\underline{\mathrm{T}}}(\mathbf{r},t)\rangle_T \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r}) \, . \tag{1}$$

这里， S 表示包围物体的任意闭合表面，而$\mathbf{n(r)}$是位置$\mathbf{r}$处垂直于该表面并指向外侧的单位向量。在真空中，它可用在相同位置$\mathbf{r}$ 和时间 t处求得的涨落电场和磁场的量子关联函数表示：$\mathbf{E(r}\ t\mathbf{)}$和$\hat{}\mathbf{H(r}\ t\mathbf{)}$，如下所示 [56]

$$\begin{aligned}\langle \hat{\mathrm{T}}_{ij}(\mathbf{r},t)\rangle_T \ &= \epsilon_0 \left[\langle \hat{E}_i(\mathbf{r},t)\hat{E}_j(\mathbf{r},t)\rangle_T \ - \frac{\delta_{ij}}{2}\langle \hat{\mathbf{E}}^2(\mathbf{r},t)\rangle_T \right] \\ &+ \mu_0 \left[\langle \hat{H}_i(\mathbf{r},t)\hat{H}_j(\mathbf{r},t)\rangle_T \ - \frac{\delta_{ij}}{2}\langle \hat{\mathbf{H}}^2(\mathbf{r},t)\rangle_T \right], \end{aligned} \tag{2}$$

其中 δ_{ij}是指标为 $i,\ j \in \{x,y,z\}$的克罗内克δ，而 ϵ_0 和 μ_0 分别为真空介电常数和真空磁导率。在热平衡下，场关联函数可利用涨落-

耗散定理（FDT）计算为 [57, 58]

$$\langle \hat{E}_i(\mathbf{r},t)\hat{E}_j(\mathbf{r}',t)\rangle_T = \frac{\hbar\mu_0}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}\omega\,\omega^2\coth\left[\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right] \times \mathrm{Im}\left\{G^E_{ij}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)\right\} \quad (3a)$$

$$\langle \hat{H}_i(\mathbf{r},t)\hat{H}_j(\mathbf{r}',t)\rangle_T = \frac{\hbar\epsilon_0}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}\omega\,\omega^2\coth\left[\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right] \times \mathrm{Im}\left\{G^H_{ij}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)\right\} \quad (3b)$$

尽管场算符随时间涨落，但它们的等时关联与时间无关；因此，等式右侧不显含时间。由此，应力张量算符的期望值也与时间无关，式（1）中的卡西米尔力保持静态。这些表达式将量子和热场涨落与电磁格林张量的虚部联系起来：$G^\sigma_{ij}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)$，频率为 ω，其中 $\sigma\in\{E,H\}$ 用于区分电贡献和磁贡献。格林张量编码了系统的几何形状和材料性质，并取决于场的评估位置（观测点）$\mathbf{r}$以及引发系统内散射的源的位置$\mathbf{r}'$。对于嵌入真空中的线性、局域且非磁性物体，它们满足以下非齐次矢量亥姆霍兹方程 [56]

$$\left[\nabla\times\nabla\times-\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(\mathbf{r},\omega)\right]\underline{G}^E(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\underline{\mathbb{1}} \quad (4a)$$

$$\left[\nabla\times\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r},\omega)}\nabla\times-\frac{\omega^2}{c^2}\right]\underline{G}^H(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\underline{\mathbb{1}} \quad (4b)$$

满足出射辐射边界条件 [59]。这里，$\epsilon(\mathbf{r}\ \omega)$ 是分段均匀的介电常数函数，而 $\underline{\mathbb{1}}$ 表示单位并矢。总格林张量可分解为 $\underline{G}^\sigma(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) = \underline{G}^\sigma_0(\mathbf{r}-\mathbf{r}';\omega) + \underline{G}^\sigma_\mathcal{S}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)$，其中 $\underline{G}^\sigma_0$ 是真空贡献，它是在各向同性、均匀的空真空中满足方程（4）的解。尽管 $\underline{G}^\sigma_0$ 在重合极限 $\mathbf{r}'\to\mathbf{r}$ 处发散，但它对式（1）的贡献为零，因为它与 $\mathbf{r}$ 无关，且在任意闭合曲面上的积分均为零。另一方面，散射格林张量 $\underline{G}^\sigma_\mathcal{S}$ 表示存在材料非均匀性（例如几何边界和界面反射）时，位于 $\mathbf{r}'$ 的源所产生的响应。由于 $\underline{G}^\sigma_0$ 不会对净卡西米尔力产生贡献，我们只关注 $\underline{G}^\sigma_\mathcal{S}$，并为简便起见，在后续讨论中省略下标 $\mathcal{S}$。

III. 数值实现

式（3）中的涨落耗散定理（FDT）将式（2）中麦克斯韦应力张量的期望值与格林张量的虚部联系起来，后者描述了系统的电磁响应。这一关系将量子电动力学效应转化为由式（4）所支配的经典电动力学问题。然而，如上所述，这些方程的半解析解仅适用于一小部分高度对称的几何形状。因此，挑战在于开发高效的数值方法，以便准确计算任意几何形状下的散射格林张量，解决半解析方法无法处理的问题。

一种实用策略是将并矢格林张量的每一列解释为系统对点偶极源的场响应。具体而言，电格林张量的 ij-分量，$G^E_{ij}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)$，正比于位于$\mathbf{r}$ 处的电场的 i 分量；该电场由沿 j 轴取向、位于$\mathbf{r}'$ [60]处的无穷小振荡电偶极子产生。相应的源电流密度表示为 $\mathbf{j}^E(\mathbf{r}\ \omega) = j^E(\omega)\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathbf{e}j$，其中 $j^E(\omega)$ 为偶极源的频域振幅。类似地，磁格林张量 $G^H_{ij}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)$ 可通过引入磁偶极子获得。在重合点处，格林张量分量可由下列场得到：

$$G^E_{ij}(\mathbf{r},\mathbf{r};\omega) = \frac{E^{(j)}_i(\mathbf{r},\omega)}{\mathrm{i}\,\omega\mu_0 j^E(\omega)}\,, \quad G^H_{ij}(\mathbf{r},\mathbf{r};\omega) = \frac{H^{(j)}_i(\mathbf{r},\omega)}{\mathrm{i}\,\omega\epsilon_0 j^H(\omega)}\,, \quad (5)$$

其中，$E^{(j)}_i$ 和 $H^{(j)}_i$ 分别为沿 j轴取向的偶极子所激发的散射电场和磁场的 i分量 [50]。这一表述将卡西米尔力计算转化为一系列经典散射问题，可使用标准电磁求解器进行求解。

将式（3）以及式（5）代入式（2），麦克斯韦应力张量的期望值可表示为散射电磁场的函数：

$$\langle\hat{\mathrm{T}}_{ij}(\mathbf{r},t)\rangle_T = \frac{\hbar}{\pi}\sum_\sigma \mathrm{Im}\left\{\int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}\omega\, g^\sigma_T(\omega)\,\Delta^\sigma_{ij}(\mathbf{r},\omega)\right\}\,, \quad (6)$$

其中，依赖于几何形状的散射场贡献 Δ^σ_{ij} 定义为

$$\Delta^\sigma_{ij}(\mathbf{r},\omega) = \Lambda^\sigma_{ij}(\mathbf{r},\omega) - \frac{\delta_{ij}}{2}\sum_k \Lambda^\sigma_{kk}(\mathbf{r},\omega)\,. \quad (7)$$

此处，笛卡尔指标 i，j，$k\in\{x,y,z\}$ 遍历空间分量，$\sigma\in\{E,H\}$ 表示电贡献和磁贡献

$$\Lambda^E_{ij}(\mathbf{r},\omega) = \epsilon_0 E^{(j)}_i(\mathbf{r},\omega) \quad \text{and} \quad \Lambda^H_{ij}(\mathbf{r},\omega) = \mu_0 H^{(j)}_i(\mathbf{r},\omega)\,. \quad (8)$$

这些量表示系统的散射响应。在式（6）中，我们引入了与温度相关的函数

$$g^\sigma_T(\omega) = -\mathrm{i}\frac{\omega}{j^\sigma(\omega)}\coth\left[\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right]\Theta(\omega)\,, \quad (9)$$

其中 $\Theta(\omega)$ 是 Heaviside阶跃函数。在 $\omega \to \infty$ 的极限下，g_T^σ 按 ω^{l+2} 发散，其中 l 是时域电流响应 $\tau = 0$在时刻 $j^\sigma(\tau)$ 处第一个非零导数的阶数，其傅里叶变换为 $j^\sigma(\omega)$ [50]。尽管存在发散行为，式（6）中的虚部算符“Im”仍可与积分交换，从而得到有限结果。可以将 g_T^σ 视为温和分布来解释这一点，因为它只出现在与光滑且衰减的场函数 Λ_{ij}^σ相乘后进行积分的表达式中。

A. 从频域到时域

沿实轴通过频域积分对麦克斯韦应力张量进行直接数值计算，会受到高度振荡的被积函数的阻碍 [61]。这些振荡会降低式（6）中宽带积分的准确性和效率，该积分计入了所有涨落频率模的贡献。一种标准替代方法是通过维克旋转进行路径变形，即沿虚频率轴计算格林张量。该变换使被积函数变得平滑，将其转化为指数衰减函数，从而确保快速收敛 [62]。尽管频域方法是最早用于卡西米尔类计算的数值方法之一 [40, 63, 64], ，但在许多离散频率上求解麦克斯韦方程组会使该方法计算代价高昂，尤其是对于复杂几何结构。作为替代方案，时域方法已被提出 [41, 42]。这些方法用短脉冲激励系统，从而在单次仿真中提取完整的频谱响应。这种效率促使我们选择通过在时域求解麦克斯韦方程组来计算卡西米尔相互作用。

根据参考文献 [41, 42], ，应力张量的期望值可表示为时间卷积，

$$\langle \hat{\mathrm{T}}_{ij}(\mathbf{r},t)\rangle_T = 2\hbar \sum_\sigma \int_0^\infty \mathrm{d}\tau \ \mathrm{Im}\left\{g_T^\sigma(-\tau)\right\} \Delta_{ij}^\sigma(\mathbf{r},\tau) \ . \quad (10)$$

在所提出的框架中，平均麦克斯韦应力张量的计算可归结为求时间核函数 $\mathrm{Im}\{g_T^\sigma(-\tau)\}$，以及计算散射电磁响应 $\Delta_{ij}^\sigma(\mathbf{r}\ \tau)$。前者可通过解析方法处理，后者则通过使用我们自行实现的间断伽辽金时域方法，数值求解时变麦克斯韦旋度方程来获得。值得注意的是，该数值方案具有通用性，也可应用于其他时域数值电磁场求解器 [41, 42, 65]。此外，散射响应 Δ_{ij}^σ与温度无关，因此无需增加计算开销，即可通过核函数处理热效应。

1. *Source current density and temporal kernel*

核函数和散射响应的行为均与源电流密度的时间轮廓有关。在上述方法中，只要满足因果性、连续性并产生无散场，其形式在很大程度上可以任意选取。因果性和物理可实现性要求电流密度为实数，且在 $\tau < 0$ 时为零，其中 $\tau = 0$ 标记激励的起始时刻。此外，为确保与麦克斯韦旋度方程一致并维持无散演化，电流密度及其前两阶导数在 $\tau = 0$ [50, 55] 时必须为零。

实际应用中，会选取特定形式的电流分布，以加快式（10）中时间积分的收敛。基于并拓展参考文献 [50], 中的方法，我们发现，采用如下形式的指数衰减多项式电流，

$$j^\sigma(\tau) = j_0^\sigma(\gamma\tau)^{s-1}\left[s - \chi^\sigma\gamma\tau\right]\mathrm{e}^{-\gamma\tau}\Theta(\tau) \ , \quad (11)$$

其中，整数 $s \geq 4$ 确保电流及其前两个时间导数在 $\tau = 0$处均为零。振幅设为 j_0^σ，并通过 Heaviside阶跃函数 $\Theta(\tau)$保证因果性。参数 $\gamma > 0$ 控制衰减率，从而决定激励的频谱带宽，而离散参数

$$\chi^\sigma = \begin{cases} 1 & \text{if } \sigma = E \ , \\ 0 & \text{if } \sigma = H \ , \end{cases} \quad (12)$$

用于区分电（$\sigma = E$）偶极激励与磁（$\sigma = H$）偶极激励，从而改变脉冲形状。实际应用中，式（11）中的电流密度取为 $s = 4$和 $\gamma \approx \mathrm{c}/2L$，其中 L 为物体间最小表面间距（参见图1），可确保零温和有限温度下电偶极与磁偶极激励均具有适当的时间收敛性，参见附录B。事实上，与参考文献 [50], 中仅需考虑电场的情况不同，散射磁场的缓慢衰减源于长寿命非振荡模的存在 [66–68], ，会影响系统在长时间尺度下的电磁响应。

核函数 $\mathrm{Im}\ \{g_T^\sigma(-\tau)\}$，如式（9）所定义，取决于傅里叶变换电流密度，

$$j^\sigma(\omega) = j_0^\sigma s!\gamma^{s-1}\frac{\left[(1-\chi^\sigma)\gamma - \mathrm{i}\omega\right]}{(\gamma - \mathrm{i}\omega)^{s+1}} \ . \quad (13)$$

理解这种联系是评估式（10）中时域积分收敛性的关键。核函数的快速衰减，加上耗散介质中电磁场的固有阻尼，有助于数值收敛。进而，在达到给定准确性所需的条件下，可缩短模拟时间。通过在复频率平面上进行围道积分，对式（9）进行傅里叶变换，可得到 $\mathrm{Im}\{g_T^\sigma(-\tau)\}$ 的完整时间依赖性，其中 $\omega \to \zeta = \omega + \mathrm{i}\xi$ [50]。由于因果性，$j^\sigma(\zeta)$ 在上半平面内解析

并满足 Schwarz反射原理 $[j^\sigma(\zeta)]^* = j^\sigma(-\zeta^*)$，这是任何实值时域函数的傅里叶变换都必须满足的条件。因此，在上半平面闭合围道时，对式（9）产生单极点贡献的唯一项是热因子 coth$[\hbar\omega/2k_{\mathrm{B}}T]$。这些极点位于 Matsubara 频率 $\zeta_m = \mathrm{i}\xi_m = \mathrm{i}m\omega_{\mathrm{th}}$处，其中 $\omega_{\mathrm{th}} = 2\pi k_{\mathrm{B}}T/\hbar$。

应用留数定理可得

$$\mathrm{Im}\left\{g_T^\sigma(-\tau)\right\} = \frac{\omega_{\mathrm{th}}}{2\pi}{\sum_{m=0}^{\infty}}' \frac{\xi_m}{j^\sigma(\mathrm{i}\xi_m)}\mathrm{e}^{-\xi_m\tau} \ , \qquad (14)$$

其中，撇号表示 $m = 0$ 项乘以因子 $1/2$。对于式（13）中的电流密度以及 $\sigma \in \{E, H\}$，式（14）中的 Matsubara求和可写为闭式形式

$$\mathrm{Im}\left\{g_T^\sigma(-\tau)\right\} = \tilde{g}_0^\sigma \begin{cases} \dfrac{\omega_{\mathrm{th}}}{2\gamma} + \displaystyle\sum_{l=0}^{s+1} \binom{s+1}{l} \left(\frac{\omega_{\mathrm{th}}}{\gamma}\right)^{l+1} \mathrm{Li}_{-l}(\mathrm{e}^{-\omega_{\mathrm{th}}\tau}) & \sigma = E \ , \\ \displaystyle\sum_{l=0}^{s} \binom{s}{l} \left(\frac{\omega_{\mathrm{th}}}{\gamma}\right)^{l+2} \mathrm{Li}_{-(l+1)}(\mathrm{e}^{-\omega_{\mathrm{th}}\tau}) & \sigma = H \ , \end{cases} \qquad (15)$$

其中 $\tilde{g}_0^\sigma = \gamma^3/2\pi j_0^\sigma s!$，$\mathrm{Li}_l(z)$ 是 l [69]阶多对数函数。

2. *The DGTD method*

为了对任意散射构型数值求解麦克斯韦方程组，我们采用 Hesthaven 和 Warburton [70]提出的节点 DGTD方法。该有限元方法专为通量守恒形式偏微分方程的时域积分而设计 [71]。在此方法中，计算域被离散为非结构网格，该网格由完全覆盖模拟区域的有限元单元组成。在每个单元内，电磁场展开为一组 p阶拉格朗日多项式，这些多项式充当局部基函数。展开系数与相应节点处的场振幅相关联 [51]。这种局部展开有利于节省内存并实现并行化 [51], , 从而降低大规模三维模拟的计算成本。随后，通过在单元界面引入所谓的迎风数值通量构造全局解，确保单元间耦合并施加边界条件 [70]。通过空间离散化，麦克斯韦旋度方程被转换为半离散形式，即一组关于时变展开系数的一阶耦合常微分方程。随后采用含 14 个阶段的显式四阶低存储龙格–库塔格式进行时间积分 [72], , 从而实现灵活的高阶时间步进技术。

在时域中，通过辅助微分方程（ADEs）引入频率色散，并利用辅助电流对材料极化进行建模。这些辅助微分方程与麦克斯韦方程组一同在时间步进过程中求解。此外，为了注入偶极激励并评估散射场响应，我们采用总场/散射场（TF/SF）技术。该方法利用麦克斯韦方程组的线性性质，将计算域划分为总场（TF）区域和散射场（SF）区域，从而把场分解为入射分量和散射分量。间断伽勒金时域方法（DGTD）框架尤其适用于这一形式，因为界面两侧的场值分别独立存储。因此，源产生的解析已知入射场分布可以直接在TF/SF边界处加上或减去。值得注意的是，将局域点源置于SF区域内，可从根本上消除其奇异性，使其与前文介绍的散射格林张量形式体系相吻合。

该方案的空间收敛性取决于平均边长 h 和多项式阶数 p。提高 p ，可通过在每个单元内增加插值节点来提升空间分辨率。本文采用直边四面体，它们特别适合解析多尺度特征，并且相比规则网格，能更自然地处理曲面几何，从而减少阶梯状伪影。当网格能够良好地表示几何形状，即满足离散相容性时，该方法可实现 $\mathcal{O}(h^{p+1})$ [51]的高阶收敛。然而，对于存在未解析曲率的非相容网格，收敛性可能仅达到 $\mathcal{O}(h^2)$ [73]。对于平滑变化的边界，原则上可以使用曲线单元来恢复高阶收敛 [51, 73]。

IV. 应用

本节展示所提出方案的数值结果，重点关注两个物体之间的卡西米尔力。该过程的一个关键步骤是式（1）中的闭合曲面积分。原则上，这需要在多个点处计算应力张量

在闭合曲面 S上的值，因此需要进行大量时域仿真——每个评估点需要六次，分别对应三种正交偶极取向和两种源类型。尽管这些仿真很容易并行化，但在空间分辨率较高时，即使使用计算集群，计算成本也可能高得令人难以承受。选择闭合曲面时，应使其包围我们要计算其受力的物体。虽然从理论上说， S 的几何形状可以任意选择，但某些选择在数值计算上可能比其他选择更高效。例如，如果一个物体被立方体包围，对积分进行数值计算的过程会大大简化。当立方体趋于无限大时，唯一有贡献的表面是两个物体之间的那个面， S_0，因为其余各面的散射场振幅会随距离增加而迅速衰减，其贡献在无穷远处趋于零。因此，只需对无限延伸的表面S_0进行积分，便足以完整捕捉其基本物理特性。针对特定系统的对称性，还可以进一步简化计算。

现在，我们通过两个具有代表性的例子来说明这一过程。作为基准，我们首先考虑两个金属半空间之间的卡西米尔相互作用，它们由宽度为 L的真空间隙隔开。该设置有助于理解式（10）中的时间积分。此外，这种几何形状计算简单，并可利用 Lifshitz 公式进行半解析处理 [2], ，从而提供独立的参考计算，用于评估数值方法的准确性和收敛性。作为第二个例子，我们考虑一个置于半空间上方的有限尺寸金属圆柱体，其轴线垂直于表面。这种对称性较低的构型凸显了将应力张量与力联系起来的表面积分方案。此外，该例还展示了此方法适应任意三维几何形状的能力，包括常用的近邻力近似不再有效的情形。

A. 半空间之间的卡西米尔力

我们考虑两个相同的金属半无限平面，它们沿 L方向相距 z轴，参见图1（a）。金属的光学响应采用银的模型，并由标准 Drude 介电函数描述

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + \mathrm{i}\Gamma)} \ , \tag{16}$$

等离子体频率为 $\omega_p = 1.39\times10^{16}\,\mathrm{s}^{-1}$（$\hbar\omega_p = 9\,\mathrm{eV}$），阻尼率为 $\Gamma = 3.23\times10^{13}\,\mathrm{s}^{-1}$（$\hbar\Gamma = 21\,\mathrm{meV}$） [74]。由于 xy平面内的平移不变性，我们选择积分表面 S_0 位于 $z = L/2$处的中间平面，与两个界面等距。该表面在 x 和 y方向上无限延伸，并具有单位法向量$\mathbf{n} = -\mathbf{e}_z$。系统的对称性确保净卡西米尔力沿 z轴，即$\mathbf{F} = F_z\mathbf{e}_z$。相应地，麦克斯韦应力张量的相关分量为 $\langle \mathbf{T}_{zz}(\mathbf{r}\ t)\rangle_T$，需要在位于平面 $z = L/2$内的面内坐标$\mathbf{r}_\parallel = (x, y)$上积分。然而，由于横向不变性，$\langle \mathbf{T}_{zz}(\mathbf{r}\ t)\rangle_T$ 在 $z = L/2$上是空间均匀的。因此，单位面积卡西米尔力可以在单一空间位置处计算，例如$\mathbf{r}_0 = (0,0, L/2)$，即

$$\frac{F_z}{S_0} = -\langle \hat{\mathrm{T}}_{zz}(\mathbf{r}_0, t)\rangle_T \ , \tag{17}$$

从而将数值问题简化为一次时间积分。

如上所述，系统的对称性使得半解析解成为可能，方程（17）可改写为利夫希茨公式的形式 [2, 75]

$$\frac{F_z}{S_0} = -k_\mathrm{B}T{\sum_{m=0}^{\infty}}' \int \frac{\mathrm{d}^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \sum_u 2\kappa \frac{\left[r_u(\mathrm{i}\xi_m, q)\mathrm{e}^{-\kappa L}\right]^2}{1 - \left[r_u(\mathrm{i}\xi_m, q)\mathrm{e}^{-\kappa L}\right]^2} \ , \tag{18}$$

该公式用平行于平面的电磁波矢分量 $\mathbf{q}$（其模为 $q = |\mathbf{q}|$）以及真空中的正交波矢分量$\kappa = \sqrt{q^2 + \xi_m^2/\mathrm{c}^2}$, 在虚数马茨巴拉频率处的取值，描述作用于其中一个半空间上的压力。反射系数 r_u，其中$u \in \{$横电、横磁$\}$，描述场在半空间处的散射。在当前语境下， r_u 由菲涅耳公式给出 [56, 76]。如上所述，求和中的撇号表示 $m = 0$ 项的权重为$1/2$。对于此处考虑的构型，方程（18）预言两个半空间相互吸引 [2]。

根据利夫希茨公式，相互作用可通过 L相对于两个特征长度尺度的大小来表征：等离子体波长$\lambda_p = 2\pi\mathrm{c}/\omega_p$, 对于银而言约为 136 nm；以及热波长或维恩波长 $\lambda_\mathrm{th} = 2\pi\mathrm{c}/\omega_\mathrm{th} = \hbar\mathrm{c}/k_\mathrm{B}T$，后者大致对应于维恩位移定律中的特征长度尺度，在 $7.6\,\mu$室温下约为 m。对于 $L \ll \lambda_p$，相互作用处于非迟滞区，此时可以忽略迟滞效应。在此极限下，式（18）变为 [76, 77]

$$\begin{aligned}\frac{F_z}{S_0} &\sim -\frac{\hbar}{8\pi^2 L^3}\int_0^\infty \mathrm{d}\xi\ \mathrm{Li}_3\left(\left[\frac{\epsilon(\mathrm{i}\xi)-1}{\epsilon(\mathrm{i}\xi)+1}\right]^2\right) \\ &\overset{\Gamma/\omega_p\ll1}{\sim} -\frac{\hbar\mathrm{c}\pi^2}{240L^4}\left[\eta\frac{L}{\lambda_p} - \frac{15\zeta(3)}{\pi^4}\frac{\Gamma L}{\mathrm{c}}\right] \ ,\end{aligned} \tag{19}$$

其中， $\eta \approx 1.193$ 且 $\zeta(x)$ 是黎曼ζ函数，其 $\zeta(3)$ ≈ 1.202。注意，前述表达式与系统温度无关，这表明在此区间内，量子涨落占主导地位，超过了热涨落。对于间距$L \gg \lambda_p$，迟滞效应变得显著；如果

温度保持为零，利夫希茨公式便会恢复卡西米尔的原始结果 [1],给出如下

$$\frac{F_z}{S_0} \sim -\frac{\hbar c \pi^2}{240 L^4} \tag{20}$$

对于两块完全反射板之间的吸引力。在这一极限下，力不再依赖材料参数；这些参数仅通过条件 $L \gg \lambda_p$ 起作用。当 $L \gtrsim \lambda_{\mathrm{th}}$ 时，有限温度带来的修正变得显著。在 $L \gg \lambda_{\mathrm{th}}$ 的极限下，经典热涨落主导相互作用，利夫希茨公式趋于

$$\frac{F_z}{S_0} \sim -\frac{\zeta(3)}{8\pi} \frac{k_{\mathrm{B}} T}{L^3} \ . \tag{21}$$

上述表达式及相关量可作为我们数值计算的基准。

1. *Time integration*

由于系统具有对称性，我们在以 $\mathbf{r}_0$, 为中心、半径为 R、高度为 $2H+L$ 的圆柱形计算域内进行计算，并在其边界施加 Silver–M¨uller 边界条件 [51]。金属半空间近似为半径为 R 、厚度为 H的有限圆盘，构成 TF区域，见图 1(a)。由于金属具有耗散性，厚度 H 的选取使得来自相对界面的贡献可以忽略，从而有效恢复 Lifshitz 最初考虑的两个相对半空间构型 [2]。半径 R 的选取旨在尽量减小从计算域边缘反向反射并到达 $\mathbf{r}_0$ [50] 的杂散波。在金属圆盘内部，将麦克斯韦方程组与德鲁德模型的辅助微分方程结合求解 [51]。圆盘之间的 SF区域填充空气，TF/SF边界与金属-真空界面重合。由 Gmsh [28], 生成的四面体网格在评估位置 $\mathbf{r}_0$ 附近进行局部细化，在半径为L的圆柱区域内，平均边长为 $h = L/10$ 。网格朝计算域边界逐渐线性粗化，在最外侧边界处达到 $h = L$ 。我们采用全局多项式阶数 $p = 3$，确保每个最小相关波长上最多有两个插值节点 [51, 55]。为有效地数值求解麦克斯韦方程组，采用无量纲单位也很有益。这种方法将所有场和长度分别按参考场强 E_0 和长度尺度 ℓ_0进行缩放。对于本文所考虑的应用，我们采用 $E_0 = 1\,\mathrm{V/m}$ 的参考场强和 $\ell_0 = 1$ nm 的长度尺度。

激励脉冲位于$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$ ，并通过总场/散射场技术引入仿真方案中。方位角不变性意味着，在$\mathbf{r}_0$, 处，我们只需区分 $j = \parallel$ 平行于各平面方向上的分量，以及 $j = \perp$ 垂直于各平面方向上的分量。在图2的（a）图中，我们展示了平行取向电偶极子源（左列）和垂直取向磁偶极子源（右列）的时域行为。脉冲轮廓对应于公式（11）中的定义，其中电偶极子和磁偶极子均采用 $s = 4$ [50]。脉冲以速率 γ衰减，这是一个可调参数，通常设为 $\gamma \approx c/2L$，用于控制频谱带宽，详见附录B。

在图2的 (b) 面板中，左、右两列分别展示了直接在节点处记录的相应散射场随时间的演化，未进行空间插值 $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$。由于构型具有对称性，散射场 $E_i^{(j)}(\mathbf{r}_0, \tau)$ 和$H_i^{(j)}(\mathbf{r}_0, \tau)$ 在 $i \neq j$时为零。下文定义的相关量也具有这一性质。请注意，在图2的 (b) 面板中，场振幅在 $\tau \leq L/c$ 之前始终为零，这反映了激励到达金属表面并返回所需的往返时间。当$\tau \geq L/c$ 后，出现瞬态反射；初始脉冲充分衰减后，系统进入衰减阶段。对于所考虑的特定构型，在无源状态下，图2(b) 左列中的电场振幅呈现指数衰减振荡，其频率接近表面等离激元共振 $\omega_{sp} \approx \omega_p/\sqrt{2}$，对应于非迟滞电格林张量的主导极点 [75]。另一方面，图2(b) 右列中的磁场振幅呈指数衰减，但没有振荡行为。

为评估式（10）的时间收敛性，我们将局部卡西米尔力的各分量对单位面积的贡献定义为

$$f_{ij,T}^{\sigma}(\mathbf{r}) = 2\hbar \int_0^{t_{\max}\to\infty} \mathrm{d}\tau \ \mathrm{Im}\left\{g_T^{\sigma}(-\tau)\right\} \Lambda_{ij}^{\sigma}(\mathbf{r}, \tau) \ . \tag{22}$$

式（22）的数值计算需要将上限截断为 $t_{\max}$，这会在计算效率与数值精度之间引入权衡。在参考文献 [41],$t_{\max}$ 中，所选取的值使得场振幅在耗散可调的人为耗散介质中衰减至指定误差阈值以下。然而，将这一准则扩展到物理现实系统可能需要大量计算，模拟时间也可能长到难以接受，尤其对于腔体和谐振器 [78]。为缩短计算时间并保持准确性，我们改为选择 $t_{\max}$ ，依据系统的物理特性，仅捕获相关场信息 [78, 79]。随后，通过将区间 $[t_0, t_{\max}]$ 内的有限时长信号拟合为指数衰减振荡模态的线性叠加，对长时间响应进行外推，其中 t_0 的选取应确保初始脉冲已充分衰减，例如，图 $\gamma t_0 = 30$ 中的 2(b)。为此，我们采用基于滤波对角化方法的时域谐波反演技术 [80, 81], ，其优点是能够为长时间响应场提供解析表达式

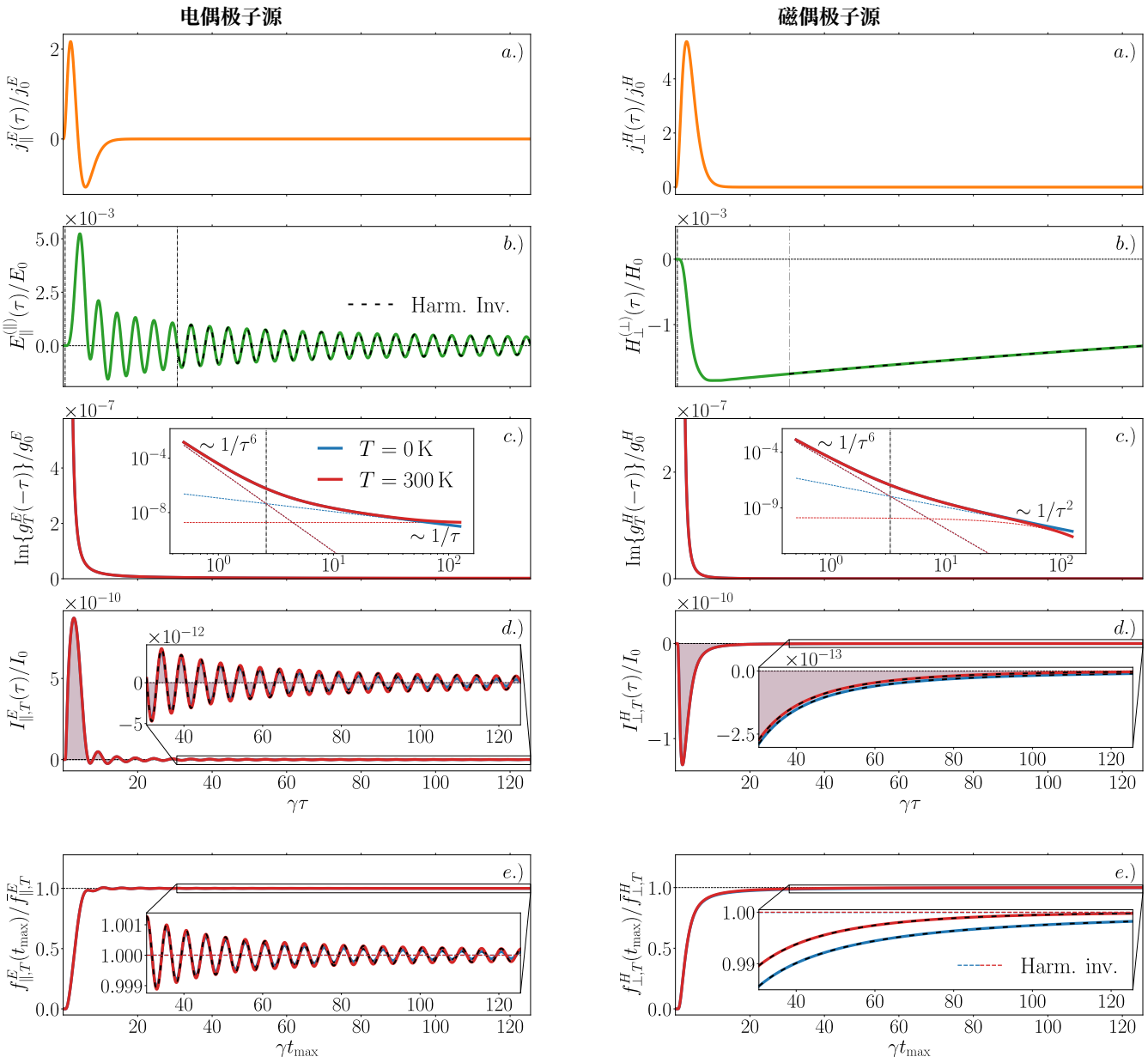


图 2. 左列：表征两个银半空间之间时间积分方案的相关量，两半空间相距 $L = 20\mathrm{nm}$，并由一个平行于平面的电偶极子激发。所有量均以参考场强 $E_0 = 1\mathrm{V/m}$ 和长度尺度 $\ell_0 = 1\mathrm{nm}$ 进行缩放。各面板展示该方案的不同分量：(a) 电流密度的时间轮廓，如式 (11) 中对 $s = 4$ 的定义，以 $j_0^E = \epsilon_0 E_0 \ell_0^2 \mathrm{c}$ 为单位；(b) 在 $\mathbf{r}_0 = (0, 0, L/2)$ 处的散射电场 $E_\parallel^{(\parallel)}$，以 E_0 为单位；(c) 核函数，以 $g_0^E = \mathrm{c}^3/\ell_0^3 j_0^E$ 为单位，插图采用对数刻度，显示零温（蓝色）和室温（红色）下的行为。渐近行为的详细信息参见附录 A；(d) 时间被积函数 $I_{\parallel,T}^E(\tau) = \mathrm{Im}\{g_T^E(-\tau)\}\epsilon_0 E_\parallel^{(\parallel)}(\mathbf{r}0, \tau)$，以 $I_0 = g_0^E \epsilon_0 E_0 = \mathrm{c}^2/\ell_0^5$ 为单位，插图聚焦于长时间行为；(e) 数值计算得到的累积积分随模拟时间 $t_{\max}$ 的变化，并以参考值 $\bar{f}_{\parallel,T}^E$ 归一化；该参考值通过对相应格林张量分量进行复频域积分获得，参见附录C。虚线表示纳入长时间贡献后的结果。右列：与左列相同，但激发源为垂直取向的磁偶极子。所有量的单位如下：(a) $j_0^H = E_0 \ell_0^2$；(b)$H_0 = E_0\sqrt{\epsilon_0/\mu_0}$；(c) $g_0^H = \mathrm{c}^3/\ell_0^3 j_0^H$；(d) $I_0 = \mathrm{c}^2/\ell_0^5$。

。模态参数是在有限频率窗口 [82]内，使用 Harminv 实现提取的。在图 2(b) 的左右两列中，我们展示了.....之间的高度一致性

重构场和模拟场 $\gamma\tau \geq 30$。因此，为了计入仿真时间窗之外的贡献，通过对式（22）从 $t_{\max}$ 到无穷大进行有效积分，解析地获得长时间修正

使用从模拟数据中提取的谐波反演参数，即，

$$f^{\sigma}_{ij,T}(\mathbf{r}) = 2\hbar \left[\int_0^{t_{\max}} \mathrm{d}\tau \ \mathrm{Im}\left\{ g^{\sigma}_{T}(-\tau) \right\} \Lambda^{\sigma}_{ij}(\mathbf{r},\tau) + \sum_n \mathrm{Re}\left\{ d_n \int_{t_{\max}}^{\infty} \mathrm{d}\tau \ \mathrm{Im}\left\{ g^{\sigma}_{T}(-\tau) \right\} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}a_n\tau} \right\} \right] . \tag{23}$$

式 (23) 右侧的第一个积分使用标准求积技术，结合Λ^{σ}_{ij}模拟得到的散射场进行计算；第二个积分则利用谐波反演参数 [82]，通过解析方法计算，其中 $d_n = A_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_n}$ 和 $a_n = \omega_n - \mathrm{i}\alpha_n$。这里，$A_n$ 是模态振幅，ϕ_n 是相移，ω_n 是共振频率，$\alpha_n > 0$是第 n 个模式的衰减常数。与仅使用式 (23) 第一项的方法相比，直接数值积分与半解析长时间修正相结合，可以加快收敛。尽管谐波反演能够以半解析方式捕捉长时间动力学，但它仍是一种会引入近似误差的数值技术。因此，式 (23) 的准确性仍取决于 $t_{\max}$；被积函数足够快速地衰减仍是尽可能减小误差的关键。除了场耗散外，收敛性还取决于核函数 Im $\{g^{\sigma}_{T}(-\tau)\}$ 的行为，该核函数在式 (15) 中定义，并在图 2(c) 的左右两列中分别针对 $T = 0$K 和 $T = 300$ K 展示。如图 2(d) 所示，无论电场还是磁场情况，该核函数都会增强短时间的场贡献，同时抑制较长时间的场贡献。值得注意的是，$\tau = 0$ 处的发散在物理上由因果性正则化，因为当 $\tau < L/c$ 时，散射场为零。

将式（23）中的数值结果代入式（zz （10）中麦克斯韦应力张量的分量，可得沿 z 方向的单位面积卡西米尔力。图3 展示了力随间距 L变化的数值结果，间距范围从 1 nm 到20 μm，并以式（19）中 Lifshitz 公式的渐近值为归一化基准。在很宽的间距和温度范围内，我们的数值计算结果（符号）与式（18）中的半解析结果（实线）吻合良好。当迟滞效应可以忽略时（$L \ll \lambda_p$），数值数据趋近于 1，对温度不再敏感，并再现式（$F_z \sim -1/L^3$ （19）所预测的预期渐近标度。间距较大时，观察到两种不同的趋势。首先，当有限光速的影响变得显著时（ [76, 83], ，力趋向于式（20）中的卡西米尔原始表达式，并趋近于标度$\sim -1/L^4$。在此区域，热涨落的贡献仍然足够小，但已能观察到偏差。当 $L \gg \lambda_{\mathrm{th}}$时，热效应变得显著，并且与式（21）一致，数据逐渐恢复 $\sim -1/L^3$的预期标度。式（21）中前因子的温度依赖性

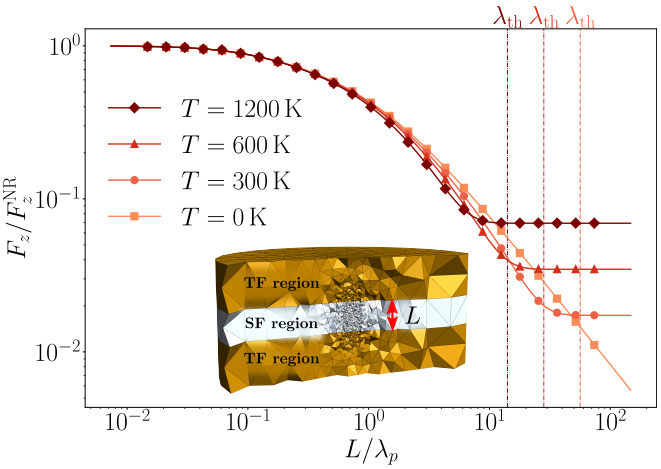


图 3. 两个半空间之间的卡西米尔力随其间距的变化 L。力以非迟滞渐近值归一化，参见式（19）。符号表示数值结果，实线表示基于式（18）中利夫希茨公式得到的半解析参考计算。在短间距下，数值结果恢复了式（19）所预测的 $\sim -1/L^3$ 行为，且与温度无关；而在大间距下，数值结果则分别再现了零温和有限温度下式（20）和（21）预期的$\sim -1/L^4$ 和 $\sim -1/L^3$ 依赖关系。插图展示了一个使用 Gmsh 生成的平面对平面几何形状的典型网格 [28]。

在图3所用的归一化方案中清晰可见。

2. *Convergence studies*

为量化数值方案的准确性和收敛特性，我们分别计算每个分量的单位面积卡西米尔力的相对误差，计算方式如下：

$$\left| \frac{\Delta f^{\sigma}_{ij,T}}{\bar{f}^{\sigma}_{ij,T}} \right| = \left| \frac{f^{\sigma}_{ij,T} - \bar{f}^{\sigma}_{ij,T}}{\bar{f}^{\sigma}_{ij,T}} \right| . \tag{24}$$

这里，$f^{\sigma}_{ij,\,T}$是第 IV A 1 节所述数值时域积分方案得到的结果，而$\bar{f}^{\sigma}_{ij,\,T}$ 表示通过对相应格林张量分量进行复频域积分得到的参考值，参见附录C。

该方法的准确性受多种误差源限制，其中最显著的是任何基于网格的方法都固有的有限空间离散化。为评估其影响，我们分别针对网格细化和多项式细化进行收敛性研究：网格细化通过细分每个四面体单元，均匀减小平均边长 h 来实现；多项式细化则通过提高局部基函数的全局多项式阶数 p 来实现 [84]。研究采用与图中插图相同的构型3，结果取以下对象的平均值

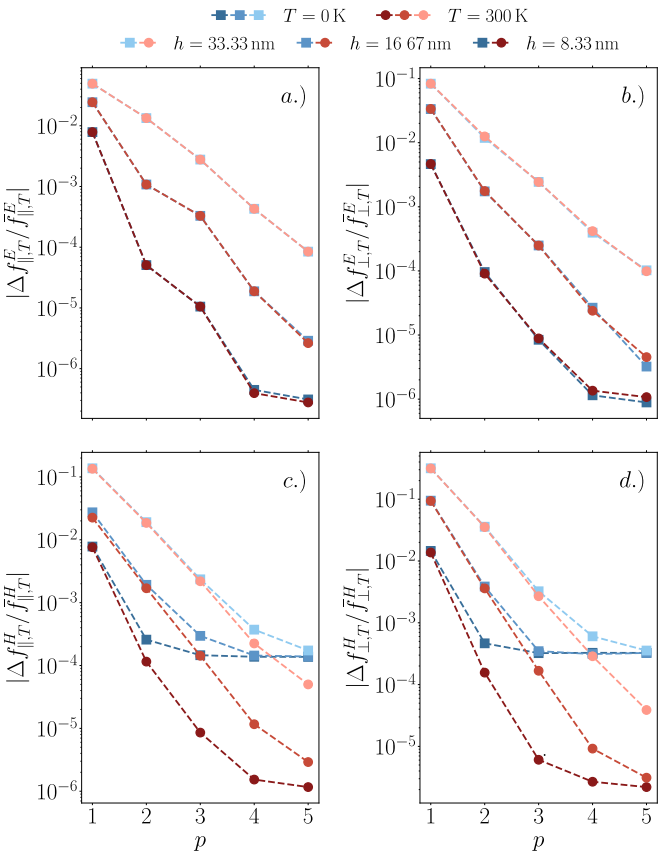


图 4. 在 $L = 100\mathrm{nm}$ 处，单位面积卡西米尔力各分量的相对误差；对 22 次名义上相同的模拟（总时长为 $\gamma t_{\max} = 30$）取平均，并展示其随多项式阶数 p 的变化，网格分辨率各不相同。网格尺寸 h 定义为计算域中央区域的平均边长。结果分别给出了零温度（蓝色）和室温（红色）的情况。电磁场各分量的单独贡献分别显示：（a）和（b）分别对应平行（$\parallel$）和垂直（$\perp$）的电场分量；（c）和（d）则显示对应的磁场分量。

通过在平面内移动$\mathbf{r}_0$ 而获得的22组名义上相同的模拟 $z = L/2$ [50]。尽管物理构型保持不变，移动$\mathbf{r}_0$ 会改变四面体单元的分布，进而导致计算所得的力发生变化。对这些实现取平均值，可降低结果对特定网格布置的敏感性，并获得更稳健的空间离散化误差估计。图4 展示了不同网格分辨率下平均相对误差随多项式阶数的变化，其中平均值是在对数尺度上计算的。图4（a）和（b）中的电场贡献呈现出预期的收敛行为 $\mathcal{O}(h^{p+1})$，与保形网格的理论预测一致，参见第IIIA 2节。相比之下，图 $T = 0\mathrm{K}$处的磁场贡献相对误差在图4（c）和（d）中于超过某一多项式阶数和网格分辨率后趋于平稳，这表明发生了转变

进入由其他误差源而非空间离散化主导的区间。请注意，在有限温度下这一行为有所不同，例如 $T = 300\mathrm{K}$，这表明时间核衰减得更快，从而减轻了这一限制。如第IVA 1节所述，时域积分会引入取决于 $t_{\max}$取值的误差。我们认为这是剩余误差的主要来源，并将在下文中详细考察。

为了更精确地研究这一点，我们考察在固定网格尺寸下 $t_{\max}$ 对式(23)所给时间积分的影响。该误差是任何时域方法所固有的，既可通过延长仿真时间窗来减小，但会增加计算量，也可利用谐波反演等参数估计方法重构长时间行为来减小。为量化时间截断的影响，图5给出了零温度和有限温度下相对误差随 $t_{\max}$的变化，并将区间 $[0, t_{\max}]$ 上的直接求积积分与依据式(23)加入基于谐波反演的长时间贡献后所得结果进行比较。后者降低了达到一定准确性所需的计算量。对于图5(a)和(b)所示的电场分量，增大 $t_{\max}$ 会使结果迅速收敛到共同的残余误差。这一行为表明，当 $t_{\max}$足够大时，主导误差由时间截断转变为上文所述的空间离散化。电场分量对长时间贡献的依赖较弱，因为净偶极矩在较大的 τ处消失，且式(23)中的被积函数围绕同一渐近值振荡，因而相比磁情形收敛更快。相比之下，磁场分量对时间截断误差比相应的电分量更为敏感。此时，如图5(c)和(d)所示，谐波反演方法通过加入式(23)的第二个积分来捕捉长时间行为，与仅考虑式(23)第一个积分的直接求积相比，相对误差显著降低。更大的时间窗可提高谐波反演的准确性，因为它们能更好地分辨磁场贡献 [82], 所特有的较慢时间衰减，这也是图4所示其强温度依赖性的根源。在 $T = 0\mathrm{K}$时，误差需要更长时间才能达到残余值；而在 $T = 300\mathrm{K}$时，由于核函数$\mathrm{Im}\,\{g^\sigma_T(-\tau)\}$衰减更快，误差迅速饱和，详见附录 A。随着 $t_{\max}$增大，直接求积与谐波反演中的误差都趋于同一残余误差。需要注意的是，图5中$|\Delta f^\sigma_{ij,\ T}/f^\sigma_{ij,\ T}|$处的凹陷对应于误差的符号变化。由于这些偶然的零交叉依赖于具体问题，不应对其出现时所对应的$\gamma t_{\max}$ 具体取值赋予特殊意义。

与参考文献 [50]，一样，我们发现，除时间截断和空间离散误差外，边界反射也可能限制准确性。为

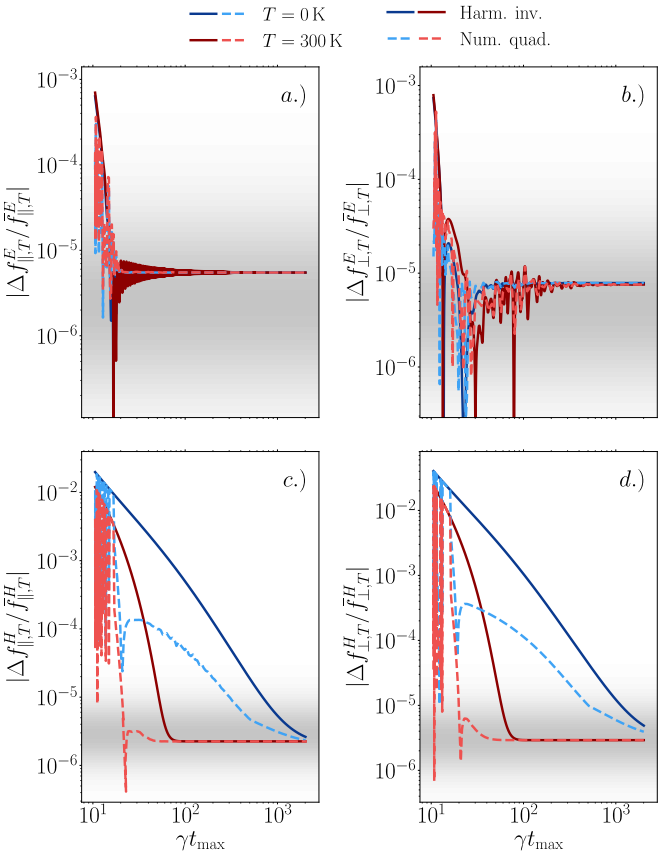


图5. 各分量单位面积卡西米尔力的相对误差随模拟时间 $t_{\max}$的变化，针对 $L = 100\mathrm{nm}$、多项式阶数 $p = 5$以及网格尺寸 $h = 16.67\,\mathrm{nm}$。实线表示对时域响应在 $[0, t_{\max}]$上的直接求积，而虚线则包含从$t_{\max}$ 到 $\tau \to \infty$经解析积分得到的长时间贡献（利用在 $[t_0, t_{\max}]$上通过谐波反演获得的模态参数），并按式（23）将其加到求积结果中，从而有效地将积分延伸至 $t_{\max} \to \infty$。结果同时给出零温（蓝色）和室温（红色）。阴影区域表示22次名义上相同的模拟之间相对误差的偏差；这些模拟的计算域中，往返时间超过最大 $t_{\max}$，从而确保仿真时间窗内不出现虚假反向反射。分图（a）和（b）分别显示平行（$\parallel$）与垂直（$\perp$）电场分量，而分图（c）和（d）显示相应的磁场分量。

确认图 4 和 5 中的残余误差并非主要由计算域有限范围终止处产生的伪反向反射造成，我们使用更大的计算域进行对照模拟。在这种情况下，半径 R 的选取使得从外边界到评估点 $\mathbf{r}_0$ 的往返时间 $t_{\max}$超过最大模拟时间，从而避免任何边界反射在积分时间窗内到达$\mathbf{r}_0$ 。对 22 次名义上相同、但四面体分布不同的模拟结果取平均，并以相对误差的标准差作为对离散化误差进行独立估计，如图 5 中的阴影区域所示。这组模拟为评估采用缩减计算域所得的结果提供了参照。具体而言，图5 所示的残余误差落在这一范围内，证实该误差主要由空间离散化决定，而非边界反射。

B. 平面上方的圆柱对称物体

现在考虑一个由有限尺寸的圆柱对称物体和一个半空间组成的系统，物体位于半空间上方，二者的表面间距为 L。坐标系选取如下： z 轴与系统的对称轴重合，并垂直于占据 $z \le 0$ 的基底。由于绕 z 轴的圆柱对称性，卡西米尔力的横向分量相互抵消，因此合力再次沿 $\mathbf{e}_z$ 方向。

我们再次选取一个闭合曲面，其底面位于 $z = L/2$ 处，即物体与基底之间的中点；其余各面延伸至无穷远处，由于散射场衰减，这些面的贡献可以忽略，参见图 6。因此，式（1）中的积分可化为在 S_0 处、$z = L/2$ 沿单位法向量 $\mathbf{n} = -\mathbf{e}_z$方向的有效开放曲面积分。利用系统的轴对称性，我们采用柱坐标 $\mathbf{r} \equiv (\rho,\ \varphi,\ z)$。方位角依赖性$\varphi$可以解析积分，从而将应力张量的曲面积分化为关于径向坐标 $\rho \in [0, \infty)$ 的一维积分，并可采用高斯求积方案 [85]进行计算。原则上，高斯-拉盖尔求积可处理半无限区间，但在实际应用中，它会引入远离物体的节点，这些节点对最终结果的贡献可以忽略，却会使计算域扩展到不切实际的大小。将积分截断到有限区间并采用高斯–勒让德求积方案，可实现高效计算 [86]。

我们利用有限元方法的自适应网格划分能力，在非均匀径向位置采样平滑变化的应力张量；这些位置对应于阶数为N [36, 75]的高斯–勒让德求积的节点，并受最大截断半径 $\rho_{\max}$限制，超过该半径后，应力张量可视为可忽略。采用适当的变量替换后，这种表述可利用标准高斯求积程序高效地进行高准确性曲面积分，同时只需少量求值点。因此，所得力的振幅为

$$F_z \approx -\pi \rho_{\max} \sum_{i=1}^{N} w_i \rho_i \langle \hat{\mathrm{T}}_{zz}(\rho_i, z = L/2, t) \rangle_T \ , \qquad (25)$$

其中， w_i 和 $x_i \in [-1, 1]$ 分别是相应的高斯–勒让德权重和节点，而 $\rho_i = \rho_{\max}[x_i + 1]/2$ 是离散径向坐标。

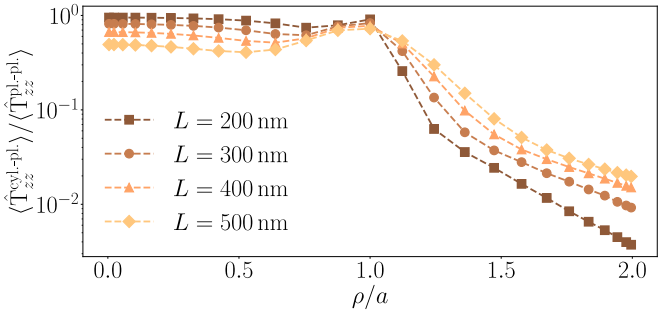


图 6. 半径为 $a = 500\mathrm{nm}$、高度为 $b = 2a$ 的圆柱在半空间上方不同间距处的麦克斯韦应力张量空间分布。数值以平面对平面麦克斯韦应力张量归一化。

1. *Surface integration*

作为一个说明性示例，我们考虑一个半径为 a 、高度为 $b = 2a$的有限金属圆柱，其位于一个半空间上方。银的材料响应由式（16）给出的德鲁德形式描述。计算域如图1（b）所示，网格按照第IVA 1节所述的步骤生成。为解析圆柱的曲率，侧表面附近的网格尺寸设为 $h = a/10$ 。

单位面积上的局域卡西米尔力贡献，$f_{ij,\ T}^{\sigma}(\rho,$ $z = L/2)$，在由 16 点高斯–勒让德求积确定的径向位置处进行采样，采样区域为 $\rho \leq \rho_{\max} = a + L$。在每个求积节点处放置一个点偶极子，并对相应的散射场进行时域演化。记录偶极子位置处的场振幅，并采用第 IV A1 节所述方案对其进行时间积分。图 6 所示的总麦克斯韦应力张量，通过对单位面积上的局域卡西米尔力贡献求和得到，如式（10）所示。值得注意的是，在圆柱中心附近，即 $\rho \ll a$ 处，该构型类似于上一节讨论的平移不变的平板几何，因此应力张量基本保持均匀。当 $\rho \sim a$ 时，会出现一个峰值，这可归因于来自圆柱侧表面的散射场的影响日益显著。当 $\rho \gg a$ 时，应力张量以与 L 的倒数成比例的速率指数衰减，从而事后验证了选择 $\rho_{\max}$ 的合理性。对这些贡献进行空间积分即可得到最终的卡西米尔力。鉴于高斯求积技术具有快速收敛性 [85], ，且 $\rho_{\max}$ 足够大，我们预计主要的数值误差来自网格的空间离散化。对于非共形网格（如本例所用网格），收敛阶按 $\mathcal{O}(h^2)$ [73]。

图 7 显示了力随分离距离的变化 L，并以式（19）给出的压强乘以圆柱底面面积 $A = \pi a^2$进行归一化。该数值对应于非迟滞极限下的近邻力近似（PFA），它由式（18）中的利夫希茨公式乘以 A得到。图7中将数值结果（符号）与渐近预测（虚线）进行了比较，考虑了不同温度下半径固定为 $a = 500\mathrm{nm}$ 的圆柱体。

尽管对于这一构型不存在解析解，但基于物理考量，可以可靠地预测短距离和长距离范围内的极限行为。当间距 $L \ll a$，且距离远小于圆柱结构的半径时，相互作用应趋近于两个半空间之间的相互作用。这一行为与近邻力近似所预测的结果一致 [87, 88]。对于我们的构型而言，这意味着可以忽略由圆柱边界产生的散射影响，从而得到由系统有效面积上的Lifshitz压力给出的力，即圆柱底面的面积 A。因此，当 $L \ll \lambda_p$ 且 $L \ll a$时，数值计算得到的卡西米尔力变得与温度无关，并按 $F_z \sim -1/L^3$进行标度，从而证明图 7 中所采用的归一化选择是合理的。

当距离大于致密物体的半径时，近邻力近似的准确性下降并失去有效性，数值计算结果也偏离半解析估计，参见图 8。在这一范围内，相互作用越来越多地由圆柱的多极散射贡献所支配 [89]。对于 $L \gg a$，当圆柱的尺寸相对于其与表面的距离较小时，可以忽略高阶多极矩，而偶极响应主导散射电磁辐射。在这一范围内，该系统可以有效地描述为微观物体与表面的相互作用，卡西米尔力逐渐过渡为Casimir–Polder力 [4]。不同于方程（18）中的Lifshitz表达式，卡西米尔–珀德相互作用与微观物体的极化率直接相关。虽然小圆柱的极化率不存在闭式表达式 [90], ，但可以通过将其与等体积椭球体的极化率联系起来，得到一种可靠的近似 [49]。在这种方法下，对于这一特定情形，高度和直径相等的圆柱体可以粗略地近似为体积为 $V = \pi a^2 b$ 的球体。在这些条件下，频率相关的极化率遵循Clausius–Mossotti关系 [56, 91]

$$\alpha(\omega) \approx 3\epsilon_0 V \frac{\epsilon(\omega) - 1}{\epsilon(\omega) + 2}\ , \tag{26}$$

其中 $\epsilon(\omega)$ 是式（16）中给出的介电函数，因此极化率在 $\omega_r \approx \omega_p/\sqrt{3}$处出现共振，其中 $\Gamma \ll \omega_p$。

上述讨论使我们能够估算大间距下力的行为。在有限温度下，处于热区间时，即 $L \gg \lambda_{\mathrm{th}}$，卡西米尔–珀德相互作用如上所述由

热涨落主导，从而得到热极限 [91]

$$F_z \sim -\frac{3}{16\pi}\frac{k_B T}{\epsilon_0}\frac{\alpha(0)}{L^4}\ . \tag{27}$$

物体维度的改变，尤其是对其横向范围的限制，会产生一种幂律衰减；在相应极限下，其衰减速度比卡西米尔力快一个阶次。图7中数值数据的趋势清楚地显示了这一点：与图3中的结果相比，曲线向下弯曲。随着间距增大，数据收敛到式（27）给出的渐近极限。该极限由系统温度决定，从而验证了数值计算和背后的物理推理。在零温下，相互作用在大间距处呈现不同的渐近行为。Casimir–Polder力的迟滞区定义为 $L \gg \lambda_r = 2\pi c/\omega_r \approx \sqrt{3}\lambda_p$，与卡西米尔力的迟滞区大致重合。因此，对于 $L \gg \lambda_p$ 和 $L \gg a$，相互作用遵循 [83, 91, 92]

$$F_z \sim -\frac{3}{8\pi^2}\frac{\hbar c}{\epsilon_0}\frac{\alpha(0)}{L^5}\ , \tag{28}$$

其再次呈现出特征性的幂律衰减；在相应极限下，其衰减速度比零温度时的卡西米尔力快一个阶，参见式（20）。我们观察到

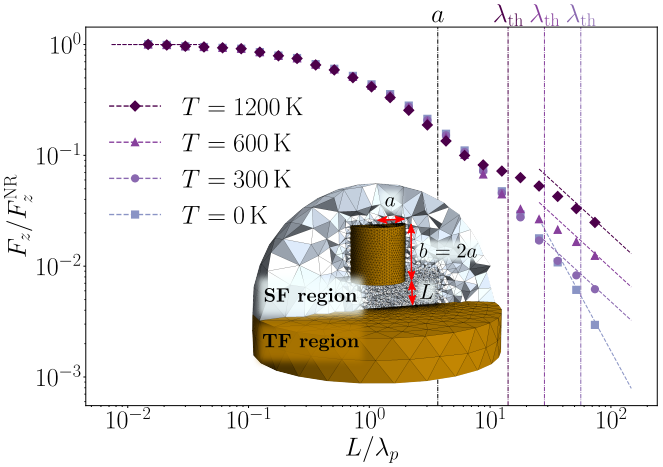


图 7. 圆柱体与半空间之间的卡西米尔力随二者间距的变化关系 L。圆柱半径为 $a = 500$nm，高度为 $b = 2a$。力以式（19）中的非迟滞极限卡西米尔压强乘以圆柱底面面积进行归一化。符号表示数值结果，虚线表示半解析渐近预测。在短间距下，数值结果恢复了式（$\sim -1/L^3$ 所预测的行为，并且与温度无关；而在大间距下，数值结果则再现了零温度和有限温度下式（19）和（$\sim -1/L^5$）中卡西米尔–珀德相互作用渐近表达式所预期的 $\sim -1/L^4$ 和 28）依赖关系。插图展示了使用 Gmsh 生成的圆柱–平面几何的代表性网格 [28]。

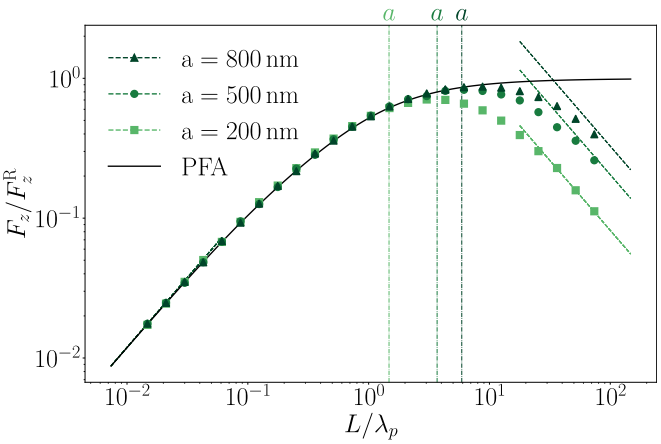


图 8. 圆柱体与半空间之间的卡西米尔力随间距变化 L。温度固定为 $T = 0$K，考察不同的圆柱半径 a及其对应的高度 $b = 2a$。力以式（20）中卡西米尔压强的迟滞极限乘以圆柱底面面积进行归一化。与图 7一样，符号表示数值结果，虚线表示渐近预测，实线表示基于近邻力近似（PFA）的半解析近似。在短间距下，数值结果恢复了式（19）预测的 $\sim -1/L^3$ 行为；而在大间距下，则重现了式（28）中卡西米尔–珀德相互作用给出的 $\sim -1/L^5$ 依赖关系，其中 $\alpha(0)$ 随 a而变化。

图 8展示了这种行为，其中考察了 a 取不同值且温度为 $T = 0$K 时的圆柱体。为突出其与近邻力近似（PFA）预测（实线）的偏差，归一化时采用式（20）中的卡西米尔压强乘以圆柱底面面积。对于每种圆柱体尺寸，数值数据（符号）都逐渐趋近于式（28）所描述的渐近行为。正如预期，a的值越小，数值计算开始偏离近邻力近似（PFA）的距离就越短。渐近表达式对 a 的依赖关系可直接由关系式$\alpha(0) = 6\epsilon_0\pi a^3$得出。

最后需要强调的是，尽管可以依据物理原理预测并解析评估渐近行为，但中间区域缺乏闭式表达式和精确估算。在这一范围内，几何形状、色散和温度之间的相互作用决定了力值，这对实验装置具有重要意义；只有通过本文所介绍的数值方法等手段，才能获得足够精确的预测。

V. 结论

在本研究中，我们提出了一种基于时域有限元的高准确性框架，采用麦克斯韦应力张量形式计算卡西米尔力。该数值方案使用间断

伽辽金时域（DGTD）方法，在有限温度下评估由一般材料模型描述的任意形状物体之间的卡西米尔相互作用。通过将电磁格林张量表示为系统对偶极激励的响应，应力张量可改写为一组由时域中的电偶极子和磁偶极子源驱动的经典散射问题。针对两个半空间之间卡西米尔相互作用的基准计算表明，在多个长度尺度范围内，结果与利夫希茨公式高度吻合。实现这一结果的关键步骤包括为电源和磁源设计特定的时间轮廓，以及开发一种基于谐波反演的过程，用于外推电磁场的长时间行为。关于该方案的收敛性，我们的分析表明，其主要受时间截断和空间离散化限制。

我们进一步将该框架应用于有限金属圆柱体与基底之间的卡西米尔相互作用；对于这种几何形状，目前不存在解析解。数值结果再现了短距离和长距离极限下预期的渐近行为，同时还对中间区域给出了定量预测，在该区域中，几何形状、色散和温度效应以复杂的方式相互作用。我们面临的主要技术挑战之一，是计算穿过闭合积分表面的麦克斯韦应力张量通量。对于本文研究的特定构型，我们采用高斯求积方案，只需相对较少的求积点，便达到了所需的准确性。尽管当前计算受益于圆柱对称性，但对于对称性较低的构型，也可以通过优化的二维高斯求积或求积方案扩展该框架 [93–95]。尽管这种扩展会增加所需的模拟次数，但各次运行彼此独立，因此该方案非常适合在高性能计算集群上并行化。这凸显了间断伽勒金时域方法在常用近似方法（如近距离力近似）以及更严格的散射多极展开方法无法处理的构型中的灵活性和准确性。

总之，间断伽辽金时域方法为在时域中计算卡西米尔型力提供了一种高效且精确的替代方案。它能够处理任意几何形状、材料模型和有限温度，因此特别适合研究微纳尺度系统中的涨落诱导力。未来的发展方向可能包括实现曲线单元以保持高阶收敛 [73]，，这对于实验装置中常见的球形几何尤其有益。在材料方面，该方法可扩展至纳米结构几何中的空间色散模型，而这类模型在卡西米尔物理学中正变得越来越重要 [96, 97]。该间断伽辽金时域方法通过辅助微分方程自然地处理空间色散 [50, 98]，，相比边界元方法具有显著优势，后者仅限于处理表面；相比时域有限差分法也有优势，后者难以在具有多个长度尺度的固定网格上解析亚纳米级变化。

致谢

C.M.F. 和 K.B. 感谢德国研究基金会（DFG）通过协同研究中心（CRC）1375 项目 A06（项目编号 398816777）提供支持。F.I. 感谢柏林量子计划 BERLIN QUANTUM 提供的资金支持。该计划由柏林市创新促进基金资助。

附录 A： $\{g_T^\sigma$**的渐近行为**$\mathrm{Im}\,(-\tau)\}$

方程（$\{g_T^\sigma(-\tau)\}$ 中的核函数 Im 15）是该方法的核心量。本附录考察其在短时间、长时间以及有限温度和零温度区域中的渐近行为，针对电（$\sigma = E$）和磁（$\sigma = H$）偶极源。

在短时间极限下，即 $\tau \ll 1/\gamma$ 且$\tau \ll 1/\omega_{\mathrm{th}}$，其中 $\omega_{\mathrm{th}} = 2\pi k_{\mathrm{B}}T/\hbar$，多对数函数可以渐近展开为 $\mathrm{Li}_{-l}(\mathrm{e}^{-\omega_{\mathrm{th}}\tau}) \sim l!/(\omega_{\mathrm{th}}\tau)^{l+1}$ [69]。在此区域，方程（15）中的表达式由最低阶项给出主导贡献，即 $l = s+1$ 当 $\sigma = E$ 且 $l = s$ 当$\sigma = H$时。将其代入方程（15），即可得到短时间行为

$$\lim_{\tau\to 0} \mathrm{Im}\,\{g_T^\sigma(-\tau)\} \sim \tilde{g}_0^\sigma \frac{(s+1)!}{(\gamma\tau)^{s+2}}\,, \tag{A1}$$

其中 $\tilde{g}_0^\sigma = \gamma^3/2\pi j_0^\sigma s!$ 请注意，式（A1）与温度无关，且对磁源和电源都相同，揭示了短时间内与源类型无关的幂律发散 [50]。对于我们所选的 $s = 4$，这与图 $1/\tau^6$ 2 中（c）面板插图所示的行为相吻合。

在相反的极限下，即对于 $\tau \gg 1/\gamma$ 和 $\tau \gg 1/\omega_{\mathrm{th}}$，条件$^{-\omega_{\mathrm{th}}\tau} \ll 1$ 成立，因此多对数函数呈指数衰减。因此，式（14）中的松原级数由其第一项主导，从而得到渐近行为

$$\lim_{\tau\to\infty} \mathrm{Im}\{g_T^\sigma(-\tau)\} \sim \tilde{g}_0^\sigma \begin{cases} \dfrac{\omega_{\mathrm{th}}}{2\gamma} & \sigma = E\,, \\ \mathrm{e}^{-\omega_{\mathrm{th}}\tau} \displaystyle\sum_{l=0}^{s} \binom{s}{l} \left(\frac{\omega_{\mathrm{th}}}{\gamma}\right)^{l+2} & \sigma = H\,, \end{cases} \tag{A2}$$

因此，电核函数趋近于常数，而磁核则呈指数衰减。

随着温度趋近于零，相邻 Matsubara频率之间的间隔变得极小，式（14）中的离散求和趋近于积分，

$$\omega_{\mathrm{th}} \sum_{m=0}^{\infty}{}' \longrightarrow \int_0^{\infty} \mathrm{d}\xi \ . \tag{A3}$$

在此情形下，式（15）中的核函数化为纯幂律项之和，表示为

$$\lim_{T\to 0} \mathrm{Im}\left\{g_T^\sigma(-\tau)\right\} = \tilde{g}_0^\sigma \begin{cases} \displaystyle\sum_{l=0}^{s+1} \binom{s+1}{l} \frac{l!}{(\gamma\tau)^{l+1}} & \sigma = E \ , \\ \displaystyle\sum_{l=0}^{s} \binom{s}{l} \frac{(l+1)!}{(\gamma\tau)^{l+2}} & \sigma = H \ . \end{cases} \tag{A4}$$

在短时间内，$\tau \ll 1/\gamma$，这些项再现了式（A1）中描述的发散行为。在长时间极限下，$\tau \gg 1/\gamma$，只有最低阶项有贡献，因此得到

$$\lim_{\substack{T\to 0 \\ \tau\to\infty}} \mathrm{Im}\left\{g_T^\sigma(-\tau)\right\} \sim \tilde{g}_0^\sigma \begin{cases} \dfrac{1}{\gamma\tau} & \sigma = E \ , \\ \dfrac{1}{(\gamma\tau)^2} & \sigma = H \ , \end{cases} \tag{A5}$$

这表明其呈幂律衰减，与有限温度下观察到的常数行为或指数衰减行为形成对比。如上所述，图2中各面板 (c) 的插图所示，数值计算证实了长时间渐近趋势。

附录 B： γ 和 χ^σ的作用

式（11）中的时变电流密度取决于两个脉冲整形参数： γ，它决定脉冲的时间和频谱特性；以及 χ^σ，这是一个离散源特定参数，可调制脉冲的时间轮廓，并影响积分核的衰减行为，详见附录 A。尽管在理论描述中，这两个参数形式上可以任意取值，但全面理解它们的影响对于确保数值收敛、计算效率和准确性至关重要。

在式（11）的时域中， γ 起指数包络的作用，用于控制脉冲宽度；而在式（13的频域中，它决定频谱带宽。增大 γ 会产生时间上更窄、频谱上更宽的脉冲。原则上，对于宽带激发，较大的 γ是理想的 [41]。然而，除了塑造脉冲的时域和频谱特性之外的脉冲， γ 还会通过核函数 $\mathrm{Im}\{g_T^\sigma(-\tau)\}$影响数值方案的收敛行为。正如附录 A 中所讨论的，当 $\tau \ll 1/\gamma$时，该函数随 $\sim 1/\tau^{s+2}$发散；当 $1/\gamma \ll \tau \ll 1/\omega_{\mathrm{th}}$时，则随 $\sim 1/\tau^{2-\chi^\sigma}$衰减，其中 χ^σ 可以是 0 或 1。这两种状态在特征时间尺度 $t^\star = [(s+1)!]^{1/(s+\chi^\sigma)}/\gamma$处相交，该时间尺度标示出被积函数上升沿 $I^\sigma_{ij,T}$ 在短时间（$\tau < t^\star$）内向长时间（$\tau > t^\star$）下的拖尾边缘的转变，参见图 2 的 (d) 面板。为避免相关场贡献过早受到抑制， $t^\star$ 被设定为与物理到达时间L/c 对齐。因此， γ 的最优选择必须兼顾宽带激励，以及核函数与散射场到达时间的适当对齐。在实践中，我们发现，设定 $\gamma \lesssim \mathrm{c}/2L$ 对广泛的长度尺度均有效。

在有限温度下，时间尺度 $1/\omega_{\mathrm{th}}$ 会改变核函数的长时间行为。当 $\tau \gg 1/\omega_{\mathrm{th}}$时，热效应占主导；根据 χ^σ 的不同，核函数会趋于常数或呈指数衰减，如式（A2）所示。对于满足 $\chi^E = 1$ [50]的电源，核函数在长时间极限下变为与时间无关。在这种情况下，式（22）中时间积分的收敛性主要由散射电场的衰减行为决定。然而，由于选择$\chi^E = 1$意味着式（11）中电流分布在正时间上的积分因长时间下净偶极矩为零而消失，式（22）中的时间积分会在其渐近值附近振荡，因此对截断时间不再那么敏感，如图 2（e）左栏的插图所示。

磁源的情况则有所不同。若保留$\chi^H = 1$ ，核函数在长时间下仍会趋于常数 $\tau \gg 1/\omega_{\mathrm{th}}$。再加上系统中的非振荡模衰减缓慢，导致散射磁场也缓慢衰减 [66–68], ，如图 2（b）右栏所示，这会损害数值收敛性。为提高非零温度下时域计算的性能，我们因此设定 $\chi^H = 0$。这会使式（ $\xi_m/j^\sigma \mathrm{i}\xi_m$）中的项在式（14）中于 $\xi_m = 0$处消失，从而使核函数在长时间下呈指数衰减，参见式（A2）。

附录C：基准量

$^-$参考量$f^\sigma_{ij.\ T}$ 通过对相应格林张量分量进行复频域计算获得，并用于评估数值时间积分方案的准确性。与式（6）和（7）类似，麦克斯韦应力张量可在频域中用电磁格林张量表示为

$$\langle \hat{\mathrm{T}}_{ij}(\mathbf{r},t)\rangle_T = -2k_{\mathrm{B}}T \sum_\sigma \sum_{m=0}^{\infty}{}' \frac{\xi_m^2}{\mathrm{c}^2} \mathcal{G}^\sigma_{ij}(\mathbf{r}, \mathrm{i}\xi_m) \ , \tag{C1}$$

其中

$$\mathcal{G}^{\sigma}_{ij}(\mathbf{r},\mathrm{i}\xi_m) = G^{\sigma}_{ij}(\mathbf{r},\mathrm{i}\xi_m) - \frac{\delta_{ij}}{2}\sum_k G^{\sigma}_{kk}(\mathbf{r},\mathrm{i}\xi_m)\ . \quad \text{(C2)}$$

对虚频率的求和源于实频率应力张量的维克旋转。这将振荡被积函数转换为指数衰减的被积函数，从而易于数值处理 [61]。对局域的逐分量贡献

因此，单位面积卡西米尔力为

$$\bar{f}^{\sigma}_{ij,T}(\mathbf{r}) = -2k_{\mathrm{B}}T{\sum_{m=0}^{\infty}}' \frac{\xi_m^2}{\mathrm{c}^2} G^{\sigma}_{ij}(\mathbf{r},\mathrm{i}\xi_m)\ . \quad \text{(C3)}$$

然而，格林张量的解析表达式G^{σ} 仅适用于少数高度对称的几何结构。其中一种情况是第 IV A 节讨论的两个平行半空间组成的系统。由于平移对称性，格林张量仅取决于垂直坐标 z，而方位对称性确保仅有以下分量不为零： $G^{\sigma}_{xx} = G^{\sigma}_{yy} \equiv G^{\sigma}_{\parallel}$和 $G^{\sigma}_{zz} \equiv G^{\sigma}_{\perp}$。对于两个相同的半空间，它们之间由宽度为 L的真空间隙隔开时，电格林张量为 [99]

$$G^{E}_{\parallel}(z,\mathrm{i}\xi_m) = \frac{1}{8\pi}\int_0^{\infty}\mathrm{d}q\,\frac{q}{\kappa}\Bigg[\left(\frac{\kappa \mathrm{c}}{\xi_m}\right)^2 \frac{2r^2_{\mathrm{TM}}(\mathrm{i}\xi_m,q)\mathrm{e}^{-2\kappa L} - r_{\mathrm{TM}}(\mathrm{i}\xi_m,q)\mathrm{e}^{-2\kappa z} - r_{\mathrm{TM}}(\mathrm{i}\xi_m,q)\mathrm{e}^{-2\kappa(L-z)}}{1 - r^2_{\mathrm{TM}}(\mathrm{i}\xi_m,q)\mathrm{e}^{-2\kappa L}} \quad \text{(C4a)}$$

$$+ \frac{2r^2_{\mathrm{TE}}(\mathrm{i}\xi_m,q)\mathrm{e}^{-2\kappa L} + r_{\mathrm{TE}}(\mathrm{i}\xi_m,q)\mathrm{e}^{-2\kappa z} + r_{\mathrm{TE}}(\mathrm{i}\xi_m,q)\mathrm{e}^{-2\kappa(L-z)}}{1 - r^2_{\mathrm{TE}}(\mathrm{i}\xi_m,q)\mathrm{e}^{-2\kappa L}}\Bigg]\ ,$$

$$G^{E}_{\perp}(z,\mathrm{i}\xi_m) = -\frac{1}{4\pi}\int_0^{\infty}\mathrm{d}q\,\frac{q}{\kappa}\left(\frac{q\mathrm{c}}{\xi_m}\right)^2 \frac{2r^2_{\mathrm{TM}}(\mathrm{i}\xi_m,q)\mathrm{e}^{-2\kappa L} + r_{\mathrm{TM}}(\mathrm{i}\xi_m,q)\mathrm{e}^{-2\kappa z} + r_{\mathrm{TM}}(\mathrm{i}\xi_m,q)\mathrm{e}^{-2\kappa(L-z)}}{1 - r^2_{\mathrm{TM}}(\mathrm{i}\xi_m,q)\mathrm{e}^{-2\kappa L}}\ , \quad \text{(C4b)}$$

对于 $0 \le z \le L$。这里， $q = |\mathbf{q}|$ 是面内波矢，$\kappa = \sqrt{q^2 + \xi_m^2/\mathrm{c}^2}$ 是真空中的垂直分量。对于平面几何结构，依据麦克斯韦方程组的对称性，磁格林张量可通过将电格林张量乘以 c^2 ，并交换 TE 和 TM 反射系数而得到

($r_{\mathrm{TE}} \leftrightarrow r_{\mathrm{TM}}$) 在方程（C）中 [75]。实际上，¯第 IV A 2 节中使用的参考值$f^{\sigma}_{ij,\ T}$，是通过对方程（C3）中的 Matsubara求和进行数值计算，并使用方程（C）得到的。所得数值为与时域模拟进行比较提供了可靠的基准。

[1] H. B. G. Casimir，《论两块理想导体平板之间的吸引力》，P. K. Ned. Akad. Wetensc.**360**，793（1948年）。[2] E. M. Lifshitz，《固体间分子吸引力理论》，Sov. Phys. JETP **2**，329（1956年）。[3] F. London，《分子力的理论与体系》，载于 *Quantum Chemistry*，第8卷（World Scientific，2000年），第369–399页。[4] H. B. G. Casimir 和 D. Polder，《迟滞对 London-van der Waals 力的影响》，Phys. Rev. **73**，360（1948年）。[5] P. H. G. M. v. Blokland 和 J. T. G. Overbeek，《覆盖铬层物体间的 van der Waals 力》，J. Chem. Soc. Farad. T. 1. **74**，2637（1978年）。[6] S. K. Lamoreaux，《在 0.6 至 6 μm 范围内演示卡西米尔力》，《物理评论快报》**78**，5（1997年）。[7] U. Mohideen 和 A. Roy，《从 0.1 到 0. 进行卡西米尔力的精密测量》，《物理评论快报》**81**，4549（1998）。

[8] ARoy 和 U. Mohideen，卡西米尔力对边界条件的非平凡依赖性的展示，《物理评论快报》**82**，4380（1999年）。[9] B. W. Harris、F. Chen 和 U. Mohideen，利用金表面对卡西米尔力进行精密测量，《物理评论A》**62**，052109（2000年）。[10] R. S. Decca、D. L´opez、E. Fischbach 和 D. E. Krause，异种金属之间卡西米尔力的测量，《物理评论快报》**91**，050402（2003年）。[11] R. S. Decca、D. L´opez、E. Fischbach、G. L. Klimchit- skaya、D. E. Krause 和 V. M. Mostepanenko，理论与卡西米尔力新实验的精确比较，对热量子效应和长程相互作用施加了更严格的限制，《物理年鉴》特刊，**318**，37（2005年）。[12] R. S. Decca、D. L´opez、E. Fischbach、G. L. Klimchit- skaya、D. E. Krause 和 V. M. Mostepanenko，关于.....的检验

基于卡西米尔压强精确测量对新物理学的检验：两块镀金板之间的卡西米尔压强，物理评论D 75，077101（2007年）。[13] D. E. Krause、R. S. Decca、D. L´opez 和 E. Fischbach，近邻力近似之外的卡西米尔力实验研究，《物理评论快报》98，050403（2007年）。[14] B. Derjaguin，《关于摩擦和黏附的研究，IV：小颗粒黏附理论》，胶体杂志69，155（1934年）。[15] G. Bressi、G. Carugno、R. Onofrio 和 G. Ruoso，平行金属表面之间卡西米尔力的测量，《物理评论快报》88，041804（2002年）。[16] A. O. Sushkov、W. J. Kim、D. A. R. Dalvit 和 S. K. Lamoreaux，热卡西米尔力的观测，自然物理7，230（2011年）。[17] V. B. Bezerra、R. S. Decca、E. Fischbach、B. Geyer、G. L. Klimchitskaya、D. E. Krause、D. L´opez、V. M. Mostepa- nenko 和 C. Romero，对“卡西米尔效应的温度依赖性”的评论，物理评论E辑73，028101（2006年）。[18] G. Bimonte、B. Spreng、P. A. Maia Neto、G.-L. Ingold、G. L. Klimchitskaya、V. M. Mostepanenko 和 R. S. Decca，0.2 与 ..... 之间卡西米尔力的测量：实验方法及与理论的比较，宇宙7（2021年）。[19] G. Bimonte、D. L´opez 和 R. S. Decca，热卡西米尔力的等电子测定，《物理评论B》93，184（2016年）。[20] H. Haghmoradi、H. Fischer、A. Bertolini、I. Gali´c、F. In- travaia、M. Pitschmann、R. A. Schimpl 和 R. I. P. Sed- mik，平行平板力计量学：最终设计评审与展望，物理学6，690（2024年）。[21] G. L. Klimchitskaya、M. Bordag、E. Fischbach、D. E. Krause 和 V. M. Mostepanenko，热卡西米尔力的观测存在疑问，国际现代物理会议系列03，515（2011年）。[22] A. A. Banishev、G. L. Klimchitskaya、V. M. Mostepa- nenko 和 U. Mohideen，展示镀镍球体与镀镍板的铁磁表面之间的卡西米尔力，《物理评论快报》110，137401（2013年）。[23] T. Gong、M. R. Corrado、A. R. Mahbub、C. Shelden 和 J. N. Munday，卡西米尔效应工程化的最新进展——在纳米光子学、纳米力学和化学中的应用，SPIE会议论文集10，523（2021年）。[24] H. Shen、S. Liu、Y. Quan、Y. Li、T. Wang、T. Yu 和 X. Tao，卡西米尔效应的进展：从理论到应用，SPIE会议论文集36，482002（2025年）。[25] F. M. Serry、D. Walliser 和 G. J. Maclay，卡西米尔效应在微机电系统（MEMS）膜条静态偏转与静摩擦粘连中的作用，《应用物理学杂志》84，2501（1998年）。[26] H. B. Chan、V. A. Aksyuk、R. N. Kleiman、D. J. Bishop 和 F. Capasso，卡西米尔力对微机电系统的量子力学驱动，科学291，1941（2001年）。[27] E. Buks 和 M. L. Roukes，微机械系统中的静摩擦粘连、黏附能与卡西米尔效应，《物理评论B》63，033402（2001年）。[28] C. Geuzaine 和 J.-F. Remacle，Gmsh：一款内置前处理和后处理功能的三维有限元网格生成器，国际数值方法工程杂志79，1309（2009年）。[29] O. Kenneth 与 I. Klich，T 算符方法中的卡西米尔力，《物理评论B》78, 014103 (2008)。[30] S. J. Rahi、T. Emig、N. Graham、R. L. Jaffe 与 M. Kardar，电动力学卡西米尔力的散射理论方法，物理评论D 80, 085021 (2009)。[31] M. F. Maghrebi、S. J. Rahi、T. Emig、N. Graham、R. L. Jaffe 与 M. Kardar，具有边缘和尖端的导体的卡西米尔力解析结果，美国国家科学院院刊 108, 6867 (2011年)。[32] M. Hartmann、G.-L. Ingold 与 P. A. M. Neto，卡西米尔力的等离子体与德鲁德模型：超越近邻力近似，《物理评论快报》119, 043901 (2017)。[33] R. Zandi、T. Emig 与 U. Mohideen，球体与平板之间的量子和热卡西米尔相互作用：德鲁德模型与等离子体模型的比较，《物理评论B》81，195423 (2010年)。[34] A. Canaguier-Durand、P. A. M. Neto、A. Lambrecht 与 S. Reynaud，平面-球体几何中的热卡西米尔效应，《物理评论快报》104, 040403 (2010年)。[35] A. Canaguier-Durand、P. A. Maia Neto、A. Lambrecht 与 S. Reynaud，平面-球体几何中德鲁德金属的热卡西米尔效应，《物理评论A》82, 012511 (2010年)。[36] J. L. Xiong 与 W. C. Chew，用积分方程方法高效计算 z 不变几何中的卡西米尔力，应用物理快报 95, 154102 (2009)。[37] J. L. Xiong、M. S. Tong、P. Atkins 与 W. C. Chew，用积分方程方法高效计算任意三维几何中的卡西米尔力，物理快报A 374, 2517 (2010年)。[38] M. T. H. Reid、J. White 与 S. G. Johnson，具有任意材料性质的任意三维物体之间卡西米尔相互作用的计算，《物理评论A》84, 010503 (2011年)。[39] M. T. H. Reid、J. White 与 S. G. Johnson，涨落表面电流：一种高效预测任意几何中任意材料之间卡西米尔相互作用的算法，《物理评论A》88，022514 (2013年)。[40] A. Rodriguez、M. Ibanescu、D. Iannuzzi、J. D. Joannopoulos 与 S. G. Johnson，虚时间中的虚光子：借助标准数值电磁学技术计算精确卡西米尔力，《物理评论A》76, 032106 (2007)。[41] A. W. Rodriguez、A. P. McCauley、J. D. Joannopoulos 与 S. G. Johnson，时域中的卡西米尔力：理论，《物理评论A》80, 012115 (2009)。[42] A. P. McCauley、A. W. Rodriguez、J. D. Joannopoulos 与 S. G. Johnson，时域中的卡西米尔力：应用，《物理评论A》81, 012119 (2010年)。[43] K. Pan、A. P. McCauley、A. W. Rodriguez、M. T. H. Reid、J. K. White 与 S. G. Johnson，时域中非零温度卡西米尔力的计算，《物理评论A》83, 040503 (2011年)。[44] A. Rodriguez、M. Ibanescu、D. Iannuzzi、F. Capasso、J. D. Joannopoulos 与 S. G. Johnson，任意几何中卡西米尔力的计算与可视化：非单调侧壁力与近邻力近似的失效，《物理评论快报》99, 080401 (2007)。[45] S. J. Rahi、A. W. Rodriguez、T. Emig、R. L. Jaffe、S. G. Johnson 与 M. Kardar，平行侧壁对圆柱体之间卡西米尔力的非单调效应，《物理评论A》77"

[46] M. Levin, A. P. McCauley, A. W. Rodriguez, M. T. H. Reid, and S. G. Johnson, 《真空中金属物体之间的卡西米尔排斥》, 《物理评论快报》105, 090403 2010年( )。[47] A. P. McCauley, A. W. Rodriguez, M. T. H. Reid, and S. G. Johnson, 超越偶极区间的卡西米尔排斥（2011年）。[48] A. W. Rodriguez, J. N. Munday, J. D. Joannopoulos, F. Capasso, D. A. R. Dalvit, and S. G. Johnson, 《流体隔开的偏心圆柱体间排斥卡西米尔力导致的稳定悬浮与色散诱导跃迁》, 《物理评论快报》101, 190404 (2008)。[49] A. W. Rodriguez, M. T. H. Reid, F. Intravaia, A. Woolf, D. A. R. Dalvit, F. Capasso, and S. G. Johnson, 《流体中扁椭球体的几何诱导卡西米尔悬浮》, 《物理评论快报》111, 180402 (2013年)。[50] P. T. Kristensen, B. Beverungen, F. Intravaia, and K. Busch, 《使用不连续伽勒金时域方法进行高准确性的卡西米尔-波尔德力计算》, 《物理评论B》108, 205424 (2023年)。[51] K. Busch, M. Konig, and J. Niegemann, 《纳米光子学中的不连续伽勒金方法》, 《激光与光子学评论》5, 773 (2011年)。[52] T. Emig and N. Graham, 《圆盘与平面相对时的电磁卡西米尔能》, 《物理评论A》94, 032509 (2016)。[53] G. Bimonte and T. Emig, 《磁介电材料的卡西米尔与卡西米尔-波尔德相互作用：表面散射展开》, 《物理评论A》108, 052807 (2023年)。[54] T. Emig and G. Bimonte, 《介电介质的多重散射展开：卡西米尔效应》, 《物理评论快报》130, 200401 (2023年)。[55] A. Taflove, *Computational Electrodynamics the Finite-Difference Time-Domain Method* 3 , 第rd 版（ Artech House，马萨诸塞州诺伍德，2005 年）。[56] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 第2版（John Wiley & Sons，纽约，1975年），第848页。[57] R. Kubo, 涨落耗散定理, 《物理学进展报告》29，255 (1966)。[58] W. Eckhardt，电磁涨落与稳态辐射传热的宏观理论，《物理评论A》29，1991 (1984)。[59] A. Sommerfeld，第五章——特征函数与特征值，载于 *Partial Differential Equations in Physics*, 《纯粹与应用数学》第1卷（爱思唯尔，1949年），第166–235页。[60] C.-T. Tai, *Dyadic Green Functions in Electromagnetic Theory* 2 1994 343 , 第nd 版（ IEEE 出版社，），第 页。[61] L. H. Ford，卡西米尔效应谱与Lifshitz理论，《物理评论A》48，2962 (1993)。[62] M. T. H. Reid, A. W. Rodriguez, and S. G. Johnson, 《纳米尺度系统中的涨落诱导现象：驾驭噪声的力量》, 《IEEE会刊》101，531 (2013年)。[63] A. W. Rodriguez, J. D. Joannopoulos, and S. G. Johnson, 《滑移对称几何中的排斥和吸引卡西米尔力》, 《物理评论A》77，062107 (2008)。[64] A. W. Rodriguez, F. Capasso, and S. G. Johnson, 《微结构几何中的卡西米尔效应》, 《自然光子学》5，211 (2011年)。[65] R. Kilianski, C. M. Cisowski, and R. Bennett, 《卡西米尔–波尔德力的算法发现：基态中的排斥》, 《光学快报》50，6377 (2025年)。[66] F. Intravaia and C. Henkel, 《卡西米尔相互作用源自磁耦合涡流，《物理评论快报》103，130405（2009）。[67] F. Intravaia、S. Ellingsen 和 C. Henkel，卡西米尔–福柯相互作用：低温下的自由能与熵，《物理评论A》82，032504（2010）。[68] C. Henkel 和 F. Intravaia，关于“完美晶体”之间的卡西米尔熵，《国际现代物理杂志A》25，2328（2010）。[69] D. C. Wood, *The Computation of Polylogarithms*，技术报告（肯特大学，坎特伯雷，英国，1992）。[70] J. S. Hesthaven 和 T. Warburton，非结构网格上的节点高阶方法：I. 麦克斯韦方程组的时域求解，《计算物理杂志》181，186（2002）。[71] J. S. Hesthaven 和 T. Warburton, *Nodal Discontinuous Galerkin Methods* 2008 500 （施普林格，纽约，）第 页。[72] J. Niegemann、R. Diehl 和 K. Busch，具有优化稳定区域的高效低存储龙格–库塔格式，《计算物理杂志》231，364（2012）。[73] J. Viquerat 和 C. Scheid，一种用于纳米尺度光–物质相互作用的三维曲线坐标间断伽勒金时域求解器，《计算与应用数学杂志》289，37（2015）。[74] P. B. Johnson 和 R. W. Christy，贵金属的光学常数，《物理评论B》6，4370（1972）。[75] D. Dalvit、P. Milonni、D. Roberts 和 F. da Rosa 编，*Casimir Physics*（施普林格，柏林海德堡，2011）。[76] F. Intravaia，模态如何塑造卡西米尔物理学，《国际现代物理杂志A》37，2241014（2022）。[77] C. Henkel、K. Joulain、J.-P. Mulet 和 J.-J. Greffet，耦合表面极化激元与卡西米尔力，《物理评论A》69，023808（2004）。[78] J. Niegemann、W. Pernice 和 K. Busch，使用间断伽勒金时域方法和时域有限差分法模拟光学谐振器，《纯粹与应用光学杂志A》11，114015（2009）。[79] S. Govindjee 和 P.-O. Persson，一种用于机械谐振器品质因数计算的时域间断伽勒金方法，《计算物理杂志》231，6380（2012）。[80] V. A. Mandelshtam 和 H. S. Taylor，时间信号的谐波反演及其应用，《化学物理杂志》107，6756（1997）。[81] M. R. Wall 和 D. Neuhauser，通过滤波对角化，从少量残数或信号的短时片段中提取一般量子本征值或经典正则模频率。I. 理论及其在量子动力学模型中的应用，《化学物理杂志》102，8011（1995）。[82] S. G. Johnson，Harminv，https://github.com/NanoComp/harminv（2004）。[83] S. Y. Buhmann, *Dispersion Forces I*，第247卷（施普林格，2012）。[84] P. T. Kristensen、K. Herrmann、F. I ntravaia 和 K. Busch，使用准正规模对电磁谐振器建模，《先进光学与光子学》12，612（2020）。[85] A. H. Stroud 和 D. Secrest, *Gaussian Quadrature Formulas* 1966 （新泽西州恩格尔伍德克利夫斯，Prentice-Hall，）。[86] L. N. Trefethen，求积公式的精确性，《SIAM评论》64，132（2022）。[87] C. D. Fosco、F. C. Lombardo 和 F. D. Mazzitelli，一种改进的静电学近邻力近似，《物理年鉴》327，2050（2012）。[88] G. Bimonte、T. Emig、R. L. Jaffe 和 M. Kardar，超越邻近近似的卡西米尔力，欧

罗物理快报 **97**，50001（2012）。[89] C. F. Bohren 和 D. R. Huffman，*Absorption and Scattering of Light by Small Particles*（John Wiley & Sons，纽约，2008）。[90] J. Venermo 和 A. Sihvola，圆柱体的介电极化率，《静电学杂志》**63**，101（2005）。[91] F. Intravaia、C. Henkel 和 M. Antezza，原子与表面之间的涨落诱导力：卡西米尔-波尔德相互作用，载于 *Casimir Physics*，《物理学讲义》，第834卷，D. Dalvit、P. Milonni、D. Roberts 和 F. da Rosa 编（施普林格，柏林/海德堡，2011），第345–391页。[92] S. Y. Buhmann 和 D.-G. Welsch，宏观量子电动力学中的色散力，《量子电子学进展》**31**，51（2007）。[93] R. Cools 和 P. Rabinowitz，自 Stroud 以来的单项式求积公式：汇编，《计算与应用数学杂志》**48**，309（1993）。[94] R. Cools，自 Stroud 以来的单项式求积公式：汇编——第2部分，《计算与应用数学杂志》**112**，21（1999）。[95] R. Cools，求积公式百科全书，《复杂性杂志》Oberwolfach 专刊，**19**，445（2003）。[96] R. Esquivel-Sirvent、C. Villarreal、W. Moch´an、A. Contreras-Reyes 和 V. Svetovoy，卡西米尔力中的空间色散：简要综述，《J. Phys. A: Math. Theor.》**39**，6323（2006）。[97] F. Intravaia、S. Koev、I. W. Jung、A. A. Talin、P. S. Davids、R. S. Decca、V. A. Aksyuk、D. A. R. Dalvit 和 D. L´opez，通过金属表面纳米结构化大幅降低卡西米尔力，《Nat. Commun.》**4**，2515（2013年）。[98] G. Wegner、D.-N. Huynh、N. A. Mortensen、F. Intra- vaia 和 K. Busch，Halevi 对欧拉-德鲁德模型的扩展及其在等离激元系统中的应用，《物理评论B》**107**，115425（2023年）。[99] M. S. Toma˘s，多层结构的格林函数：平面腔中的光散射，《物理评论A》**51**，2545（1995）。