



KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH GmbH

Institut für Festkörperforschung

**Funktionale Renormierung an einem
Modell zum Benetzungsübergang**

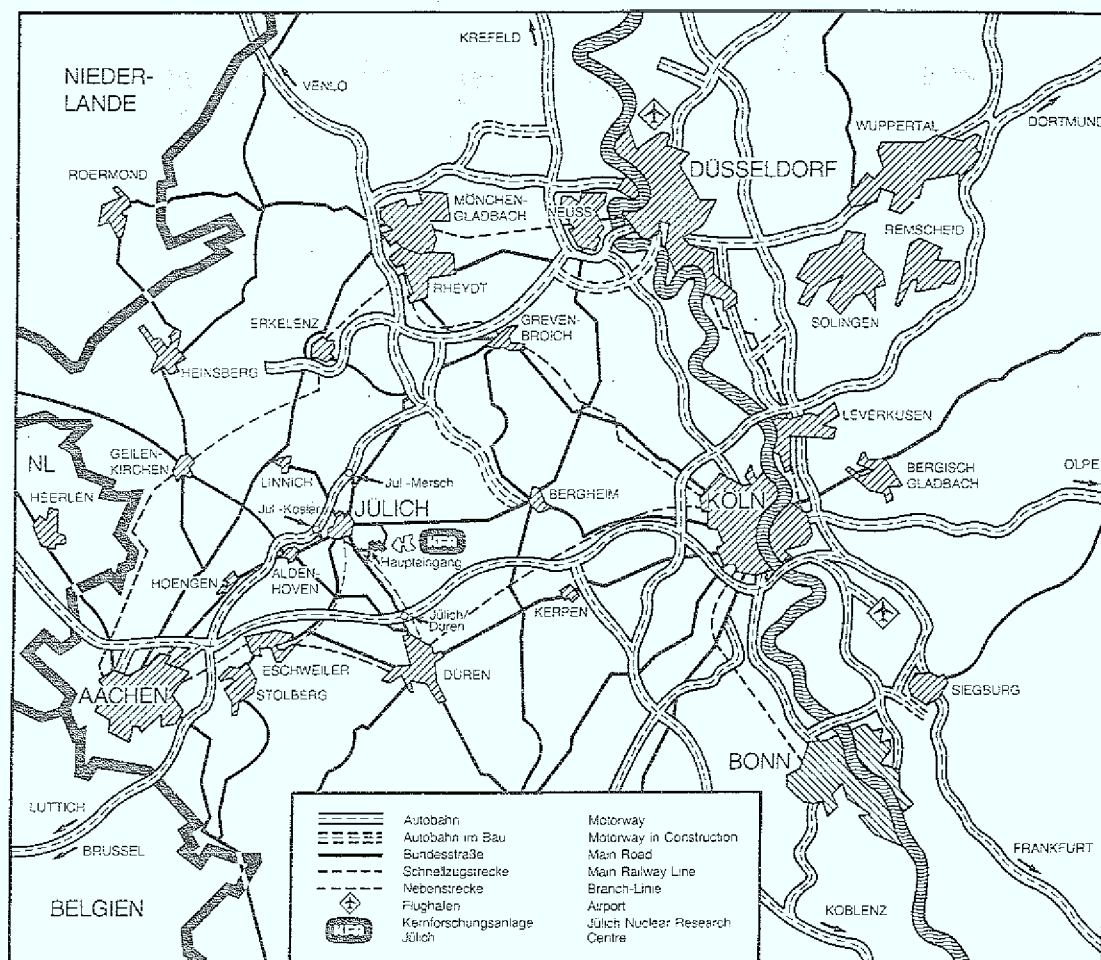
von

Frank Jülicher

Jüli-2318

November 1989

ISSN 0366-0885



Als Manuskript gedruckt

Berichte der Kernforschungsanlage Jülich – Nr. 2318

Institut für Festkörperforschung Jül-2318

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH

Postfach 1913 · D-5170 Jülich (Bundesrepublik Deutschland)

Telefon: 02461/610 · Telex: 833556-0 kf d

Funktionale Renormierung an einem Modell zum Benetzungsübergang

von

Frank Jülicher

Abstract

In this work, we use effective interface models in low dimensions to study wetting transitions of a fluctuating interface at a hard wall in long- and short ranged interaction potentials.

The starting point are models in $d = 1 + 1$ dimensions, which we study using transfermatrix- and renormalization group methods. The renormalization group can be generalized to arbitrary dimensions d .

The structure of wetting transitions which we find for the SOS-model with special interaction potentials is shown to be the same as recent results obtained with an continuum model (Schrödinger equation). Starting with the Gaussian model, we define an *exact functional renormalization group* (RG) in $d = 1 + 1$. This RG shows, that the critical behaviour at these wetting transitions is in fact *universal* for the different models.

Our exact RG has the following properties: (i) it acts in the function space of potentials, $U(z, z')$, where z and z' represent the separation of the interface and the wall; (ii) it has a line of fixed points, $U^*(z, z')$. These fixed points exhibit an unexpected symmetry since they depend only on the product $z \cdot z'$: $U^*(z, z') = \bar{U}(z \cdot z')$; (iii) the line of fixed points exhibits two branches, and the RG flow has a parabolic character describing two subregimes (A) and (B). (iv) In addition, the RG flow leads to a separatrix which represents an analytic continuation of the fixed point line. This separatrix belongs to a third subregime (C) where the wetting transitions are first-order but have unusual scaling properties. As one approaches the boundary between the line of fixed points and this separatrix, the fixed points on the two branches are found to be identical apart from a singular piece at $z \cdot z' = 0$. In this way, the line of fixed points contains a *closed loop* in function space.

The decimation-type RG can be generalized to wetting in $d \neq 1 + 1$ via a Migdal-Kadanoff bond moving scheme. This generalized scheme (which is no longer exact) indicates that the presence of subregime (C) might be a special feature of wetting in $d = 1 + 1$.

INHALTSVERZEICHNIS

1.	Einleitung	1
1.1.	Benetzungsübergänge	1
1.2.	Problemstellung	3
2.	Konzepte, Lösungsmethoden und Ergebnisse	5
2.1.	Grenzflächenmodelle in niedrigen Dimensionen	5
2.2.	Diagonalisieren der Transfermatrix des SOS Modells	7
2.3.	Funktionale Renormierung	15
3.	Transfermatrixmethoden	30
3.1.	Die Transfermatrix	30
3.2.	Der Raugigkeitsexponent	33
3.3.	Das Eigenwertproblem des SOS Modells	34
3.3.1.	Übergang zu einer Differentialgleichung	34
3.3.2.	Das Regime intermediärer Fluktuationen (IFR)	36
3.3.2.1.	Lösung der Differentialgleichung	36
3.3.2.2.	Unterregimes des IFR	41
3.3.3.	Das Regime schwacher Fluktuationen (WFR)	43
4.	Funktionale Renormierung des Potentials	46
4.1.	Die Idee der Renormierungsgruppenmethode	46
4.2.	Renormierung der Transfermatrix	49
4.2.1.	Definition der Renormierungsgruppe	49
4.2.2.	Das freie SOS-Modell als Beispiel	50
4.3.	Funktionale Renormierung des Gaußschen Modells	52
4.3.1.	Exakte Renormierungsgruppe für Benetzungsübergänge	52
4.3.2.	Analytische Untersuchung der Fixpunktgleichung	53
4.3.3.	Numerische Simulation des RG-Flusses	56
4.3.4.	Die eindimensionale Fixpunktgleichung	59
4.3.5.	Der Übergang ins Unterregime C	60
4.3.6.	Skalenindizes und kritische Exponenten	62

4.3.7.	Das Unterregime C in der Renormierungsgruppe	64
4.4.	Migdal-Kadanoff-Renormierung	67
4.4.1.	Verallgemeinerung der RG auf beliebige Dimensionen	67
4.4.2.	Das asymptotische Verhalten der Fixpunkte	71
4.4.3.	Fixpunkte und Skalenindizes	72
5.	Zusammenfassung der Ergebnisse	74

Anhänge :

Anhang A:	Entwicklung der Fixpunkte an der Wand	77
Anhang B:	Eine Alternative zur Sattelpunktsnäherung	79
Literaturverzeichnis		80

1. Einleitung

1.1. BENETZUNGSÜBERGÄNGE

Benetzungsübergänge treten in Systemen mit mehreren koexistierenden Phasen auf. Betrachten wir z.B. einen Kristall im Gleichgewicht mit seinem Dampf. Nähern wir uns dem Tripelpunkt, so bildet sich eine Flüssigkeitsschicht zwischen Kristall und Dampf (Abb. 1). Am Tripelpunkt kann diese Schicht entweder makroskopisch dick (vollständige Benetzung) oder aber ein mikroskopischer Film von einigen Atomlagen Dicke sein (unvollständige Benetzung).

Ein Benetzungsübergang ist ein Phasenübergang zwischen diesen beiden Zuständen [1] [2]. Häufig sind während experimentell relevanter Zeitskalen nur die gasförmige Phase und der flüssige Film im Gleichgewicht. Die Festkörperoberfläche spielt dann eine passive Rolle, das heißt sie bleibt als feste Wand unbeweglich.

Diese Situation kann mit Hilfe effektiver Grenzflächenmodelle beschrieben werden: Der Kristall wird dabei behandelt als harte Wand (das heißt Fluktuationen der fest-flüssig Grenzfläche werden vernachlässigt), die durch ein anziehendes Wechselwirkungspotential $V(\ell)$ die Grenzfläche zwischen Dampf und Flüssigkeit an die Wand bindet. Dabei bezeichnet ℓ den Abstand der Grenzfläche von der Wand.

Diese Grenzfläche unterliegt thermischen Formfluktuationen, die eine effektive abstoßende Wechselwirkung gegen die Wand erzeugen. Bei einer kritischen Temperatur T_u werden diese Fluktuationen so stark, daß es zu einem Übergang von einem gebundenen zu einem ungebundenen Zustand der Flüssig-Gas-Grenzfläche kommt.

Solche Entbindungsübergänge treten im allgemeinen bei fluktuierenden Objekten wie Grenzflächen, Polymeren und Membranen auf, bei denen eine molekulare anziehende Wechselwirkung mit einer fluktuationsinduzierten abstoßenden Wechselwirkung in Konkurrenz steht [3]. Sie heißen Benetzungs-, Adsorptions- bzw.

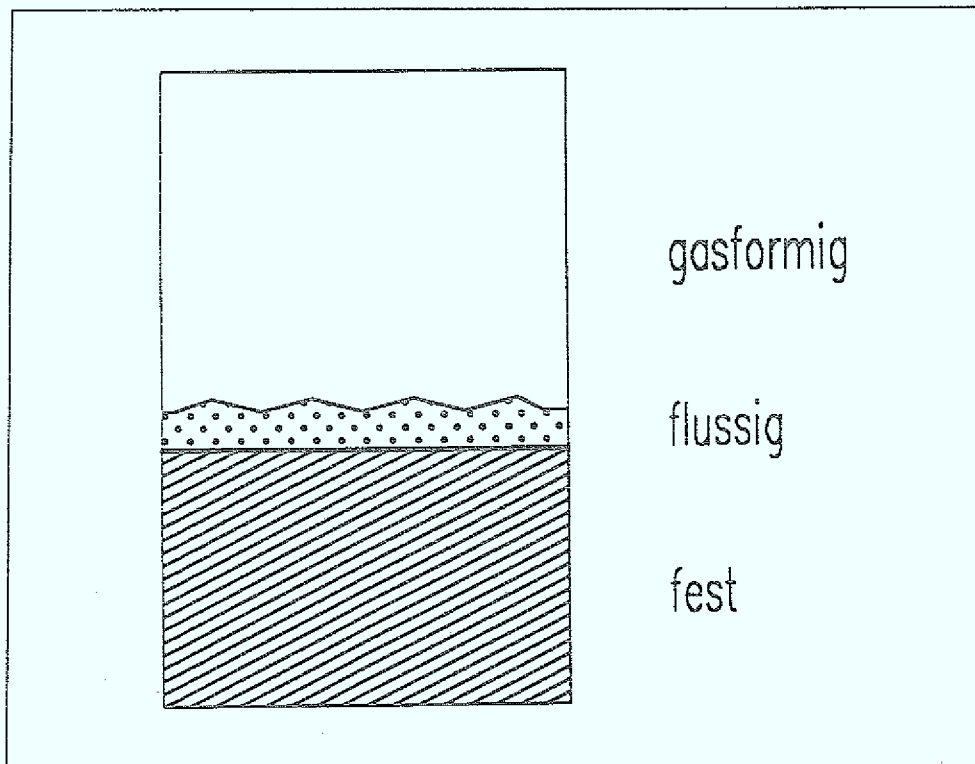


Abb. 1: Vollständige Benetzung. Es hat sich ein makroskopischer Flüssigkeitsfilm gebildet. Die schwach fluktuiierende fest-flüssig Grenzfläche kann als harte Wand behandelt werden.

Adhäsionsübergänge.

Renormierungsgruppen (RG) Methoden ermöglichen im Prinzip ein Verständnis des kritischen Verhaltens an diesen Benetzungsübergängen [1]. Sie beruhen auf der Tatsache, daß mikroskopische Formfluktuationen auf großen Längenskalen zu einer Renormierung des Wechselwirkungspotentials führen. Für die Herleitung von RG-Gleichungen gibt es allerdings kein kanonisches Verfahren. Dies hängt im Detail von der konkreten Problemstellung ab.

Das kritische Verhalten am Entbindungsübergang wird durch einen Fixpunkt der RG beschrieben. Ein solcher Fixpunkt beschreibt das gleichartige kritische Verhalten vieler unterschiedlicher physikalischer Systeme die alle der gleichen Universalitätsklasse angehören.

Für die Zugehörigkeit eines Systems zu einer Universalitätsklasse (oder zu einem Skalenregime) ist bei Benetzungsübergängen nur das asymptotische Verhalten des Wechselwirkungspotentials $V(\ell)$ für große ℓ sowie die Raumdimension d

entscheidend. Man unterscheidet vier verschiedene Skalenregimes [4], in denen wegen verschieden langreichweitiger Potentiale die Fluktuationen eine unterschiedlich wichtige Rolle spielen:

- (i) ein Molekularfeld Regime (MFR) für große d und "genügend" langreichweitige Potentiale;
- (ii) ein Regime schwacher Fluktuationen (WFR) mit nichtklassischen Exponenten (d.h. nicht mean field Exponenten) ebenfalls bei langreichweitigen Potentialen;
- (iii) ein Regime intermediärer Fluktuationen (IFR) mit Potentialen die wie $V(\ell) \sim 1/\ell^\tau$ mit $\tau = 2(d-1)/(3-d)$ für große ℓ abfallen. Dieses Regime enthält eine komplizierte Struktur dreier Unterregimes [5];
- (iv) ein Regime starker Fluktuationen (SFR), zu dem alle Systeme gehören, deren Wechselwirkungspotentiale schneller als $1/\ell^\tau$ abfallen.

Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt bei Systemen in $d = 1+1$ Dimensionen mit $\tau = 2$ und einer eindimensionalen Grenzfläche. Eine derartige Situation sollte sich experimentell bei Adsorbaten an Oberflächen-Stufen realisieren lassen. Es gibt Hinweise darauf, daß auf Metalloberflächen entlang solcher Stufen Liniendipole entstehen [6]. Diese haben eine Wechselwirkungsenergie $V(\ell) \sim 1/\ell^2$, das heißt sie gehören zu dem IFR.

1.2. PROBLEMSTELLUNG

Über das kritische Verhalten an diesen Benetzungsübergängen ist schon vieles bekannt, und zwar vor allem aufgrund einer approximativen RG, bei der man eine ganze Linie von nichttrivialen Fixpunkten findet [7] [8]. Diese approximative RG schafft es jedoch nicht, die gesamte komplizierte Struktur dreier Unterregimes des IFR zu beschreiben. Diese Unterregimes kennt man aber aus analytischen Überlegungen an speziellen Modellen, bei denen das Grenzflächenmodell auf das Problem des Lösen einer Schrödingergleichung abgebildet wird [5].

In der vorliegenden Arbeit werden Systeme in $d = 1 + 1$ Dimensionen (1-dimensionale Grenzfläche in einem 2-dimensionalen System) betrachtet, bei denen

sich Transfermatrix (TM) Methoden als starkes Hilfsmittel anwenden lassen.

Die Arbeit besteht aus zwei Teilen: Zum einen wird mit Hilfe der TM zunächst ausgehend vom Gauß'schen Grenzflächenmodell eine RG definiert, die in $1+1$ Dimensionen formal *exakt* ist. Mittels dieser exakten RG wird die komplette Struktur des IFR beschrieben. Diese funktionale RG wirkt auf den gesamten Funktionenraum von Potentialfunktionen und beschreibt somit ganze Klassen von physikalischen Systemen.

Zusätzlich läßt sich diese in $d = 1 + 1$ Dimensionen exakte RG mit einer Migdal-Kadanoff Näherung für beliebige Raumdimensionen d verallgemeinern.

In einem zweiten Teil wird stellvertretend für jede Universalitätsklasse ein geeignet gewähltes Potential herausgegriffen, und für dieses die Transfermatrix eines solid-on-solid (SOS) Modells diagonalisiert. Bei den hierbei auftretenden Eigenwertproblemen lassen sich Methoden anwenden, die von Lösungen einer Schrödingergleichung schon bekannt sind.

Hierbei sieht man, daß bei einem fest gewählten Potential auch im SOS Modell genau das kritische Verhalten auftritt, wie es von der RG als universell für die verschiedenen Skalenregimes beschrieben wird.

Eine knappe Zusammenfassung der Ergebnisse dieser Arbeit wird am Schluß in Kapitel 5 gegeben. Kapitel 2 stellt die wesentlichen Teile der Arbeit dar, ohne jedoch allzusehr auf technische Details einzugehen. Eine ausführliche Behandlung auch dieser technischen Details ist in den Kapiteln 3 und 4 gegeben.

2. Konzepte, Lösungsmethoden und Ergebnisse

2.1. GRENZFLÄCHENMODELLE IN NIEDRIGEN DIMENSIONEN

Wir werden im Folgenden zwei effektive Grenzflächenmodelle untersuchen, bei denen die eindimensionale Grenzfläche im zweidimensionalen Raum im Mittel in eine feste Richtung zeigt.

Diese Modelle sind viel einfacher gewählt als man von einem echten mikroskopischen Modell erwarten würde. Man kann sie als Modelle auf einer mesoskopischen Ebene ansehen. Dies bedeutet, daß man ausgehend von einem mikroskopischen Modell durch Mittelung über mikroskopische Freiheitsgrade ein grobkörniges effektives Modell erhält. Eine solche effektive Hamiltonfunktion enthält nur noch wenige relevante Terme die ausreichen, das kritische Verhalten richtig wiederzugeben. Die Möglichkeit der Wahl eines vereinfachten effektiven Modells ist also eine Folge der Universalität des kritischen Verhaltens.

Wir betrachten zunächst Modelle in $d = 1 + 1$ Dimensionen. Eine Konfiguration der Grenzfläche (Abb. 2) wird dann durch die Funktion $\ell(x_i) = \ell_i$ beschrieben. ℓ ist dabei eine kontinuierliche Variable die den Abstand der eindimensionalen Grenzfläche von der Wand beschreibt, x_i ist diskret. Überhänge werden in diesen Modellen vernachlässigt. Die Hamiltonfunktionen des solid-on-solid (SOS) Modells und des Gaußschen Modells lauten [9]:

$$\mathcal{H}_{\text{SOS}}\{\ell_i\} = \sum_{i=1}^N J|\ell_i - \ell_{i+1}| + V(\ell_i) \quad (2.1)$$

$$\mathcal{H}_{\text{Gauß}}\{\ell_i\} = \sum_{i=1}^N \frac{J}{2}(\ell_i - \ell_{i+1})^2 + V(\ell_i). \quad (2.2)$$

Der erste Term beschreibt jeweils die Energie, die nötig ist um die Fläche der Grenzfläche zu vergrößern. J ist daher eine Grenzflächensteifigkeit [4] [1].

Die Grenzfläche spürt ein effektives Potential $V(\ell)$, daß sich aus vielen molekularen Wechselwirkungen zusammensetzt und versucht, die Grenzfläche an die

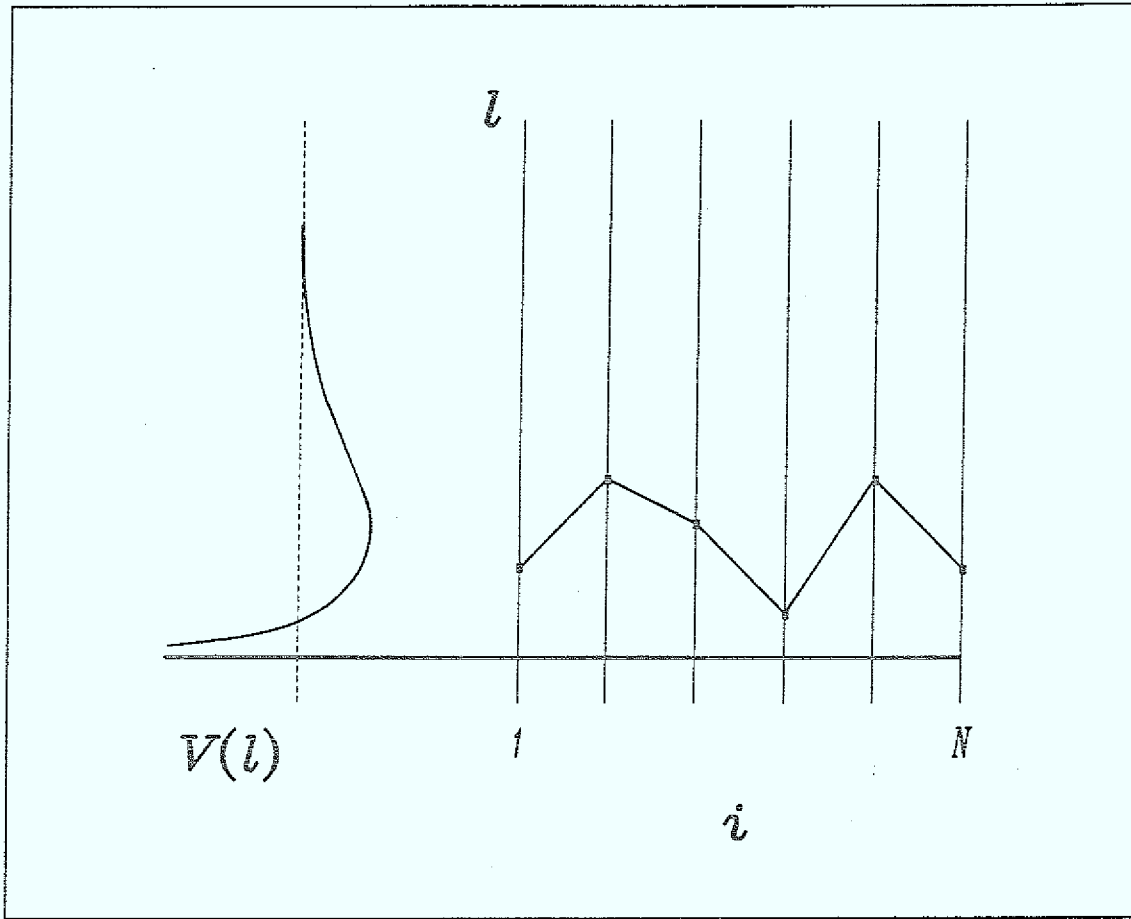


Abb. 2: Schematische Darstellung des Grenzflächenmodells in $d = 1+1$.

Die eindimensionale Grenzfläche fluktuiert in einem Potential $V(\ell)$.

Wand zu binden. In der Form $V(\ell) = \infty$ für $\ell < 0$ wird diese Wand im Potential berücksichtigt. Außerdem wird als Randbedingung $V(\ell) \rightarrow 0$ für große ℓ gefordert.

Mit den symmetrisierten Transfermatritzen

$$T_{\text{sos}}(\ell, \ell') = \exp \left\{ -\frac{J}{T} |\ell - \ell'| - \frac{1}{2T} (V(\ell) + V(\ell')) \right\} \quad (2.3)$$

$$T_{\text{Gauß}}(\ell, \ell') = \exp \left\{ -\frac{J}{2T} (\ell - \ell')^2 - \frac{1}{2T} (V(\ell) + V(\ell')) \right\} \quad (2.4)$$

kann die Zustandssumme Z einfach als

$$Z = \text{Sp}\{T^N\} \quad (2.5)$$

dargestellt werden. Da die Grenzfläche eindimensional ist, läßt sich das Problem der Berechnung von Zustandssumme und Erwartungswerten auf eine wiederholte Matrixmultiplikation der TM entlang der Grenzfläche zurückführen.

2.2. DIAGONALISIEREN DER TRANSFERMATRIX DES SOS MODELLS

Entbindungsübergänge im solid-on-solid (SOS) Modell werden nun untersucht, indem Eigenwerte und Eigenvektoren der Transfermatrix (TM) bestimmt werden.

Durch die Wahl eines geeigneten Potentials, stellvertretend für das gesamte Skalenregime intermediärer Fluktuationen (IFR), wird das Problem auf die gleiche Differentialgleichung abgebildet, wie sie schon von Lipowsky und Nieuwenhuizen [5] für das Gaußsche Modell im Kontinuum untersucht wurde.

Man erhält so auch im IFR des SOS Modells ähnliche Phasendiagramme wie dort und eine Struktur dreier Unterregimes:

- (i) Unterregime A mit Übergängen unendlicher Ordnung;
- (ii) Unterregime B in dem Phasenübergänge 2. Ordnung auftreten wobei die kritischen Exponenten noch von Systemparametern abhängen;
- (iii) Unterregime C mit ungewöhnlichen Übergängen 1. Ordnung.

Mit dem gleichen Verfahren lassen sich auch Phasendiagramme für Potentiale des Regimes schwacher Fluktuationen (WFR) bestimmen.

Die Untersuchung dieser Differentialgleichung ist etwas technisch. Da es sich um eine konventionelle Methode handelt, wird sie vor der Renormierungsgruppenmethode dargestellt. Eine anschauliche Darstellung des durch die Schrödingergleichung beschriebenen kritischen Verhaltens ist in den Phasendiagrammen (Abb.3 und Abb.4), sowie der Beschreibung der Unterregimes gegeben.

Transfermatrixmethoden:

Eine interessante Eigenschaft dieser Methode ist die große Ähnlichkeit des Eigenwertproblems mit einer Schrödingergleichung [10]. Es lassen sich viele Analogien ziehen.

Der größte Eigenwert λ_0 der TM entspricht der Grundzustandsenergie eines quantenmechanischen Problems. Die TM hat immer ein kontinuierliches Spektrum von Streulösungen. Im Falle einer an die Wand gebundenen Grenzfläche gibt es zusätzlich einen gebundenen Grundzustand (Eigenwert λ_0). Am Punkt

des Phasenübergangs trifft dieser gebundene Zustand auf das Kontinuum der Streulösungen und geht dabei verloren.

Das Eigenwertspektrum der TM liefert alle wichtigen Informationen über das System [11]. Mit $K \equiv J/T$ und $U(\ell) \equiv V(\ell)/T$ hat $T(\ell, \ell')$ die Form

$$T(\ell, \ell') = \exp \left\{ -K|\ell - \ell'| - \frac{1}{2}(U(\ell) + U(\ell')) \right\}. \quad (2.6)$$

Die Eigenwertgleichung

$$\int_0^\infty d\ell' T(\ell, \ell') \phi_q(\ell') = \lambda_q \phi_q(\ell) \quad (2.7)$$

definiert die Eigenwerte λ_q und Eigenfunktionen $\phi_q(\ell)$ von T. Die harte Wand, d.h. $U(\ell) = \infty$ für $\ell < 0$ ist in (2.7) durch Abschneiden der Integration bei $\ell = 0$ enthalten.

Ordnet man die Eigenwerte λ_q nach ihrer Größe, d.h. $\lambda_0 > \lambda_1 > \dots$, so gilt wegen

$$Z = Sp\{T^N\} = \sum_q \lambda_q^N \quad (2.8)$$

für die Freie Energie f pro Längensegment im thermodynamischen Limes großer N

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{T}{N} \ln Z = -T \ln \lambda_0. \quad (2.9)$$

Mit Hilfe der $\phi_q(\ell)$ und λ_q lassen sich auch Erwartungswerte $\langle \dots \rangle$ und Korrelationsfunktionen ausdrücken. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $P(\ell)$ der Grenzfläche am Ort ℓ ist gegeben durch

$$P(\ell) = \phi_0^2(\ell). \quad (2.10)$$

Die Korrelationsfunktion

$$C(r) = \langle \ell_i \ell_{i+r} \rangle - \langle \ell_i \rangle^2 \quad (2.11)$$

verhält sich asymptotisch für große r wie

$$C(r) \sim e^{-r/\xi_{||}}, \quad (2.12)$$

wobei $\xi_{||} = 1/\ln(\lambda_0/\lambda_1)$ die parallele Korrelationslänge ist.

Wir werden nun das Eigenspektrum einer TM bestimmen. Dazu wird Die Eigenwertgleichung in eine Differentialgleichung übergeführt. Dies läßt sich für das SOS Modell durchführen, da $\exp\{-K|\ell - \ell'|\}$ Greensche Funktion eines Differentialoperators ist:

$$\left(-\frac{d^2}{d\ell^2} + K^2\right) e^{-K|\ell - \ell'|} = 2K\delta(\ell - \ell') \quad (2.13)$$

Aus (2.7) erhält man so [10]

$$-\frac{d^2}{d\ell^2}\psi(\ell) - \frac{2K}{\lambda}e^{-U(\ell)}\psi(\ell) + K^2\psi(\ell) = 0, \quad (2.14)$$

mit $\psi(\ell) = \exp\{U(\ell)/2\}\phi(\ell)$. Zusätzlich muß $\psi(\ell)$ die Randbedingung

$$\frac{\psi'(0)}{\psi(0)} = K \quad (2.15)$$

bei $\ell = 0$ erfüllen. Aus der Forderung der Existenz des Integrals in (2.7) folgt dazu noch eine Randbedingung für große ℓ an $\psi(\ell)$.

Das Regime intermediärer Fluktuationen:

Mit dieser Differentialgleichung kann jetzt das Skalenregime intermediärer Fluktuationen (IFR) untersucht werden, wobei die Existenz gebundener Zustände von besonderem Interesse ist. Hierzu wird ein geeignetes Potential mit asymptotischem Verhalten $\sim 1/\ell^2$ gewählt, das stellvertretend für die gesamte Universalitätsklasse steht.

Eine Funktion mit dieser Eigenschaft, bei der das Potential im Exponenten von (2.14) keine Schwierigkeiten bereitet ist

$$U(\ell) = \begin{cases} -u & \text{für } 0 < \ell < R \\ -\ln(1 + \frac{W}{\ell^2}) & \text{für } \ell > R \end{cases} \quad (2.16)$$

Dies führt auf das Eigenwertproblem

$$\begin{aligned} \psi''(\ell) + \left(\frac{2K}{\lambda}e^u - K^2\right)\psi(\ell) &= 0 \quad \text{für } 0 < \ell < R \\ \psi''(\ell) - \left(K^2 - \frac{2K}{\lambda}\right)\psi(\ell) + \frac{2KW}{\lambda\ell^2}\psi(\ell) &= 0 \quad \text{für } \ell > R \end{aligned} \quad (2.17)$$

wobei $\psi(\ell)$ an der Stelle $\ell = R$ stetig differenzierbar sein muß.

Wegen der großen Ähnlichkeit mit einer Schrödingergleichung läßt sich (2.17) leicht diskutieren. Dabei entspricht $-a^2 = -K^2 + 2K/\lambda$ einer Energie in der Schrödingergleichung. Für $\lambda > 2/K$ erhält man gebundene Zustände, für $\lambda < 2/K$ Streulösungen.

Für die gebundenen Lösungen von (2.17) gilt

$$\begin{aligned}\psi(\ell) &= A \cos q\ell + B \sin q\ell \quad \text{für } 0 < \ell < R \\ \psi(\ell) &= C \sqrt{\ell} K_\mu(a\ell) \quad \text{für } \ell > R\end{aligned}\tag{2.18}$$

mit

$$q = \left(\frac{2K}{\lambda} e^u - K^2 \right)^{1/2} \tag{2.19}$$

$$a = \left(K^2 - \frac{2K}{\lambda} \right)^{1/2} \tag{2.20}$$

$$\mu = \left(\frac{1}{4} - \frac{2KW}{\lambda} \right)^{1/2}. \tag{2.21}$$

Dabei ist $K_\mu(x)$ eine modifizierte Besselfunktion [12].

Die Forderung von Stetigkeit und Differenzierbarkeit bei $\ell = R$ sowie die Randbedingung (2.15) führen auf

$$R \frac{Kq \cos qR - q^2 \sin qR}{K \sin qR + q \cos qR} - \frac{1}{2} = L_\mu(aR) \tag{2.22}$$

mit der hier definierten Funktion

$$L_\mu(x) = \frac{x K'_\mu(x)}{K_\mu(x)}. \tag{2.23}$$

Am Phasenübergang nähert sich der Eigenwert λ_0 des gebundenen Zustands dem Wert $\lambda_0 = 2/K$. Zur Behandlung dieses Grenzfalles setzt man in (2.19–22) $\lambda = 2/K$.

Auf diese Weise erhält man wegen $L_\mu(0) = -\mu$ als Gleichung für die Phasengrenze $u^* = u^*(w)$

$$KR \frac{U \cos[KRU] - U^2 \sin[KRU]}{\sin[KRU] + U \cos[KRU]} = \frac{1}{2} - \left(\frac{1}{4} - w \right)^{1/2} \tag{2.24}$$

wobei $U = (e^{u^*} - 1)^{1/2}$ ist und $w = K^2 W$.

Für $w > 1/4$ gibt es immer einen gebundenen Zustand was zu einer weiteren Phasengrenze bei $w = 1/4$ und $u < u^*(1/4)$ führt.

Mit Hilfe (2.22) und (2.24) läßt sich jetzt die Divergenz der parallelen Korrelationslänge $\xi_{||}$ bei Annäherung an die Phasengrenze untersuchen, wobei man die in [5] beschriebene Methode verwenden kann. Hierzu setzt man $\lambda_0 = 2/K + \epsilon$. Die so definierte Größe ϵ beschreibt die "Energienlücke" zwischen gebundenem Zustand und den Streulösungen. Am Phasenübergang verschwindet ϵ , d.h. man kann nach der kleinen Zahl ϵ entwickeln.

Wegen $\lambda_1 = 2/K$ divergiert $\xi_{||}$ nach (2.12) wie

$$\xi_{||} \sim \frac{1}{\epsilon}. \quad (2.25)$$

Untersucht man das Verschwinden von ϵ bei Annäherung an die Phasengrenze, so findet man drei Unterregimes:

- (i) *Unterregime A* für $w = 1/4$; $u < u^*(1/4)$. Die Korrelationslänge zeigt hier eine wesentliche Singularität

$$\xi_{||} \sim \exp\{2\pi/(w - 1/4)^{1/2}\}. \quad (2.26)$$

- (ii) *Unterregime B* für $-3/4 < w < 1/4$ und $u^* = u^*(w)$. Die Korrelationslänge divergiert hier mit einem kritischen Exponenten $\nu_{||}$ wie

$$\xi_{||} \sim (u - u^*)^{-\nu_{||}} \quad \text{wobei} \quad \nu_{||} = \left(\frac{1}{4} - w\right)^{-1/2}. \quad (2.27)$$

- (iii) Und ein *Unterregime C* für $w < -3/4$ mit einem Exponenten $\nu_{||} = 1$ unabhängig von w .

Der singuläre Anteil der Freien Energie f skaliert wie

$$f \sim \frac{1}{\xi_{||}} \sim (u - u^*)^{\nu_{||}}. \quad (2.28)$$

Dies zeigt, daß in den Unterregimes A und B die Übergänge kontinuierlich, im Unterregime C dagegen von 1. Ordnung sind.

Bei Übergängen 1. Ordnung existiert ein normierbarer Grundzustand wenn λ_0 den Wert $2/K$ erreicht ("Energie-Null gebundener Zustand"). Im Gegensatz

dazu divergiert die Norm der Grundzustandswellenfunktion $\psi_0(\ell)$ bei einem kontinuierlichen Übergang.

Bei den Phasenübergängen im Regime C verhält sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_*(\ell)$ des Abstandes der Grenzfläche von der Wand asymptotisch für große ℓ wie

$$P_*(\ell) \sim \psi_0^2(\ell) \sim \ell^{1-2\mu}. \quad (2.29)$$

Hierbei ist $\mu = (1/4 - w)^{1/2}$, $P_*(\ell)$ ist also normierbar, solange $w < -3/4$ ist.

Wegen ihrer Skaleninvarianz zeichnet die Verteilung $P_*(\ell)$ im Regime C keine senkrechte Längenskala aus. Als Folge hiervon zeigen die Momente $\xi_n = \langle \ell^n \rangle^{1/n}$ alle ein unterschiedliches Verhalten. Dies steht im Gegensatz zu dem einfachen Skalenverhalten mit nur einer Längenskala

$$\langle \ell \rangle \sim \xi_n \sim \xi_{||}^{1/2} \quad (2.30)$$

wie man es in Regime B findet.

Das Regime schwacher Fluktuationen:

Wir wollen nun das Phasendiagramm des WFR bestimmen. Dabei gehen wir mit genau der gleichen Methode vor, wie im Fall des IFR. Das betrachtete Potential hat jetzt ein längerreichweitiges asymptotisches Verhalten $\sim 1/\ell^\alpha$ mit $0 < \alpha < 2$. Entsprechend (2.16) wählen wir

$$U(\ell) = \begin{cases} -v & \text{für } 0 < \ell < R \\ -\ln(1 + \frac{W}{\ell^\alpha}) & \text{für } \ell > R \text{ und } 0 < \alpha < 2 \end{cases} \quad (2.31)$$

Die Differentialgleichung (2.14) mit diesem Potential hat für $W > 0$ immer gebundene Zustände. Bei $W = 0$ findet man das SFR mit ungebundener Grenzfläche für $u < u^*(0)$. Folglich findet bei $W = 0$ und $v < u^*(0)$ ein kontinuierlicher Übergang statt.

Betrachtet man nun den Fall negativer W . Bei einem kritischen Wert $v^* = v^*(W)$ findet man eine gebundene Lösung $\psi_0(\ell)$ mit $\lambda_0 = 2/K$, wobei für $\ell > R$ gilt

$$\psi_0(\ell) = C\sqrt{\ell}K^{\frac{1}{2-\alpha}}(\nu\ell^{(2-\alpha)/2}); \quad \text{mit } \nu = \frac{2}{2-\alpha}K(-W)^{1/2} \quad (2.32)$$

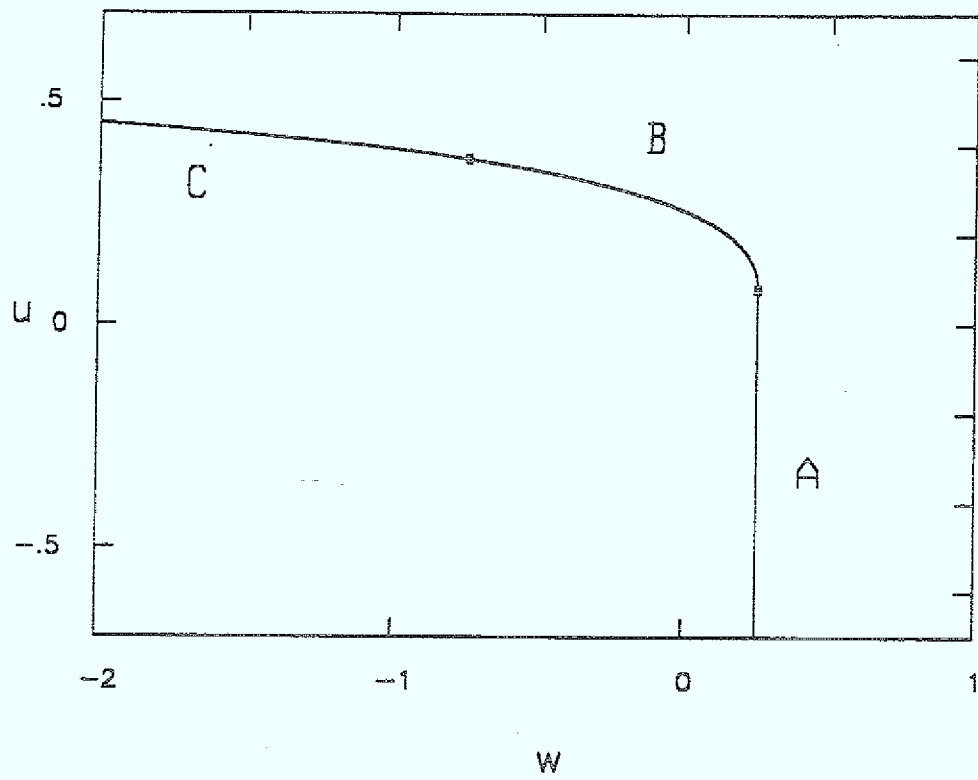


Abb. 3: Phasengrenze $u^* = u^*(w)$ mit $K \cdot R = 2$ für ein Potential aus dem IFR des SOS-Modells.

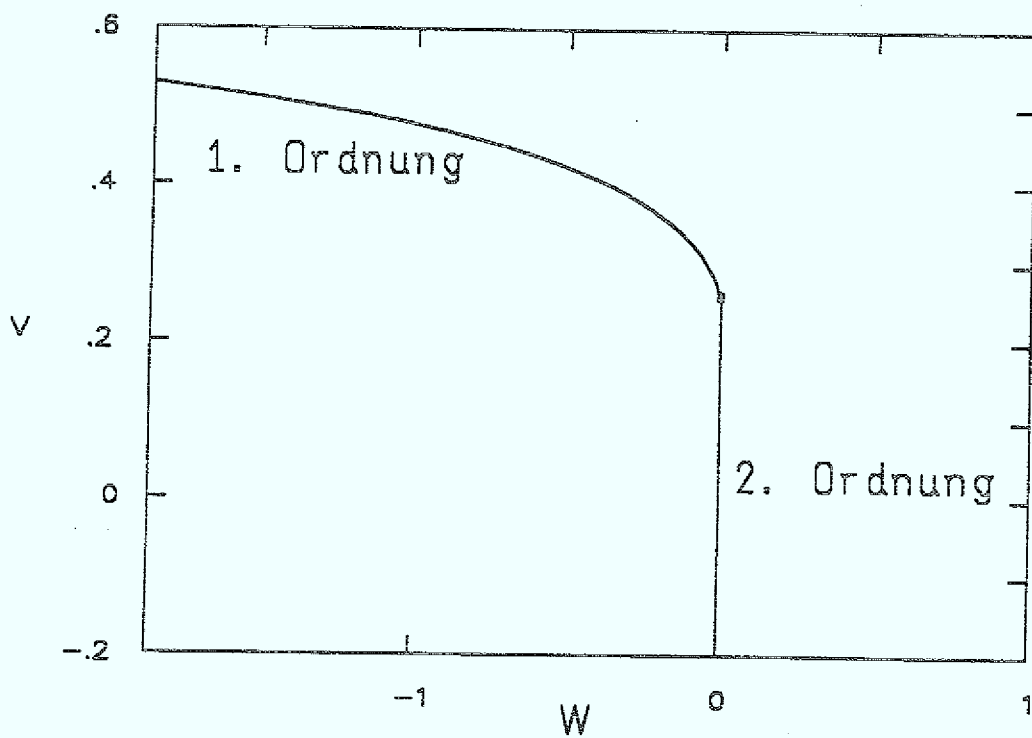


Abb. 4: Phasengrenze $v^* = v^*(W)$ mit $K \cdot R = 2$ und $\alpha = 1$ für ein Potential des WFR

Im Falle $\ell < R$ hat man die gleiche Lösung wie (2.18). Da am Übergangspunkt noch ein gebundener Zustand existiert, findet hier ein sprunghafter Übergang 1. Ordnung in den ungebundenen Zustand statt.

Auch für diese Übergänge 1. Ordnung läßt sich die Phasengrenze $v^* = v^*(W)$ aus Rand- und Stetigkeitsbedingungen bestimmen. Mit $V = (e^{v^*} - 1)^{1/2}$ und $\nu = 2/(2 - \alpha)K(-W)^{1/2}$ gilt

$$KR \frac{V \cos[KRV] - V^2 \sin[KRV]}{\sin[KRV] + V \cos[KRV]} = \frac{1}{2} + \frac{2 - \alpha}{2} L_{\frac{1}{2-\alpha}}(\nu R^{(2-\alpha)/2}). \quad (2.33)$$

Diese Ergebnisse stimmen mit den Resultaten von [13] für $1/z$ -Potentiale (das heißt $\alpha = 1$) überein. Dort wird jedoch nahegelegt, daß es sich dabei um das IFR des SOS-Modells handelt. Die vorliegende Arbeit zeigt dagegen, daß das IFR genau wie auch im Gaußschen Modell $1/z^2$ -Potentiale enthält.

Insgesamt sind also Phasendiagramme des IFR und des WFR bestimmt worden. Das Regime starker Fluktuationen (SFR) ist dabei als Spezialfall $W = 0$ in beiden enthalten. Im WFL findet man kontinuierliche Übergänge bei der trivialen Phasengrenze $W = 0$, außerdem Übergänge 1. Ordnung auf einer Linie $v^* = v^*(W)$.

Im IFR ist die Phasengrenze des Skalenfeldes w zu einem nichttrivialen Wert $w = 1/4$ verschoben, außerdem gibt es hier eine komplexere Struktur dreier Unterregimes. Insbesondere Unterregime C zeigt als ungewöhnliche Eigenschaft Grenzflächenfluktuationen, deren Verteilung einem Potenzgesetz folgt.

Bei der eben vorgestellten Methode wurden willkürlich Potentiale gewählt. Deren physikalische Relevanz wird erst klar, wenn man die Universalität des kritischen Verhaltens verstanden hat.

Mit der im nächsten Abschnitt vorgestellten RG wird dieses universelle Verhalten sowie die gesamte Struktur mehrerer Unterregimes in einer allgemeinen Form beschrieben.

2.3. FUNKTIONALE RENORMIERUNG

Wir untersuchen nun eine funktionale Renormierungsgruppe (RG) zur Beschreibung von Benetzungsübergängen. Dabei beginnen wir mit einer in $d = 1 + 1$ Dimensionen *exakten* RG, bei der im Ortsraum Freiheitsgrade dezimiert werden. Es wird genau das kritische Verhalten, das wir schon im Falle des SOS-Modells in Kapitel 2.1 beschrieben haben, wiedergefunden. Die RG beschreibt die Situation jedoch in einem allgemeineren Rahmen als universell, sowohl für das SOS-Modell, als auch für das Gaußsche Modell.

Diese RG hat die folgenden Eigenschaften:

- (i) Sie erzeugt einen Fluß im Raum der Funktionen $U(z, z')$;
- (ii) Die Fixpunkte $U^*(z, z')$ sind nur Funktionen des Produkts $z \cdot z'$;
- (iii) Der Fluß hat eine parabolische Struktur;
- (iv) Die approximative Wilson-Rekursion [7] [8] schafft es nicht, Unterregime C zu beschreiben, wo unsere RG eine interessante analytische Struktur zeigt.

Danach wird die Methode mit Hilfe einer Migdal-Kadanoff Näherung auf beliebige Raumdimensionen d verallgemeinert.

Definition der Renormierungsgruppe

Wenn man auf mikroskopischen Längenskalen über die Formfluktuationen der Grenzfläche mittelt, erzeugt man auf größeren Längenskalen eine Renormierung des Potentials [3] [14]. Diese Renormierung des Potentials läßt sich ausgehend von einer Renormierung der TM in einfacher Weise formulieren.

Ausgangspunkt ist die Transfermatrix T des Gaußschen Modells, da hier, wie gezeigt wird, nur das Potential renormiert wird. Der elastische (Gaußsche) Term hat dagegen schon einen Fixpunkt erreicht (siehe auch Kapitel 4.2.2.). Mit den dimensionslosen Größen $z \equiv \sqrt{\frac{K}{T}}\ell$ und $U(z) \equiv \frac{1}{T}V(\sqrt{\frac{T}{K}}z)$, hat T die Form

$$T(z, z') = \exp \left\{ -\frac{1}{2}(z - z')^2 - \frac{1}{2}(U(z) + U(z')) \right\}. \quad (2.34)$$

Mittelung über jeden zweiten mikroskopischen Freiheitsgrad (Reskalierungsfaktor $b = 2$) entspricht dem Ersetzen von T durch $T \cdot T$. Damit wir Fixpunkte zu

den Benetzungsübergängen erhalten, muß zusätzlich die z -Variable zu $z' = b^\zeta z$ reskaliert werden. ζ ist dabei der Rauigkeitsexponent [4] [1] für eine freie oder ungebundene Grenzfläche. In zweidimensionalen Systemen ist $\zeta = 1/2$.

Die in dieser Weise definierte Transformation renormiert T wie

$$T'(z, z'') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} T(\sqrt{2}z, z') T(z', \sqrt{2}z'') . \quad (2.35)$$

Sie hat den trivialen Gauß'schen Fixpunkt $T^*(z, z') = \exp\{-\frac{1}{2}(z - z')^2\}$. Wir wollen die Renormierung der Wechselwirkung beschreiben. Dazu führen wir ein verallgemeinertes Potential $U(z, z')$ ein, und wählen als symmetrisierte Startfunktion $U^{(0)}(z, z') = \frac{1}{2}(U(z) + U(z'))$. Ausgedrückt in diesem Potential findet man aus (2.35) die RG-Rekursion

$$\begin{aligned} U^{(N+1)}(z, z'') &= -\ln \int_0^{\infty} \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} \exp \left\{ -(z' - \frac{z + z''}{\sqrt{2}})^2 - G(z' | z, z'') \right\} \\ G(z' | z, z'') &= U^{(N)}(z', \sqrt{2}z) + U^{(N)}(z', \sqrt{2}z'') \end{aligned} \quad (2.36)$$

Sie enthält die harte Wand durch Abschneiden der Integration bei $z' = 0$.

Fixpunkte der Renormierungsgruppe

Zunächst wollen wir alle nichttrivialen Fixpunkte von (2.36) bestimmen, die für große z auf Null abfallen. Diese beschreiben Universalitätsklassen von Entbindungsübergängen. Zwei dieser Fixpunkte, nämlich $U_{\pm}^*(z, z') = -\ln(1 \pm \exp(-2zz'))$ wurden schon vorher von Huse [15] gefunden. Sie fallen exponentiell auf Null ab und beschreiben daher Entbindungsübergänge für kurzreichweitige Potentiale (SFR).

Das asymptotische Verhalten der anderen Fixpunkte kann analytisch aus (2.36) bestimmt werden. Es gilt

$$U^*(z, z') \approx \frac{\rho}{z \cdot z'} \quad \text{für große } z, z' \quad (2.37)$$

$$U^*(z, z') \approx -\frac{\sigma}{2} \ln(z \cdot z') \quad \text{für kleine } z, z' \quad (2.38)$$

Zusätzlich zeigt sich, daß die Fixpunkte nur von dem Produkt $z \cdot z'$ der beiden Variablen abhängen, d.h. $U^*(z, z') = \bar{U}(z \cdot z')$ (Abb. 5). Dies erkennt man, wenn man die folgende Gleichung betrachtet:

$$\bar{U}(z^2) = -\ln \int_0^{\infty} \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} \exp \left\{ -(z' - \sqrt{2}z)^2 - 2\bar{U}(\sqrt{2}zz') \right\} \quad (2.39)$$

setzt man die Lösungen von (2.39) als $\tilde{U}(z \cdot z')$ in (2.36) ein, so zeigt die Numerik, daß sie Fixpunkte von (2.36) sind. Ein analytischer Beweis für diese Behauptung ist jedoch noch nicht erbracht. Auf diese Weise konnten sehr genaue Lösungen der Fixpunktgleichung (2.36) bestimmt werden (Abb. 6 und 7).

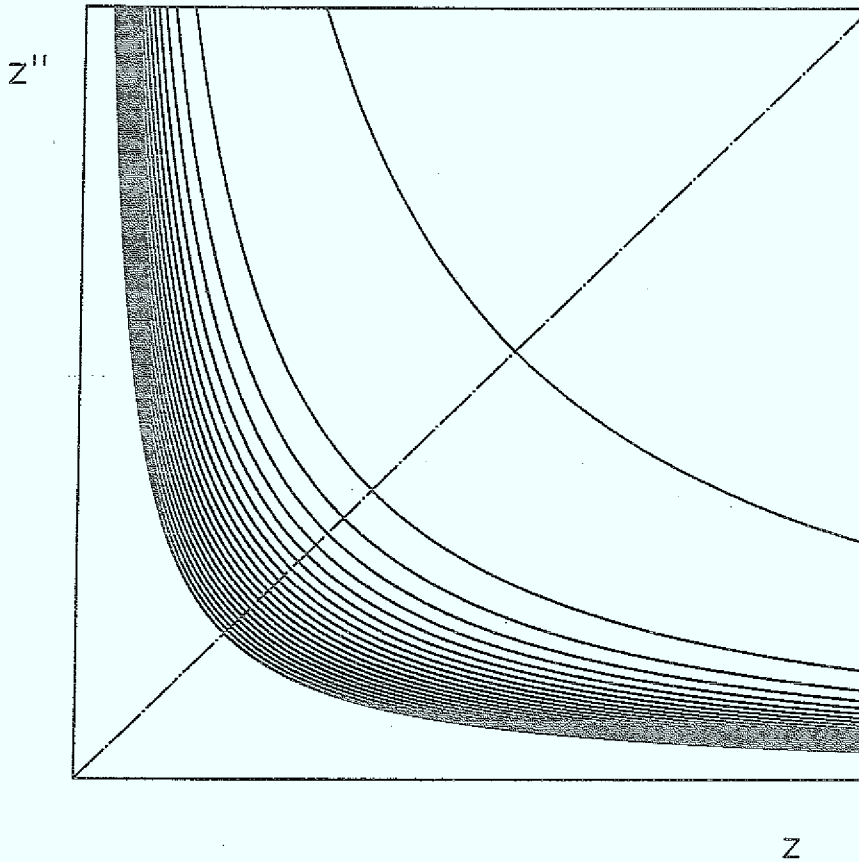


Abb. 5: Höhenlinienplot des instabilen Fixpunkts mit $\sigma = -0.34$ und $\rho = 0.1$. Die Höhenlinien sind innerhalb der numerischen Genauigkeit nicht von Hyperbeln zu unterscheiden.

Nach (2.37) fallen die Diagonalelemente $U^*(z, z)$ der Fixpunkte für große z wie $1/z^\tau$ mit $\tau = 2$ ab. Die Fixpunkte mit $\rho \neq 0$ beschreiben also Entbindungsübergänge des IFR.

Die in (2.37–38) definierten Parameter ρ und σ parametrisieren die lang- und kurzreichweitigen Teile von U^* . Zu jedem Fixpunkt U^* gehört genau ein Paar

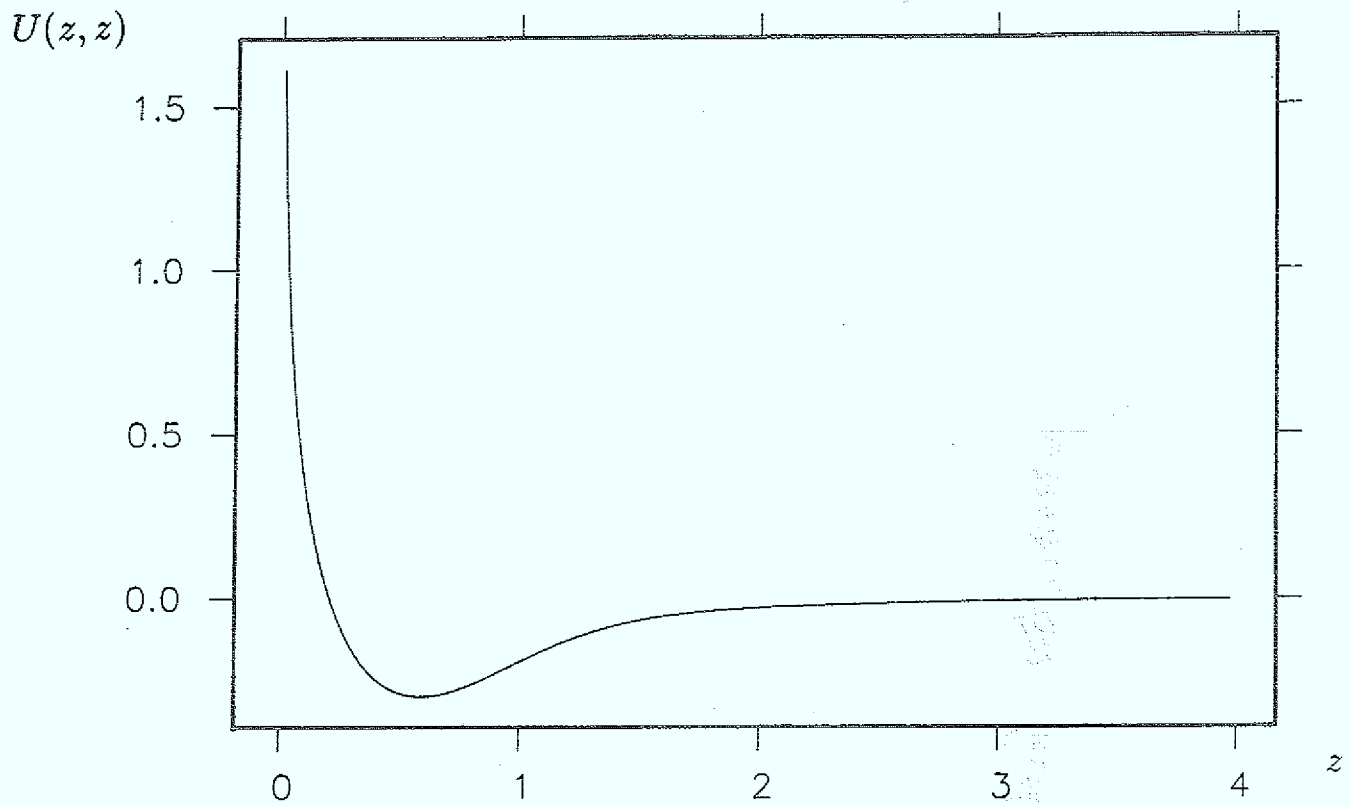
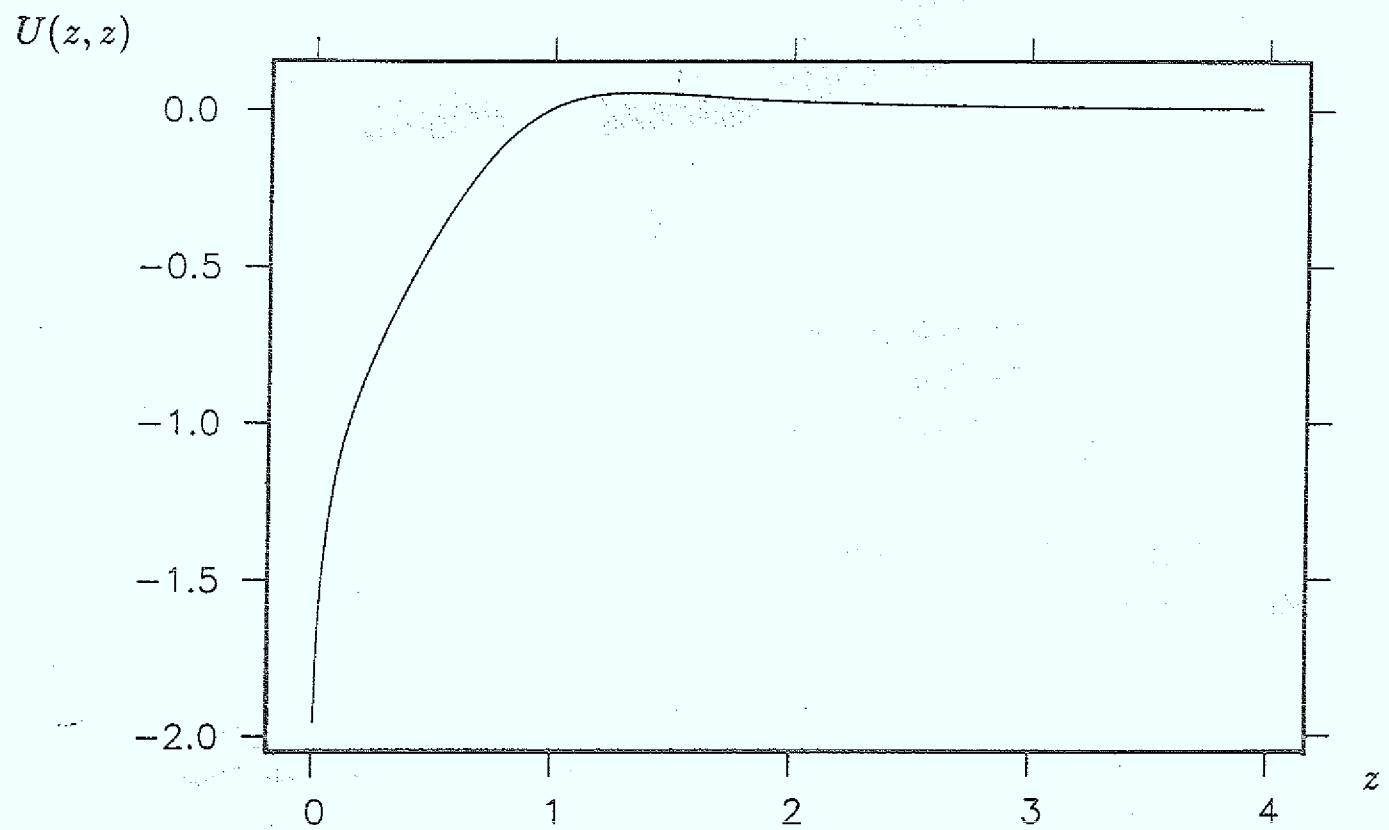


Abb. 6: Diagonalelemente $U^*(z, z)$ der Fixpunktfunktionen mit $(\rho, \sigma) = (-0.1, 0.54)$ (oben) und $(0.1, -0.34)$ (unten).



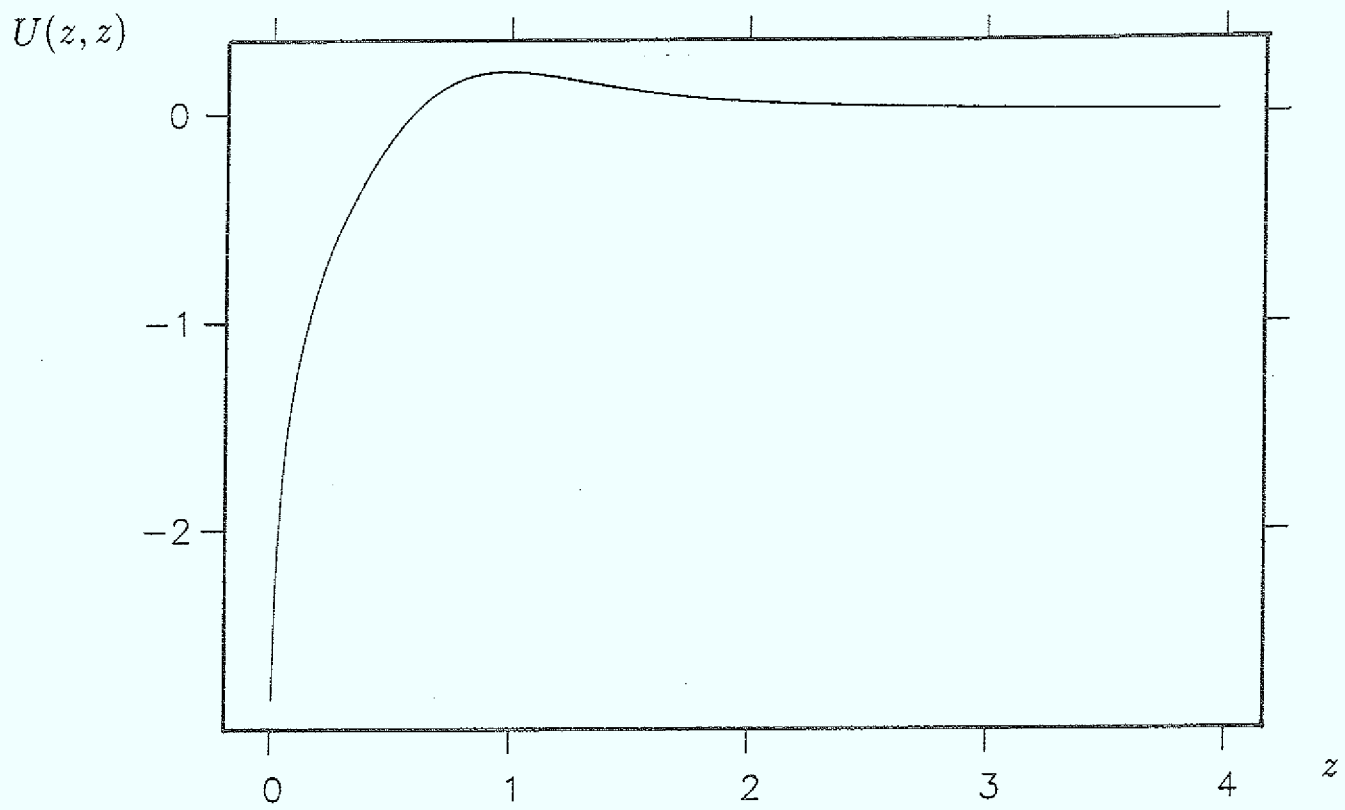
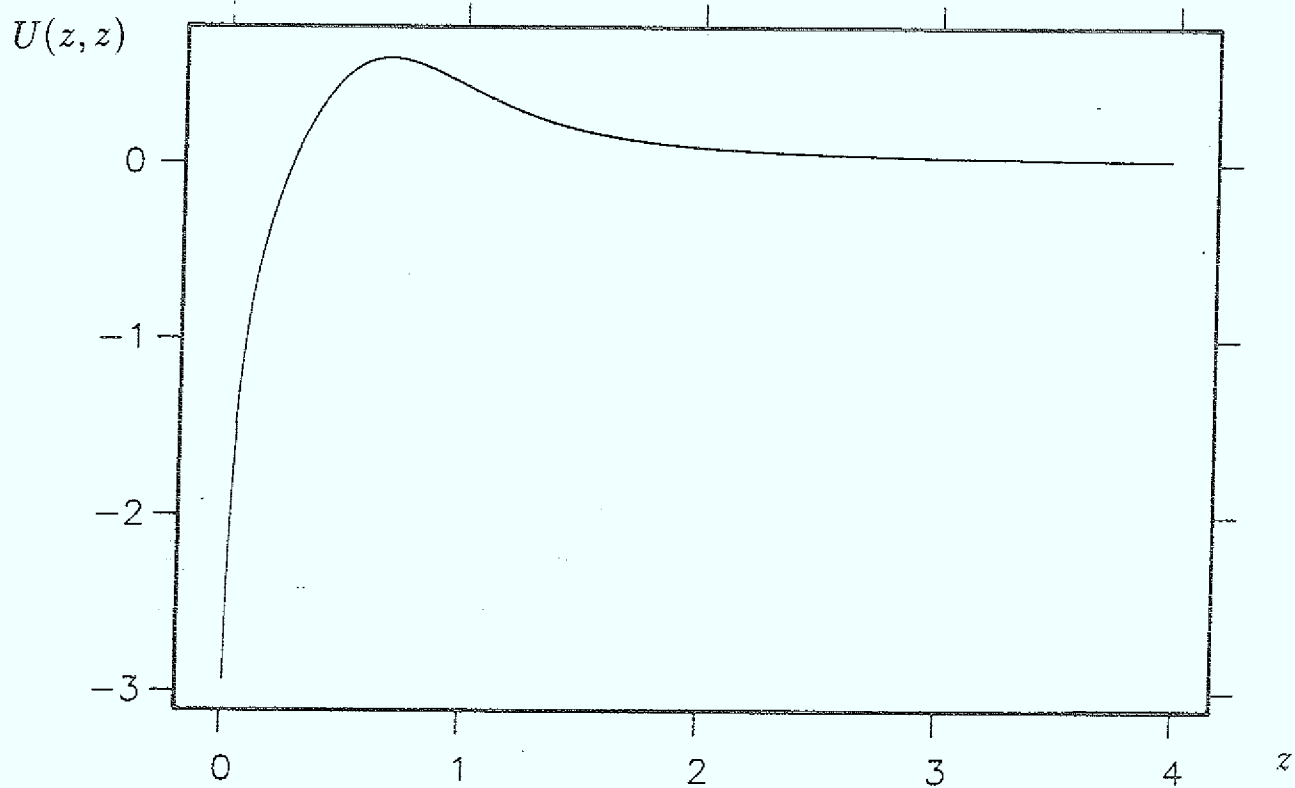


Abb. 7: Diagonalelemente der Fixpunkte $(\rho, \sigma) = (0.2, -0.66)$ (oben) und $(0.3, -0.84)$ (unten).



(ρ, σ) . Im Raum (ρ, σ) liegen alle Fixpunkte genau auf der Parabel

$$\rho = \rho^* \sigma (2 - \sigma) \quad (2.40)$$

mit $\rho^* = -\frac{1}{8}$ (Abb. 8). Zwei Sonderfälle sind die exakt bekannten kurzreichweitigen Fixpunkte $U_{\pm}$ mit $(\rho, \sigma) = (0, 0)$ bzw. $(0, 2)$.

Die hier vorliegende parabolische Struktur ähnelt der Fixpunktlinie, die man aus der von Lipowsky und Fisher [7] eingeführten approximativen RG erhält. Letztere Fixpunkte zeigen jedoch eine Potenzsingularität $\sim 1/z^{\tau}$ an der Wand [8] [14], während wir hier eine logarithmische Singularität finden. Diese logarithmische Singularität ist wesentlich für die Beschreibung des Unterregimes C des IFR.

Die Parabel besteht aus zwei Ästen. Für $\sigma > 1$ aus einem rechten Ast, bestehend aus stabilen Fixpunkten U_0^* , die den ungebundenen Zustand beschreiben. Sie endet am Parabelscheitel $(\rho^*, 1)$, der Benetzungsübergänge mit einer wesentlichen Singularität beschreibt (Unterregime A). Ein zweiter Parabelast für $-1 < \sigma < 1$ besteht aus instabilen Fixpunkten. Sie beschreiben Übergänge 2. Ordnung. Die parallele Korrelationslänge $\xi_{\parallel}$ divergiert hier wie $\xi_{\parallel} \sim (T - T_u)^{-\nu_{\parallel}}$ wobei $\nu_{\parallel} = 1/y$, und y der relevante Skalenindex des Fixpunktes ist. Der Skalenindex y variiert entlang der Parabel wie

$$y = \frac{1 - \sigma}{2} \quad \text{für} \quad -1 < \sigma < 1. \quad (2.41)$$

Mit (2.40–41) erhält man damit genau das Ergebnis $\nu_{\parallel} = 2/(1 - \sigma) = 2/[1 + 8\rho]^{1/2}$ das schon von der Transfermatrixmethode bekannt ist (2.27).

Die Fixpunktlinie bricht am Punkt $(\rho^{**}, -1)$ mit $\rho^{**} = -3\rho^*$ ab. Dies liegt daran, daß für $\sigma \leq -1$ die Integration an der Wand in der Fixpunktgleichung (2.36) singularär wird.

Fassen wir nun noch einmal die gesamte Fixpunktstruktur von (2.36) zusammen: Die Fixpunkte $U^*(z, z')$ sind Funktionen allein des Produkts $z \cdot z'$ und lassen sich alle durch die beiden Parameter ρ und σ parametrisieren. σ parametrisiert das Verhalten von U^* an der Wand (kleine z), ρ gibt das asymptotische Verhalten bei großen z wieder. Es existiert eine Linie von Fixpunkten, die im (ρ, σ) -Raum eine Parabel bildet; das heißt, für einen Wert von ρ kann es zwei verschiedene Fixpunkte geben.

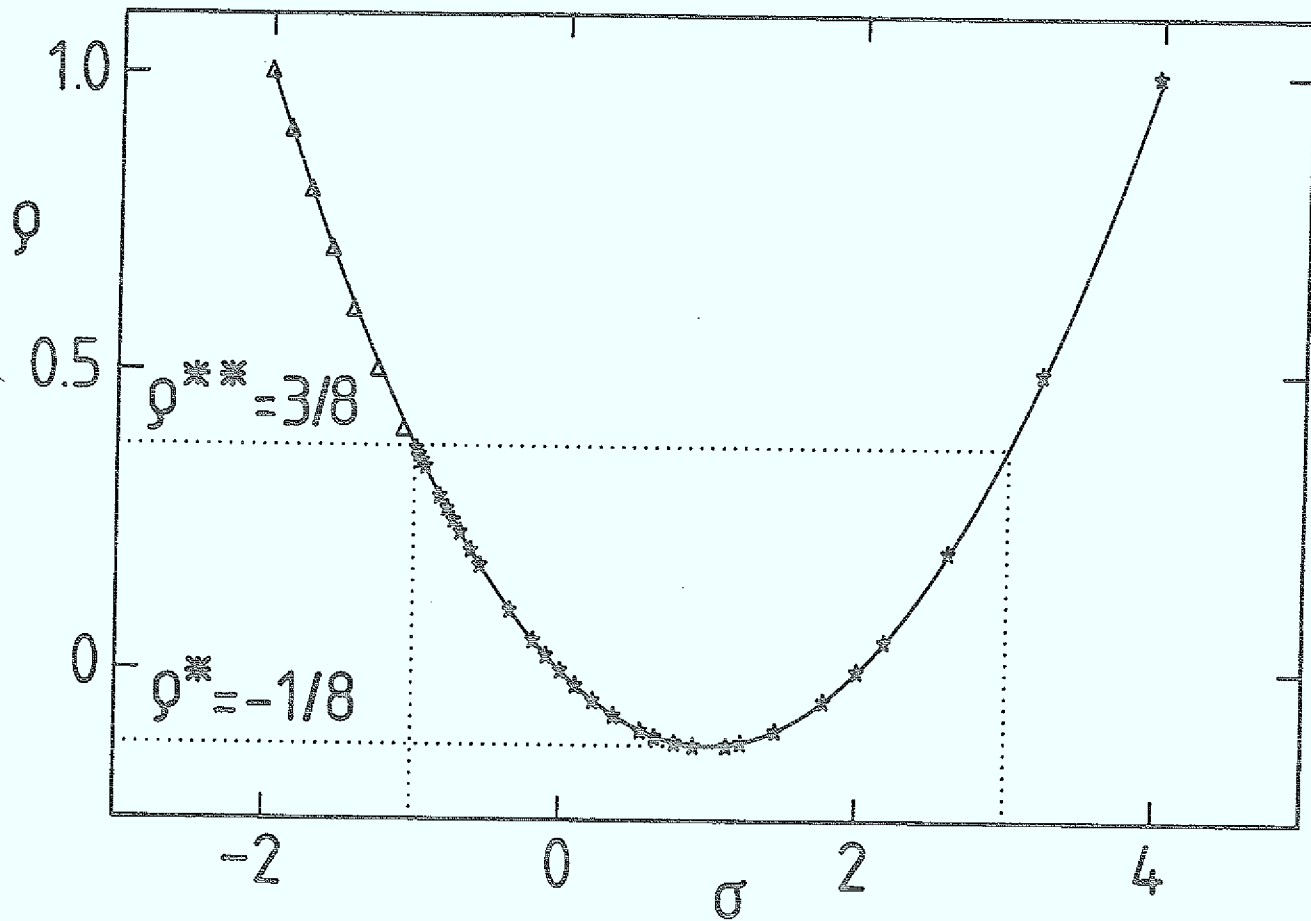


Abb. 8: Die gesamte Fixpunktstruktur der RG und die Separatrix. Die durchgezogene Linie entspricht der Funktion $\rho = \rho^* \sigma (2 - \sigma)$ mit $\rho^* = -1/8$ und enthält alle Fixpunkte. Die numerisch ermittelten Fixpunkte sind mit (*) bezeichnet. Dabei parametrisiert ρ das langreichweitige Abfallen der Fixpunktpotentiale, σ gibt das Verhalten der Fixpunkte an der Wand wieder. Der rechte Parabelast besteht aus stabilen Fixpunkten, die eine ungebundene Grenzfläche beschreiben. Der marginale Fixpunkt am Parabelscheitel $(\rho^*, 1)$ gehört zu Phasenübergängen unendlicher Ordnung (Unterregime A). Das Parabelstück auf der linken Seite hört am Punkt $(\rho^{**}, -1)$ mit $\rho^{**} = 3/8$ auf. Die Fixpunkte dieses Astes sind instabil und beschreiben die Übergänge 2. Ordnung des Unterregimes B. Als analytische Fortsetzung der Parabel schließt sich für $\sigma < -1$ eine Separatrix an. Die dort numerisch bestimmten Werte von σ sind eingetragen (∇) und folgen der Parabel.

Einer der Parabeläste besteht aus stabilen Fixpunkten und beschreibt ungebundene Grenzflächen. Alle Potentiale, die durch Iteration der RG auf solche Fixpunkte abgebildet werden, schaffen es wegen der starken Fluktuationen nicht, die Grenzfläche an die Wand zu binden. Dieser Parabelast verläuft von $\rho = -1/8$ bis zu beliebig großen ρ .

Der zweite Parabelast besteht aus instabilen Fixpunkten. Potentiale, die genau am kritischen Punkt eines Übergangs zweiter Ordnung sind, werden auf solche Fixpunkte abgebildet. Je nachdem welcher Fixpunkt erreicht wird, kann der Exponent $\nu_{||}$ zwischen 1 und ∞ variieren. Diese Benetzungsübergänge werden als Unterregime B bezeichnet.

Die instabilen Fixpunkte beginnen am Parabelscheitel $(1, \rho^*)$ und enden plötzlich bei dem Punkt $(-1, \rho^{**})$. Nähert man sich dem Parabelscheitel so divergiert der Exponent $\nu_{||}$ und man findet für $\rho = \rho^*$ Übergänge unendlicher Ordnung (Unterregime A).

An dem Punkt $(-1, \rho^{**})$ bricht die Fixpunktlinie ab und es beginnt ein Unterregime C. Man sieht im RG Fluß weiterhin eine Separatrix die die Phasenübergänge anzeigt, die kritischen Potentiale werden jedoch nicht mehr auf Fixpunkte abgebildet. Dieses Fehlen von Fixpunkten deutet an, daß in diesem Unterregime das einfache Skalenverhalten mit einer Längenskala, das auf die Fixpunkte führt, verlorengeht.

Betrachten wir nun, was an dem Endpunkt der Fixpunktlinie passiert (Abb. 9). Dies läßt sich analytisch untersuchen indem man den Fixpunkt $U_\sigma^*(z, z')$ an der Wand entwickelt. Es gilt $U_\sigma^*(z, z') = \bar{U}_\sigma(z \cdot z')$. Betrachtet man die Gewichtsfunktion $\bar{P}_\sigma(z \cdot z') = e^{-\bar{U}_\sigma(z \cdot z')}$ und schreibt sie als $\bar{P}_\sigma(z^2) = z^\sigma f(z^2)$, so läßt sich $f(x)$ in beliebiger Ordnung entwickeln (Anhang A). Setzt man nun $\sigma = -1 + \epsilon$ und betrachtet den Grenzfall kleiner ϵ , so führt dies auf

$$\bar{P}_{-1+\epsilon}(z^2) = z^{-1+\epsilon} (\epsilon \sqrt{2\pi} (1 - z^2) + \sqrt{\frac{\pi}{2}} (1 + K_1 \epsilon) z^4 - \sqrt{\frac{\pi}{2}} (1 + K_2 \epsilon) z^6 \dots) \quad (2.42)$$

mit zwei Konstanten K_1 und K_2 . Die nicht singulären Terme summieren sich genau auf zu $\bar{P}_3$, so daß man dies auch darstellen kann als

$$\bar{P}_{-1+\epsilon}(z^2) \approx \sqrt{2\pi\epsilon} z^{-1+\epsilon} + \bar{P}_3(z^2). \quad (2.43)$$

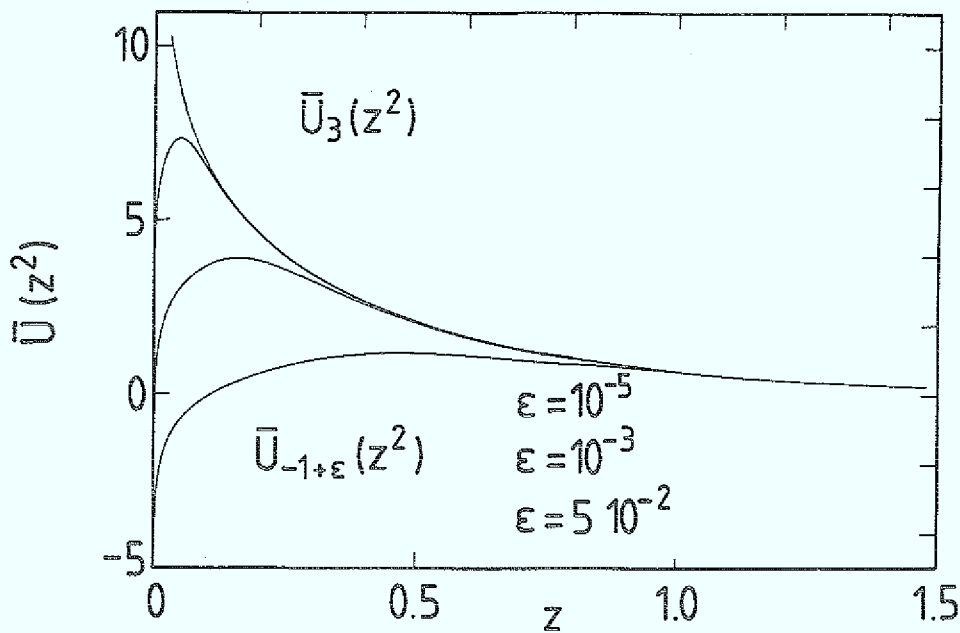


Abb. 9: Der stabile Fixpunkt $\bar{U}_3(z^2)$ ist gemeinsam mit drei Fixpunkten $\bar{U}_{-1+\epsilon}(z^2)$ am Ende der Fixpunktlinie abgebildet. Für kleine ϵ schmiegen sich die Funktionen $\bar{U}_{-1+\epsilon}(z^2)$ an $\bar{U}_3(z^2)$ an.

Für $\epsilon \rightarrow 0$ entsteht an der Wand eine deltafunktionsartige Singularität, zusätzlich bleibt für größere Werte von z genau der stabile Fixpunkt $\bar{P}_3$ des gegenüberliegenden Parabelastes stehen. Die Funktion $\bar{P}_{-1+\epsilon}(z^2)$ hat ein Minimum bei $z = z_0$. Für kleine ϵ verhält sich z_0 wie

$$z_0 \sim \epsilon^{1/4}. \quad (2.44)$$

Das Unterregime C

Nun betrachten wir das Unterregime C (Abb. 10), das sich für $\rho < \rho^{**}$ an Unterregime B anschließt. Hier gibt es zwar keine Fixpunkte mehr, die Phasenübergänge sind im RG-Fluß aber sichtbar.

Der RG-Fluß zeigt den Entbindungsübergang immer noch durch eine Separatrix an, diese Separatrix wird jedoch nicht mehr auf einen Fixpunkt abgebildet.

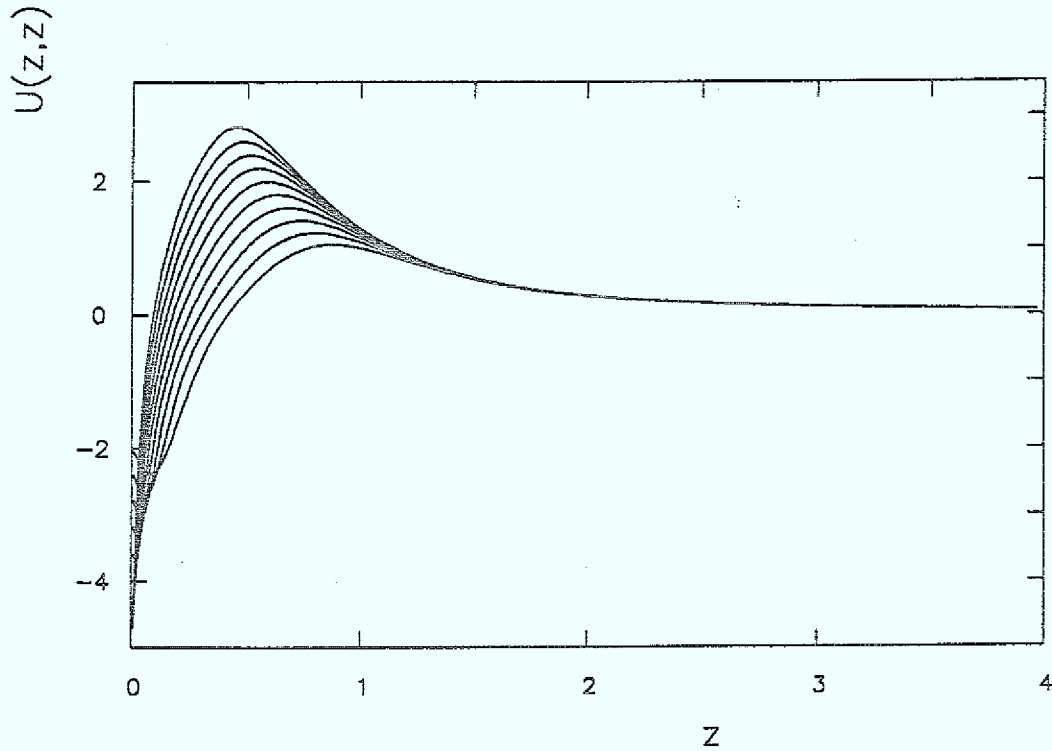


Abb. 10: Einige Iterationen der RG am kritischen Punkt im Unterregime C. Dargestellt sind die Diagonalelemente $U^{(N)}(z, z)$ des Potentials. Der RG-Fluß konvergiert nicht gegen einen Fixpunkt.

Betrachtet man die Gewichtsfunktion $P(z, z') = \exp \{-U(z, z')\}$, so sieht man in numerischen Rechnungen, daß der RG-Fluß an der Wand eine $P(z, z) \sim z^\sigma$ Singularität mit $\sigma < -1$ aufzubauen versucht. $\sigma = \sigma(\rho)$ erfüllt dabei immer noch die parabolische Beziehung (2.40). Im Gegensatz zu Unterregime B kann in Regime C wegen der Nichtintegrabilität von z^σ kein Fixpunkt erreicht werden.

σ beschreibt das asymptotische Verhalten der Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_*(z)$ von z am Phasenübergang. Für große z gilt nach (2.29) $P_*(z) \sim z^{1-2\mu}$ mit $\sigma = 1 - 2\mu$. $P(z, z)$ ist die wiederholt reskalierte Wahrscheinlichkeitsverteilung, bei der dieses Verhalten an die Wand gedrückt ist, und daher bei kleinen z erscheint.

Zunächst untersuchen wir die Divergenz der parallelen Korrelationslänge $\xi_{||}$ in Unterregime C. Es zeigt sich hier, daß man eine dem Skalenindex am Fixpunkt entsprechende Größe y definieren und numerisch bestimmen kann. Dieses y führt

genau auf den analytisch bekannten Exponenten $\nu_{||} = 1$ [5], der auf Übergänge 1. Ordnung hinweist.

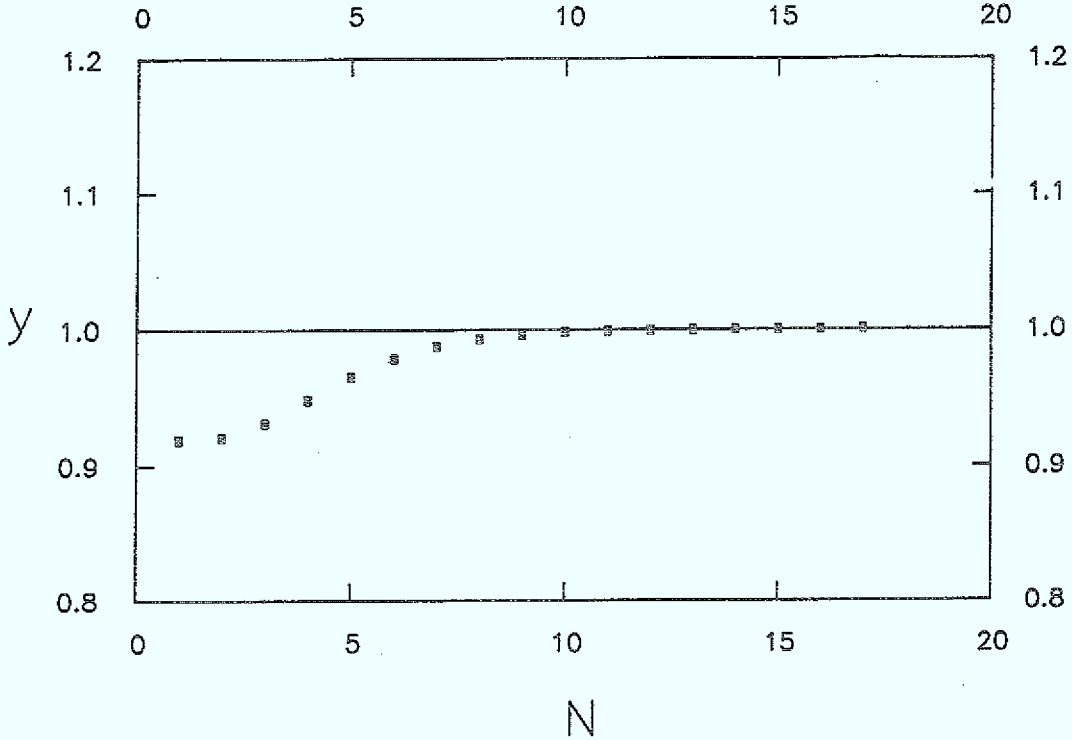


Abb. 11: Numerisch ermittelte Folge der Skalenindizes y_N im Unterregime C. Sie konvergiert gegen den Wert $y = 1$. Dies ermöglicht die Definition eines Skalenindexes auch im Unterregime C.

Betrachtet man nämlich den kritischen RG-Fluß $\tilde{U}_{N+1} = R[\tilde{U}_N]$ und setzt $U_N = \tilde{U}_N + v$ mit einer kleinen Störung v , so kann man linearisieren:

$$R[U_N] \approx R[\tilde{U}_N] + \mathcal{L}_N v = \tilde{U}_{N+1} + \mathcal{L}_N v \quad (2.45)$$

y_N sei der größte Skalenindex von $\mathcal{L}_N$. Man kann jetzt definieren

$$y = \lim_{N \rightarrow \infty} y_N. \quad (2.46)$$

Numerische Rechnungen (Abb. 11) zeigen, daß $y = 1.00 \pm 0.01$ unabhängig von ρ und σ ist. Der Wert $\nu_{||} = 1/y = 1$ deutet darauf hin, daß es sich um einen Übergang 1. Ordnung handelt.

Für ein besseres Verständnis des RG-Flusses im Unterregime C gehen wir über zu einer neuen Betrachtungsweise der RG. Es bietet sich an, die Renormierungsschritte als Vergrößerung des Systems aufzufassen ("finite-size" Verhalten): Der Übergang von T^n zu T^{2n} verdoppelt bei jedem Schritt die Systemgröße. In einem endlichen System gibt es keinen gebundenen Zustand der Grenzfläche [16]. Mit einer endlichen Wahrscheinlichkeit würde sie in den ungebundenen Zustand tunneln. Als Folge davon behält die Gewichtsfunktion $P(z, z)$ für große z immer einen konstanten Wert.

Betrachten wir nun das Minimum $z_0^{(N)}$ von $P^{(N)}(z, z)$ nach N Iterationen (Abb. 12). Es teilt die Gewichtsfunktion in ein Wandgebiet, daß physikalische Informationen über die Wahrscheinlichkeitsverteilung im thermodynamischen Limes enthält, und einen asymptotisch konstanten Teil für große z ein. Der asymptotische Teil konvergiert gegen einen stabilen Fixpunkt $\exp\{-U_0^*\}$ und beschreibt den weggetunnelten Zustand. $z_0^{(N)}$ definiert eine Längenskala

$$L_{\perp} \sim z_0^{(N)} b^{N\zeta} \quad (2.47)$$

in dem endlichen System. $z_0^{(N)}$ wird von dem Fluß für große N gegen die Wand gedrückt wie:

$$z_0^{(N)} \sim b^{-\delta N} . \quad (2.48)$$

Dies definiert den Exponenten δ . Da die Systemgröße $L_{\parallel}$ wächst wie

$$L_{\parallel} \sim b^N \quad (2.49)$$

spielt der Exponent $\tilde{\zeta} = \zeta - \delta$ die Rolle des Rauigkeitsexponenten am Benetzungsübergang im Regime C.

Numerische Iterationen der RG führen zu der Annahme, daß die Gewichtsfunktion P_{σ} sich für große N verhält wie

$$P_{\sigma}^{(N)}(z, z) \approx a_N z^{\sigma} + P_{2-\sigma}^{*}(z, z) \quad (2.50)$$

Dies gilt für $z > z_{\epsilon}$. z_{ϵ} ist ein Cutoff, der als Folge der Reskalierung von z , wie $z_{\epsilon} \sim b^{-\frac{N}{2}}$ gegen die Wand gedrückt wird (Abb. 12). Die Funktion $P_{\sigma}^{(N)}(z, z)$ hat ein Minimum bei $z_0^{(N)} \sim a_N^{1/(2-2\sigma)}$. Mit der Annahme, daß $a_N \sim b^{N(\sigma+1)/2}$,

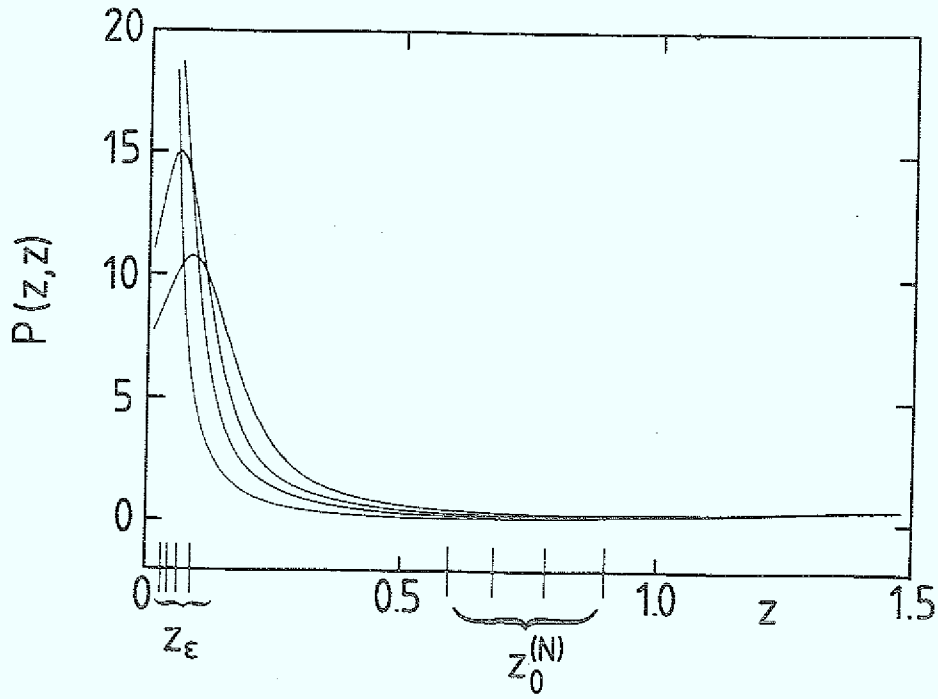


Abb. 12: Einige Iterationen N der Gewichtsfunktion $P^{(N)}(z, z)$ im Unterregime C. Der Cutoff $z_\epsilon \sim b^{-N/2}$ wird durch Reskalieren gegen die Wand gedrückt, das Minimum bei $z_0^{(N)}$ verhält sich wie $z_0^{(N)} \sim b^{-\delta N}$.

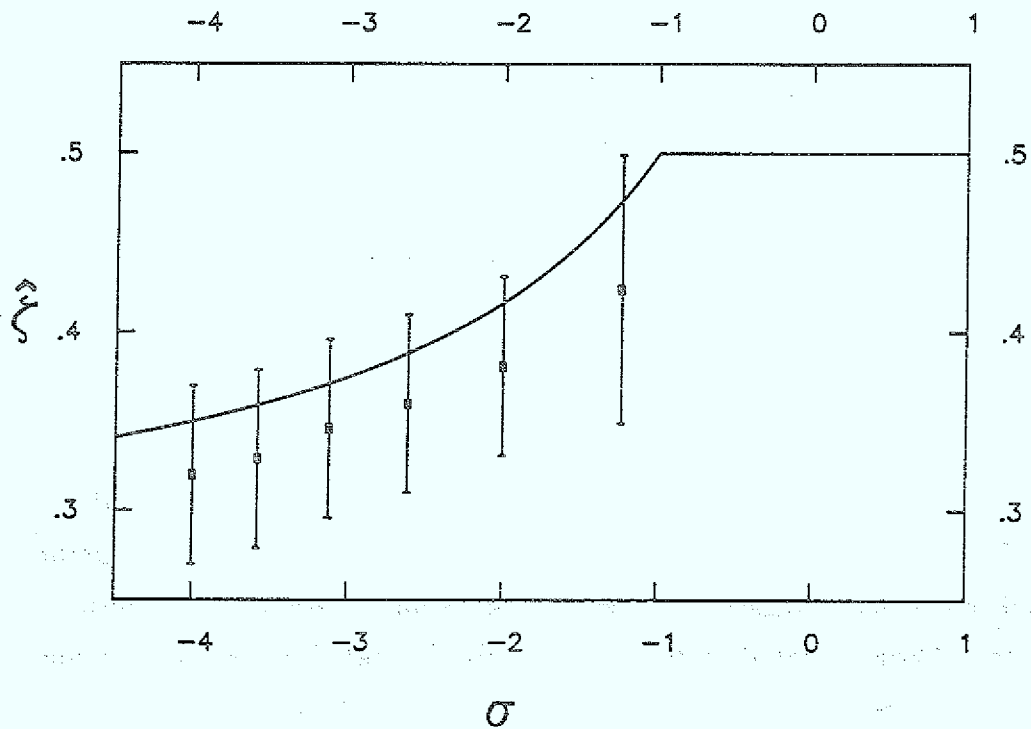


Abb. 13: Vergleich der numerisch ermittelten Werte für $\hat{\zeta}$ (Punkte mit Fehlerbalken) mit $\hat{\zeta} = 1/2 - (\sigma + 1)/4(\sigma - 1)$ (durchgezogene Linie).

was bedeutet, daß der kritische Fluß eine distributionsartige Singularität aufbaut, folgt für δ

$$\delta = 1/4 \frac{\sigma + 1}{\sigma - 1} . \quad (2.51)$$

Dieses Ergebnis paßt innerhalb der Fehler zu den numerischen ermittelten Werten von δ (Abb. 13).

Migdal-Kadanoff-Renormierung

Wir haben bisher gezeigt, wie die hier betrachtete exakte RG das SFR und IFR der Benetzungsübergänge in $1 + 1$ Dimension beschreibt. Es ist nun möglich das Verfahren mit Hilfe einer Migdal-Kadanoff Renormierung (MKR) [17] auf beliebige Dimensionen d zu verallgemeinern. Bei diesem Verfahren werden Bindungen zwischen benachbarten Punkten verschoben, was in der TM auf einen Vorfaktor 2^{d-2} führt. Um den trivialen Fixpunkt $T^* = \exp\{-\frac{1}{2}(z - z')^2\}$ wieder zu erhalten muß man mit dem Rauigkeitsexponenten $\zeta = (3 - d)/2$ reskalieren.

Auf diese Weise erhält man eine verallgemeinerte RG-Iteration

$$U^{(N+1)}(z, z'') = -\ln \left\{ 2^{1/2-\zeta} \int_0^\infty \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} \exp \left\{ - \left(2^{1/2-\zeta} z' - \frac{z + z''}{\sqrt{2}} \right)^2 - G(z'|z, z'') \right\} \right\}$$

$$G(z'|z, z'') = 2^{1-2\zeta} (U^{(N)}(z', 2^\zeta z) + U^{(N)}(z', 2^\zeta z'')) \quad (2.52)$$

Der Fall $\zeta = \frac{1}{2}$ liefert die schon bekannte exakte RG. In ähnlicher Weise wie dort kommt man auf das lang- und kurzreichweitige Verhalten möglicher Fixpunkte:

$$U^*(z, z) \approx \frac{\rho}{z^\tau} \quad ; \quad \tau = 2 \frac{d-1}{3-d} \quad \text{für große } z \quad (2.53)$$

$$U^*(z, z') \approx \sigma(z^\beta + z'^\beta) \quad ; \quad \beta = 2 \frac{2-d}{3-d} \quad \text{für kleine } z \quad (2.54)$$

Diese Fixpunkte sind im allgemeinen nicht mehr Funktionen nur des Produkts $z \cdot z'$. Der exakte Fall $d = 2$ (d.h. $\beta = 0$) erscheint hier mit dieser einfachen Symmetrie und seiner logarithmischen Divergenz an der Wand als Sonderfall. Die Gewichtsfunktion P hat dort für kleine z eine Potenz-Singularität, die auf die Existenz des speziellen Unterregimes C führt. Für $d \neq 2$ hat P ein exponentielles Verhalten an der Wand, was zu der Vermutung führt, daß Unterregime C nur in dem speziellen Fall $d = 2$ auftritt.

Unklar bleibt jedoch, ob das Verschwinden dieses Unterregimes eine Folge der Approximationen der MKR ist, oder ob jedes Renormierungsverfahren zu diesem Ergebnis führt. Da Migdal-Kadanoff Verfahren normalerweise bei einer Entwicklung um die 'exakte' Dimension ($2+\epsilon$ -Entwicklung) in erster Ordnung in ϵ richtige Resultate liefern, könnte das Verschwinden des Unterregimes C allgemeine Gültigkeit haben.

3. Transfermatrixmethoden

3.1. DIE TRANSFERMATRIX

Transfermatrixmethoden eignen sich in besonderem Maße für die Untersuchung eindimensionaler statistischer Systeme, da hier das Ausintegrieren der Zustandssumme als eine wiederholte Matrixmultiplikation entlang einer Linie dargestellt werden kann.

Die hier betrachteten effektiven Grenzflächenmodelle in Dimension $d = 2$ haben ebenfalls diese Eigenschaft, da sie Fluktuationen entlang der 1-dimensionalen Grenzfläche beschreiben.

Die Hamiltonfunktionen dieser Modelle seien hier nochmals erwähnt. Wir betrachten das Gaußsche Modell

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{J}{2} (\ell_i - \ell_{i+1})^2 + V(\ell_i) \quad (3.1)$$

und das SOS-Modell

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N J |\ell_i - \ell_{i+1}| + V(\ell_i) . \quad (3.2)$$

Die interessante Größe, die alle wichtigen Informationen über das jeweilige System enthält, ist die Zustandssumme

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} d\ell_1 \dots d\ell_N e^{-\mathcal{H}\{\ell_i\}/T} , \quad (3.3)$$

wobei die Temperatur T in Einheiten der Boltzmannkonstante k_B gemessen wird. Bei diesen Modellen mit endlicher "Teilchenzahl" N muß noch eine Randbedingung gewählt werden. Wir werden im Folgenden immer mit periodischen Randbedingungen, d.h.

$$\ell_1 = \ell_{N+1} \quad (3.4)$$

arbeiten.

Die bei der Berechnung von Z auftretenden wiederholten Integrationen können mit Hilfe der Transfermatritzen

$$T(\ell, \ell') = \exp \left\{ -\frac{J}{2T}(\ell - \ell')^2 - \frac{1}{2T}(V(\ell) + V(\ell')) \right\} \quad (3.5)$$

für das Gaußsche Modell und

$$T(\ell, \ell') = \exp \left\{ -\frac{J}{T}|\ell - \ell'| - \frac{1}{2T}(V(\ell) + V(\ell')) \right\}, \quad (3.6)$$

für das SOS-Modell, elegant geschrieben werden als

$$Z = Sp\{T^N\}. \quad (3.7)$$

T^N bezeichnet dabei die N -fache Matrixmultiplikation von T . Eigenfunktionen $\phi_q(\ell)$ und Eigenwerte λ_q von T werden definiert durch

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\ell' T(\ell', \ell) \phi_q(\ell') = \lambda_q \phi_q(\ell), \quad (3.8)$$

oder

$$T|\phi_q\rangle = \lambda_q|\phi_q\rangle. \quad (3.9)$$

Für Z gilt damit einfach

$$Z = \sum_q \lambda_q^N. \quad (3.10)$$

Wir wollen nun die freie Energie f sowie die Korrelationslänge $\xi_{||}$ im Thermodynamischen Limes großer N durch Eigenwerte von T ausdrücken [11].

Der größte Eigenwert λ_0 dominiert für große N das Systemverhalten, die freie Energie pro Längensegment im thermodynamischen Limes,

$$f = -\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{T}{N} \ln Z = -T \ln \lambda_0, \quad (3.11)$$

hängt allein von λ_0 ab.

Die Korrelationsfunktion $C(r)$ wird definiert als

$$\begin{aligned} C(r) &= \langle \ell_i \ell_{i+r} \rangle - \langle \ell_i \rangle^2 \\ &= \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} d\ell_1 \dots d\ell_N \ell_i \ell_{i+r} e^{-\mathcal{H}/T} \\ &\quad - \left(\frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} d\ell_1 \dots d\ell_N \ell_i e^{-\mathcal{H}/T} \right)^2; \end{aligned} \quad (3.12)$$

die $\langle \dots \rangle$ bezeichnen dabei Erwartungswerte. Ausgedrückt durch Transfermatritzen gilt für große N :

$$C(r) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{Sp\{\hat{\ell} T^r \hat{\ell} T^{N-r}\}}{Sp\{T^N\}} - \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{Sp\{\hat{\ell} T^N\}}{Sp\{T^N\}} \right)^2. \quad (3.13)$$

Hierbei ist $\hat{\ell}$ der Ortsoperator mit der Wirkung $\hat{\ell}\phi(\ell) = \ell\phi(\ell)$. Setzt man für T nun die Entwicklung nach Eigenfunktionen ein, d.h.

$$T = \sum_q \lambda_q |\phi_q\rangle \langle \phi_q| \quad (3.14)$$

so folgt für $N \rightarrow \infty$

$$C(r) = \sum_{n=0}^{\infty} |\langle \phi_0 | \ell | \phi_n \rangle|^2 \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_0} \right)^r. \quad (3.15)$$

Für große r dominiert der Term $(\lambda_1/\lambda_0)^r$. Dieser beschreibt das asymptotische Verhalten von $C(r)$ für große r

$$C(r) \sim \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^r = e^{-r/\xi_{||}} \quad (3.16)$$

mit der Korrelationslänge entlang der Grenzfläche $\xi_{||} = 1/\ln \frac{\lambda_0}{\lambda_1}$.

Betrachten wir jetzt die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(\ell)$ der Grenzfläche. Wegen

$$\langle \ell \rangle = \int \ell P(\ell) d\ell = \frac{Sp\{\ell T^N\}}{Sp\{T^N\}} \quad (3.17)$$

folgt

$$P(\ell) = \frac{1}{Z} T^N(\ell, \ell) = \frac{1}{Z} \sum_q \lambda_q^N \phi_q^2(\ell). \quad (3.18)$$

Im thermodynamischen Limes großer N führt dies auf

$$P(\ell) = |\langle \phi_0 | \ell \rangle|^2 = \phi_0^2(\ell). \quad (3.19)$$

Das Verhalten der freien Energie f im unendlichen System resultiert allein aus dem größten Eigenwert λ_0 der TM. Aus der zu λ_0 gehörenden Eigenfunktion $\phi_0(\ell)$ läßt sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(\ell)$ der Grenzfläche bestimmen. Berechnet man Korrelationsfunktionen höherer Ordnung, kommen nachfolgende Eigenwerte mit ins Spiel.

3.2. DER RAUHIGKEITSEXONENT

Im Falle der *freien* Grenzflächen (d.h. $V(\ell) = 0$) des Gaußschen Modells lassen sich alle auftretenden Integrationen analytisch lösen. Aus Symmetriegründen ($\mathcal{H}\{\ell_i\} = \mathcal{H}\{-\ell_i\}$) folgt sofort daß

$$\langle \ell \rangle = 0 \quad (3.20)$$

ist. Dagegen sind im unendlichen System $\langle \ell^2 \rangle$ und die Korrelationslänge $\xi_{||}$ divergent. Berechnet man

$$\Delta C(r) = \langle (\ell_i - \ell_{i+r})^2 \rangle, \quad (3.21)$$

so findet man

$$\Delta C(r) \sim r^{2\zeta} \quad \text{mit} \quad \zeta = \frac{1}{2}. \quad (3.22)$$

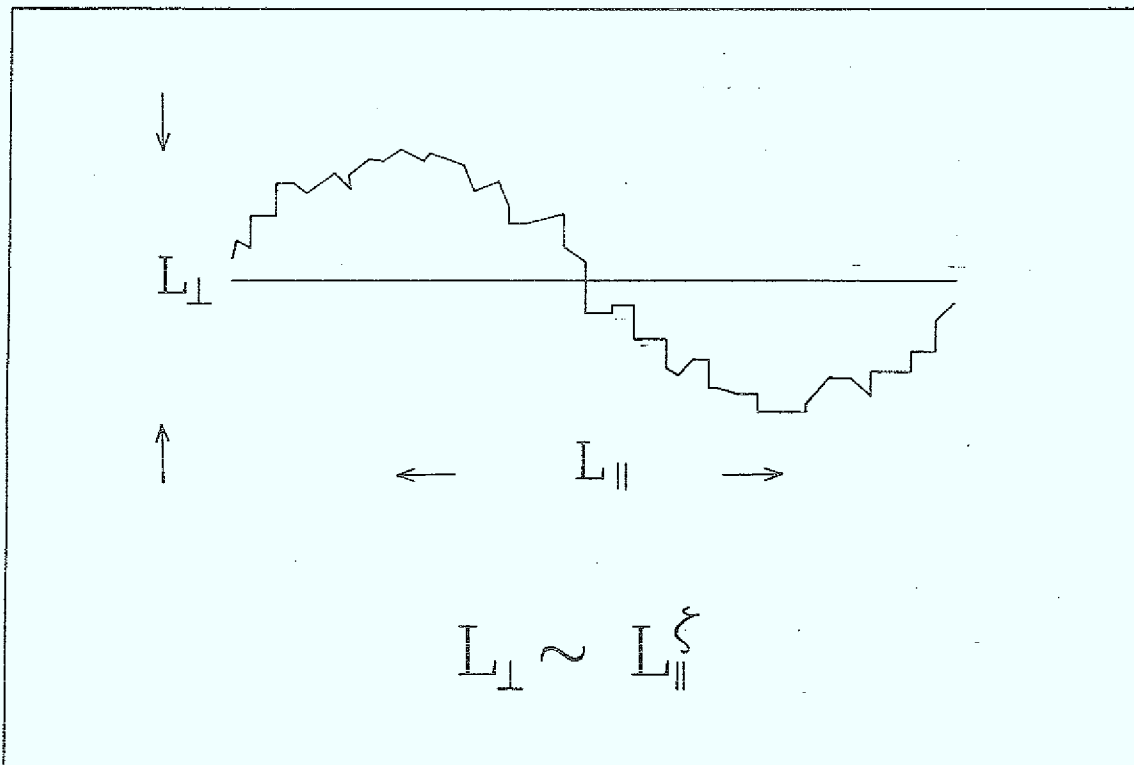


Abb. 14: Eine Fluktuation der Wellenlänge $L_{||}$ hat eine typische Amplitude $L_{\perp} \sim L_{||}^{\zeta}$. Dieses Skalenverhalten definiert den Rauigkeitsexponenten ζ

Der so definierte Exponent ζ heißt Rauigkeitsexponent [4]. Er beschreibt die Skaleninvarianz der fluktuierenden Grenzfläche. Greift man nämlich Fluktuationen mit einer bestimmten Wellenlänge $L_{||}$ heraus (Abb. 14), und bestimmt deren typischen Amplitude $L_{\perp}$, so gilt wegen (3.22)

$$L_{\perp} \sim L_{||}^{\zeta}$$

Der Rauigkeitsexponent ist die wesentliche Größe zur Charakterisierung der freien Grenzfläche. Er ist abhängig von der Raumdimension d . Wie in Kapitel 4.4.1 gezeigt wird, gilt

$$\zeta = \frac{3-d}{2} \quad (3.23)$$

Da ζ die Skaleninvarianz der Grenzfläche beschreibt, müssen in dem in Kapitel 4 vorgestellten Renormierungsverfahren senkrechte Längenskalen mit dem Faktor b^{ζ} reskaliert werden, wenn Längen parallel zu der Grenzfläche mit dem Faktor b multipliziert wurden. Nur dann kann das Verfahren auf Fixpunkte führen.

3.3. DAS EIGENWERTPROBLEM DES SOS-MODELLS

3.3.1. ÜBERGANG ZU EINER DIFFERENTIALGLEICHUNG

Wir studieren nun das Eigenwertproblem

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\ell' T(\ell, \ell') \phi_q(\ell') = \lambda_q \phi_q(\ell) \quad (3.24)$$

mit der TM

$$T(\ell, \ell') = \exp\{-K|\ell - \ell'| - \frac{1}{2}(U(\ell) + U(\ell'))\} \quad (3.25)$$

wobei $K \equiv \frac{J}{T}$ und $U(\ell) \equiv \frac{V(\ell)}{T}$ gesetzt wurde. Betrachtet man die Funktion

$$\psi(\ell) = e^{\frac{U(\ell)}{2}} \phi(\ell) \quad (3.26)$$

so gilt für diese die Gleichung

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\ell' e^{-K|\ell - \ell'| - U(\ell')} \psi(\ell') = \lambda_q \psi(\ell) . \quad (3.27)$$

Wie man durch Fouriertransformation und Anwendung des Residuensatzes leicht zeigen kann, ist

$$\left(-\frac{d^2}{d\ell^2} + K^2\right) e^{-K|\ell-\ell'|} = 2K\delta(\ell-\ell'). \quad (3.28)$$

Anwendung des Differentialoperators (3.28) auf (3.27) führt direkt auf die Differentialgleichung (DGL) [10]

$$\left[-\frac{d^2}{d\ell^2} - \frac{2K}{\lambda} e^{-U(\ell)} + K^2\right] \psi(\ell) = 0. \quad (3.29)$$

Da wir ein Potential mit einer Wand betrachten, d.h. $U(\ell) = \infty$ für $\ell < 0$, wird die Integration (3.28) nur von 0 bis ∞ geführt und es muß noch eine Randbedingung bei $\ell = 0$ berücksichtigt werden. Es gilt

$$\lambda\psi(0) = \int_0^\infty d\ell' e^{-K\ell'-U(\ell')} \psi(\ell') \quad (3.30)$$

$$\lambda\psi'(0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ K \int_\epsilon^\infty d\ell' e^{-K(\ell'-\epsilon)-U(\ell')} \psi(\ell') \right\}, \quad (3.31)$$

woraus als Randbedingung folgt

$$\frac{\psi'(0)}{\psi(0)} = K. \quad (3.32)$$

Für große ℓ muß sich $\psi(\ell)$ so verhalten, daß das Integral (3.28) existiert. Dies ist eine weitere Randbedingung an $\psi(\ell)$ bei $\ell \rightarrow \infty$.

Die DGL (3.29) hat gewisse Ähnlichkeit mit einer Schrödingergleichung mit einem Potential $e^{-U(\ell)}$. Betrachtet man die freie Grenzfläche $U(\ell) = 0$, so erhält man

$$-\psi'' = a^2\psi \quad \text{mit} \quad a^2 = \frac{2K}{\lambda} - K^2, \quad (3.33)$$

also die Schrödingergleichung des freien Teilchens. a^2 hat die Bedeutung der Teilchenenergie. Der kleinste Energiewert ist $a^2 = 0$. Daher ist in diesem Fall $\lambda = \frac{2}{K}$ größter Eigenwert. Alle kleineren Eigenwerte $\lambda < \frac{2}{K}$ gehören zu Streulösungen.

Betrachtet man jedoch (3.29) mit einem anziehenden Potential $U(\ell)$, das aber für große ℓ auf Null abfällt ($U(\ell) \rightarrow 0$ für $\ell \rightarrow \infty$), so können zusätzlich gebundene Zustände auftreten. Für diese gilt $a^2 < 0$ und somit $\lambda > \frac{2}{K}$. Sobald gebundene Zustände existieren, ist der Eigenzustand $\psi_0(\ell)$, der die Verteilung der Grenzfläche

beschreibt, gebunden. Ändert sich das Potential z.B. aufgrund einer Veränderung der Temperatur T , kann bei einem kritischen Wert T_u der gebundene Zustand verloren gehen. Übrig bleiben die Streulösungen, deren maximaler Eigenwert λ_0 immer $\lambda_0 = \frac{2}{K}$ ist. Die Grenzfläche ist dann ungebunden.

3.3.2. DAS REGIME INTERMEDIÄRER FLUKTUATIONEN (IFR)

3.3.2.1. LÖSUNG DER DIFFERENTIALGLEICHUNG

Um das kritische Verhalten für ein bestimmtes Potential zu untersuchen, wählen wir eine geeignete Funktion $U(\ell)$. Im IFR muß dieses Potential asymptotisch wie $\sim \frac{1}{\ell^2}$ auf Null abfallen. Geeignet für diese Zwecke ist

$$U(\ell) = \begin{cases} -u & \text{für } 0 < \ell < R \\ -\ln(1 + \frac{W}{\ell^2}) & \text{für } \ell > R, \end{cases} \quad (3.34)$$

was auf die DGL

$$\psi''(\ell) + (\frac{2K}{\lambda} e^u - K^2) \psi(\ell) = 0 \quad \text{für } 0 < \ell < R \quad (3.35)$$

$$\psi''(\ell) - (K^2 - \frac{2K}{\lambda}) \psi(\ell) + \frac{2KW}{\lambda \ell^2} \psi(\ell) = 0 \quad \text{für } \ell > R \quad (3.36)$$

führt. (3.35) ist dabei trivial zu lösen, (3.36) ist die Besselsche Differentialgleichung, deren Lösungen als Besselfunktionen wohlbekannt sind. Für die *gebundenen* Lösungen gilt

$$\psi(\ell) = A \cos q\ell + B \sin q\ell \quad 0 < \ell < R \quad (3.37)$$

$$\psi(\ell) = C \sqrt{\ell} K_\mu(a\ell) + D \sqrt{\ell} I_\mu(a\ell) \quad \ell > R \quad (3.38)$$

mit

$$q = (\frac{2K}{\lambda} e^u - K^2)^{1/2} \quad (3.39)$$

$$a = (K^2 - \frac{2K}{\lambda})^{1/2} \quad (3.40)$$

$$\mu = (\frac{1}{4} - \frac{2KW}{\lambda})^{1/2} \quad (3.41)$$

$I_\mu(x)$ und $K_\mu(x)$ sind modifizierte Besselfunktionen [12]. Aus der Randbedingung, daß $\psi(\ell)$ für große ℓ nicht exponentiell wachsen darf, folgt $D = 0$.

Fügt man die beiden Teile ($\ell > R$ bzw. $\ell < R$) stetig und differenzierbar aneinander und beachtet zusätzlich die Randbedingung (3.38) bei $\ell = 0$, so erhält man eine Gleichung, die gebundene Zustände beschreibt. Sie hat die Form

$$S(u, \lambda) = L_\mu(aR) \quad (3.42)$$

wobei

$$S(u, \lambda) = R \frac{Kq \cos qR - q^2 \sin qR}{K \sin qR + q \cos qR} \quad (3.43)$$

Dabei ist

$$L_\mu(x) = \frac{x K'_\mu(x)}{K_\mu(x)} \quad (3.44)$$

Die Phasengrenze findet man, indem man $\lambda = \frac{2}{K}$ setzt und nach einer Lösung $u = u^*$ von (3.42) sucht. Findet man mehrere Lösungen, so muß man darauf achten, nur den Grundzustand zu betrachten.

Am Phasenübergang mit $\lambda = 2/K$ gilt $\mu = (1/4 - w)^{1/2}$, wobei der dimensionslose Parameter $w = K^2 W$ eingeführt wurde.

Zunächst untersuchen wir den Fall $w < \frac{1}{4}$, d.h. $\mu > 0$ und reell. Wegen $L_\mu(0) = -\mu$ erhält man für die Phasengrenzen $u^* = u^*(w)$ mit $U = (e^{u^*} - 1)^{1/2}$

$$KR \frac{U \cos[KRU] - U^2 \sin[KRU]}{\sin[KRU] + U \cos[KRU]} - \frac{1}{2} = - \left(\frac{1}{4} - w \right)^{1/2} \quad (3.45)$$

Bei negativen Werten von u^* wird U imaginär. Aus den Winkelfunktionen werden dann Exponentialfunktionen.

Entlang dieser Phasengrenze $u^* = u^*(w)$ kann das kritische Verhalten, insbesondere die Divergenz der Korrelationslänge $\xi_{||} = 1/\ln \frac{\lambda_0}{\lambda_1}$ betrachtet werden, indem man um die Phasengrenze entwickelt. Setzt man als kleine Abweichung von der Phasengrenze

$$\epsilon = \lambda - \frac{2}{K} \quad \text{sowie} \quad \Delta u = u - u^* ,$$

so erhält man aus (3.42)

$$S(u^*, \frac{2}{K}) + \frac{\partial S(u, \lambda)}{\partial u} \Big|_{u=u^*} \Delta u + \frac{\partial S(u, \lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{u=u^*} \epsilon = L_\mu \left(\left(\frac{K^3}{2} \epsilon \right)^{1/2} \right) \quad (3.46)$$

Wegen $\lambda_0 = \frac{2}{K} + \epsilon$ und $\lambda_1 = \frac{2}{K}$ divergiert die Korrelationslänge bei verschwindendem ϵ wie

$$\xi_{||} \sim \frac{1}{\epsilon} . \quad (3.47)$$

Bestimmt werden soll jetzt ϵ als Funktion von $\Delta u = u^* - u$. Hierzu benötigen wir das Verhalten von $L_\mu(x)$ für kleine x . Mit [12]

$$K'_\mu(x) = -K_{\mu-1}(x) - \frac{\mu}{x} K_\mu(x) \quad (3.48)$$

folgt

$$L_\mu(x) = -x \frac{K_{\mu-1}(x)}{K_\mu(x)} - \mu . \quad (3.49)$$

Die modifizierten Besselfunktionen $K_\mu(x)$ verhalten sich für kleine x wie

$$K_\mu(x) \approx \frac{1}{2} \Gamma(\mu) \left(\frac{x}{2}\right)^{-\mu} ; \quad \mu > 0 \quad (3.50)$$

$$K_0(x) \sim -\ln x . \quad (3.51)$$

Mit Hilfe von $K_\mu(x) = K_{-\mu}(x)$ führt dies auf [5]

$$\begin{aligned} L_\mu(x) &\approx 1/\ln(e^\gamma \frac{x}{2}) & \mu = 0 \\ &\approx -\mu - 2 \frac{\Gamma(1-\mu)}{\Gamma(\mu)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2\mu} & 0 < \mu < 1 \\ &\approx -1 + x^2 \ln(e^\gamma \frac{x}{2}) & \mu = 1 \\ &\approx -\mu + x^2/2(1-\mu) & \mu > 1 \end{aligned} \quad (3.52)$$

Dabei bezeichnet γ die Eulersche Zahl.

Aus (3.49) und (3.51) kann man das Verhalten von ϵ für $\Delta u \rightarrow 0$ entnehmen. Es gilt

$$\begin{aligned} |\epsilon| &\sim \exp\left(\frac{c}{\Delta u}\right) & \mu = 0 \\ &\sim \Delta u^{1/\mu} & 0 < \mu < 1 \\ &\sim \Delta u / |\ln \Delta u| & \mu = 1 \\ &\sim \Delta u & \mu > 1 \end{aligned} \quad (3.53)$$

Dabei ist immer $\mu = (\frac{1}{4} - w)^{1/2}$.

Nun wollen wir den Fall $w > \frac{1}{4}$ betrachten. Hier gilt $\mu = i\kappa = i(w - \frac{1}{4})^{1/2}$ rein imaginär. Es müssen also Besselfunktionen mit imaginärem Index μ untersucht werden.

Dieses Problem läßt sich mit einem Verfahren behandeln, daß von H. van Haeringen [18] beschrieben wurde. Die Bedingung für gebundene Zustände (3.42) $S = L_\mu(aR)$ wird umgeschrieben, die Besselfunktionen $K_\mu(x)$ werden durch verallgemeinerte hypergeometrische Funktionen ${}_0F_1$ ausgedrückt. Mit $x = aR$ kann man (3.45) schreiben als

$$(S + \mu) = x \frac{K_{\mu-1}(x)}{K_\mu(x)}. \quad (3.54)$$

Mit

$$K_\mu(x) = \frac{\pi}{2 \sin \pi \mu} [I_{-\mu}(x) - I_\mu(x)] \quad (3.55)$$

werden die K_μ durch die anderen modifizierten Besselfunktionen $I_\mu(x)$ dargestellt. Aus (3.54) erhält man so mit (3.55) und

$$I_{1-\mu}(x) = I_{-1-\mu}(x) + \frac{2\mu}{x} I_{-\mu}(x) \quad (3.56)$$

die Beziehung

$$I_{1-\mu}(x)(S - \mu) - I_\mu(x)(S + \mu) = x[I_{-1-\mu}(x) - I_{-1+\mu}(x)] \quad (3.57)$$

Um die imaginären $\mu = i\kappa$ behandeln zu können, verwendet man eine Darstellung der Besselfunktionen $I_\mu(x)$ durch verallgemeinerte hypergeometrische Funktionen ${}_0F_1$ [12]:

$$I_\mu(x) = \frac{(x/2)^\mu}{\Gamma(\mu + 1)} {}_0F_1(\mu + 1, \frac{x^2}{4}). \quad (3.58)$$

Aus der Ausgangsgleichung (3.45) erhält man auf diese Weise

$$\left(\frac{x}{2}\right)^{2i\kappa} = \frac{({}_0F_1(1 - i\kappa, \frac{x^2}{4})(S - i\kappa) + i\kappa {}_0F_1(-i\kappa, \frac{x^2}{4}))\Gamma(1 + i\kappa)}{({}_0F_1(1 + i\kappa, \frac{x^2}{4})(S + i\kappa) - i\kappa {}_0F_1(i\kappa, \frac{x^2}{4}))\Gamma(1 - i\kappa)} \quad (3.59)$$

Da hier in Zähler und Nenner jeweils eine komplexe Zahl z und ihr komplex konjugiertes z^* steht, kann man wegen $z/z^* = e^{2i \arg z}$ schreiben

$$e^{2i\kappa \ln(\frac{x}{2})} = e^{2i(G+H)} \quad (3.60)$$

mit

$$\exp(2iG) = \frac{\Gamma(1+i\kappa)}{\Gamma(1-i\kappa)} \quad (3.61)$$

und

$$\exp(2iH) = \frac{{}_0F_1(1-i\kappa, \frac{x^2}{4})(S-i\kappa) + i\kappa {}_0F_1(-i\kappa, \frac{x^2}{4})}{{}_0F_1(1+i\kappa, \frac{x^2}{4})(S+i\kappa) - i\kappa {}_0F_1(i\kappa, \frac{x^2}{4})}. \quad (3.62)$$

Die Bedingung (3.42) kann also dargestellt werden in der Form

$$\kappa \ln \frac{x}{2} = -\pi n + G(i\kappa) + H(i\kappa, \frac{x^2}{4}), \quad (3.63)$$

mit einer beliebigen ganzen Zahl n .

In dem hier betrachteten Fall $w > \frac{1}{4}$; $\mu = i\kappa$; κ reel, gibt es immer mehrere gebundene Zustände für verschiedene Werte von n . Die Grenzfläche ist gebunden und man findet eine weitere Phasengrenze bei $w = \frac{1}{4}$; $u < u^*(\frac{1}{4})$. Um die Divergenz von $\xi_{||}$ an dieser Phasengrenze zu bestimmen, benötigt man das Verhalten von G und H für $\kappa \rightarrow 0$, d.h. $w \rightarrow \frac{1}{4}^+$. Es gilt [5]

$$G(i\kappa) \approx -\gamma\kappa \quad (3.64)$$

$$H(i\kappa, \frac{x^2}{4}) \approx \frac{\kappa}{S} \quad (3.65)$$

wobei γ die Euler'sche Zahl ist. Mit $x = aR \approx (\frac{K^3}{2}\epsilon)^{1/2}R$ folgt

$$\ln \frac{1}{2}\epsilon^{1/2} \approx -\frac{n\pi}{\kappa} - \gamma + \frac{1}{S} + \text{const}. \quad (3.66)$$

Entscheidend für das kritische Verhalten ist nur der Grundzustand. Da nur sein Verhalten diskutiert werden muß, interessieren wir uns nur für kleine Werte von n .

Negative Werte von n sind unphysikalisch, da dann ϵ für $\kappa \rightarrow 0$ divergieren würde. Für $n = 0$ gilt $\epsilon \rightarrow \text{const}$ für $w \rightarrow \frac{1}{4}$. Dies ist der Fall wenn es bei $w = \frac{1}{4}$ gebundene Zustände gibt ($u > u^*(\frac{1}{4})$). Hat man jedoch keine gebundenen Zustände für $w \rightarrow \frac{1}{4}^+$, so wird der Grundzustand durch $n = 1$ beschrieben. Bei Annäherung an die Phasengrenze ($\Delta w = w - \frac{1}{4} \rightarrow 0$) verschwindet ϵ in diesem Fall wie

$$\epsilon \sim \exp[-2\pi/\sqrt{\Delta w}]. \quad (3.67)$$

3.3.2.2. UNTERREGIMES DES IFR

Die Phasengrenze der Entbindungsübergänge besteht aus zwei Teilen, die sich an dem multikritischen Punkt $w = \frac{1}{4}$; $u = u^*(\frac{1}{4})$ treffen (Abb. 3). Es ist die Linie $u^* = u^*(w)$ für $w < \frac{1}{4}$ sowie bei $w = \frac{1}{4}$ die Gerade mit $u < u^*(1/4)$. Entlang dieser Phasengrenze kennen wir jetzt auch das kritische Verhalten. Dieses läßt sich in 3 Unterregimes aufgliedern, in denen sich die Phasenübergänge in wesentlichen Punkten unterscheiden. Es gilt

- (i) Unterregime A für $w = 1/4$ und $u = u^*(1/4)$. Die Korrelationslänge zeigt hier eine *wesentliche Singularität*

$$\xi_{||} \sim \exp\{2\pi/(w - 1/4)^{1/2}\} \quad (3.68)$$

- (ii) Unterregime B für $-3/4 < w < 1/4$ entlang $u^* < u^*(w)$. Bei Annäherung an die Phasengrenze divergiert $\xi_{||}$ wie

$$\xi_{||} \sim (u - u^*)^{-\nu_{||}} . \quad (3.69)$$

Der kritische Exponent $\nu_{||}$ hat den Wert

$$\nu_{||} = \left(\frac{1}{4} - w\right)^{-\frac{1}{2}} \quad (3.70)$$

- (iii) Ebenfalls auf der Phasengrenze $u^* = u^*(w)$ schließt sich bei $w < -\frac{3}{4}$ ein Unterregime C an. Hier hat der Exponent $\nu_{||}$ den Wert $\nu_{||} = 1$ unabhängig von w .

Die freie Energie $f = -T \ln \lambda_0$ skaliert am Phasenübergang wegen $\lambda_0 = \frac{2}{K} + \epsilon$ wie

$$f \sim \epsilon + \text{const} \sim (u - u^*)^{\nu_{||}} + \text{const} . \quad (3.71)$$

Der Exponent $\nu_{||}$ bestimmt somit die Ordnung des Übergangs. In Unterregime A mit seiner wesentlichen Singularität existieren alle Ableitungen von f bezüglich T , d.h. der Übergang ist kontinuierlich und von unendlicher Ordnung. Ebenfalls kontinuierliche Übergänge, die aber von 2. Ordnung sind, findet man in Unterregime B. In Unterregime C dagegen, treten wegen $\nu_{||} = 1$ Übergänge 1. Ordnung auf.

Diese Übergänge 1. Ordnung erkennt man auch daran, daß die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_*(\ell)$ am Übergang normierbar ist, d.h. daß der Übergang zu den nichtnormierbaren Streulösungen sprunghaft stattfindet.

Nähert man sich dem kritischen Punkt mit kleinem $\epsilon = \lambda - \frac{2}{K}$, so gilt für $P(\ell)$ für große ℓ

$$P(\ell) \sim \psi_0^2(\ell) \sim \ell K_\mu^2 \left(\frac{K}{2} \epsilon^{1/2} \ell \right). \quad (3.72)$$

Im Falle kleiner ϵ folgt daraus mit $K_\mu(x) \sim x^{-\mu}$ (x klein)

$$P(\ell) \sim \ell^{1-2\mu}. \quad (3.73)$$

Dies gilt für genügend große ℓ , die aber kleiner als ein Cutoff $\ell_\epsilon \sim \epsilon^{-1/2}$ sein müssen.

Oberhalb dieses Cutoffs fällt $P(\ell)$, wegen $K_\mu(x) \sim x^{-1/2} e^{-x}$ für große x , exponentiell ab, so daß alle Momente von $P(\ell)$ endlich sind solange man die Phasengrenze noch nicht erreicht hat. Für $\epsilon = 0$ ist der Cutoff ℓ_ϵ ins Unendliche verschoben. Am Punkt des Phasenübergangs verhält sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung P_* wie [14]

$$P_*(\ell) \sim \ell^{1-2\mu} \quad \text{für große } \ell. \quad (3.74)$$

Im Unterregime C ist diese Verteilung *normierbar*. Da $P_*(\ell)$ im Regime C skaleninvariant ist, zeigen die Momente $\xi_n = [\int_0^\infty \ell^n P(\ell) d\ell]^{1/n}$ alle ein unterschiedliches Verhalten bei Annäherung an die Phasengrenze. Diese Momente skalieren wie [5]

$$\langle \ell^n \rangle \sim \int_{\ell_0}^{\ell_\epsilon} \ell^n \ell^{1-2\mu} d\ell \sim \epsilon^{-\frac{1}{2}(n+2-2\mu)} \quad (3.75)$$

$$\langle \ell^n \rangle^{1/n} \sim \epsilon^{-\nu_n} \quad ; \quad \nu_n = \frac{1}{n} \left(\frac{n+2}{2} - \mu \right). \quad (3.76)$$

Dabei ist ℓ_0 ein konstanter Cutoff, ℓ_ϵ skaliert wie $\ell_\epsilon \sim \epsilon^{-1/2}$. Solange $(n+2)/2 - \mu > 0$ ist, divergiert ξ_n bei Erreichen des Phasenübergangs. Im Falle $(n+2)/2 - \mu < 0$ bleibt ξ_n endlich, und springt beim Benetzungsübergang auf einen unendlichen Wert.

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_*(\ell) \sim \ell^{1-2\mu}$ im Regime C zeigt, daß wegen der nicht Gaußschen Fluktuationen der Grenzfläche das einfache Skalenverhalten

mit nur einer Längenskala $\xi^n \sim \xi_{||}^{1/2} \sim \ell$, wie man es in Regime B findet, ungültig wird und durch (3.76) ersetzt wird.

Die Renormierungsgruppe, die in Kapitel 4 betrachtet wird, enthält bei Verlust des Skalenverhaltens in Unterregime B keine Fixpunkte mehr. Geht man von Unterregime B über in Unterregime C, so bricht die Linie von Fixpunkten plötzlich ab.

3.3.3. DAS REGIME SCHWACHER FLUKTUATIONEN (WFR)

Nachdem nun der spezielle Fall des IFR mit den drei Unterregimes ausführlich besprochen wurde, werden wir nun das Verhalten bei längerreichweitigen Potentialen behandeln. Diese Potentiale fallen asymptotisch für große ℓ wie $1/\ell^\alpha$ mit $0 < \alpha < 2$ auf Null ab.

Zur Lösung unserer DGL betrachten wir

$$U(\ell) = \begin{cases} -v & \text{für } 0 < \ell < R \\ -\ln(1 + \frac{W}{\ell^\alpha}) & \text{für } \ell > R \text{ und } 0 < \alpha < 2 \end{cases} \quad (3.77)$$

Diese Funktion ist ganz entsprechend zu (3.34) gewählt, hat aber das asymptotische Verhalten $-\frac{W}{\ell^\alpha}$. Der erste Abschnitt der Lösungen der DGL ($\ell < R$) ist natürlich wieder Gleichung (3.34), nur daß jetzt u durch v ersetzt werden muß. Für $\ell > R$ erhält man eine DGL, deren Lösungen im allgemeinen nicht auf einfache Weise dargestellt werden können.

In dem Spezialfall $\alpha = 1$ kann man sie jedoch schreiben als

$$\psi(\ell) = C \cdot W_{b, \frac{1}{2}}(a\ell) \quad \ell > R \quad (3.78)$$

mit $a = (K^2 - \frac{2K}{\lambda})^{1/2}$ und $b = \frac{2KW}{\lambda a}$. Die $W_{\mu, \nu}(x)$ bezeichnen Whittaker'sche Funktionen [12].

Von Schrödingergleichungen ist bekannt, daß bei langreichweitigen anziehenden Potentialen, die asymptotisch wie $\sim -\frac{W}{\ell^\alpha}$ abfallen ($W > 0, 0 < \alpha < 2$), immer gebundene Zustände existieren; unabhängig davon, wie die Potentiale für kleine ℓ aussehen. Die Grenzfläche ist für $W > 0$ also immer gebunden.

Im Falle $W = 0$ befindet man sich im Regime starker Fluktuationen (SFR). Aus Abschnitt 3.2 weiß man, daß hier die Grenzfläche für $v > u^*(0)$ gebunden, für $v < u^*(0)$ dagegen ungebunden ist. $u^*(0)$ ist die in Abschnitt 3.3.2 eingeführte Phasengrenze.

Nähert man sich also ausgehend von $W > 0$; $v < u^*(0)$ der Linie $W = 0$, so findet ein kontinuierlicher Entbindungsübergang statt. Eine Phasengrenze im WFR ist damit $v < u^*(0)$; $W = 0$.

Eine zweite Phasengrenze tritt für $W < 0$ entlang einer Linie $v^* = v^*(W)$ auf, an der Übergänge 1. Ordnung stattfinden. Dies erkennt man daran, daß für $W < 0$ bei geeignet gewählten Werten $v = v^*$ gebundene Lösungen mit $a^2 = 0$, oder $\lambda = \frac{2}{K}$ existieren [19] (Energie-Null gebundene Zustände).

Diese Lösungen findet man, indem man $\lambda = \frac{2}{K}$ setzt und die DGL (3.26) für $\ell > R$ löst:

$$\psi(\ell) = \ell^{1/2} K_{\frac{1}{2-\alpha}}(\nu \ell^{\frac{2-\alpha}{2}}); \quad \text{mit} \quad \nu = \frac{2}{2-\alpha} K(-W)^{1/2} \quad (3.79)$$

Damit die gesamte Lösung bei $\ell = R$ stetig und differenzierbar ist und außerdem die Randbedingung bei $\ell = 0$ erfüllt, muß der Wert v einen bestimmten Wert v^* haben. Bei diesem Wert v^* gehen die gebundenen Zustände gerade verloren, d.h. man befindet sich am Punkt des Übergangs.

Da (3.79) jedoch eine gebundene Lösung mit $\lambda = \frac{2}{K}$ ist, bleibt die Grenzfläche bei Erreichen der Phasengrenze $v = v^*(W)$ gebunden und entbindet sprunghaft. Es handelt sich hier also um einen Übergang 1. Ordnung.

Auch diese Phasengrenze läßt sich aus der Forderung von Stetigkeit und Differenzierbarkeit bestimmen. In den Variablen $V = (e^{v^*} - 1)^{1/2}$ und $w = \nu R^{(2-\alpha)/2}$ gilt

$$KR \frac{V \cos[KRV] - V^2 \sin[KRV]}{\sin[KRV] + V \cos[KRV]} = \frac{1}{2} + \frac{2-\alpha}{2} L_{\frac{1}{2-\alpha}}(w) \quad (3.80)$$

$L_\mu(x)$ ist dabei die im Abschnitt 3.3.2 eingeführte Funktion.

Für langreichweitige Potentiale findet man somit eine Phasengrenze mit zwei Teilbereichen (Abb. 4). Für $W < 0$ eine Linie $v^* = v^*(W)$ mit Übergängen 1. Ordnung und die triviale Phasengrenze $W = 0$ für $v < u^*(0)$. An dieser Grenze

sind die Übergänge von 2. Ordnung. Beide Linien treffen sich in dem Punkt $W = 0, v^* = u^*(0)$.

Die hier auftretenden Übergänge 1. Ordnung sind eine direkte Folge der Existenz *gebundener Zustände mit Energie Null*, wie sie bei Schrödingergleichungen mit langreichweitig anziehenden Potentialen zu finden sind.

Die Übergänge 2. Ordnung des WFR werden von der funktionalen RG, die in Kapitel 4 eingeführt wird, durch den trivialen (Gaußschen) Fixpunkt beschrieben. Hieraus folgt auch die triviale Phasengrenze $W = 0$.

Die hier besprochenen Ergebnisse für das WFR stimmen mit denen von [13] überein. Dort wird jedoch behauptet, daß es sich bei $1/z$ -Potentialen beim SOS-Modell um das IFR handelt. Begründet wird dies mit dem Auftreten "neuartiger Übergänge mit divergenter Korrelationslänge", da auch bei den Übergängen 1. Ordnung die Energielücke ϵ verschwindet.

Mit den Ergebnissen dieser Arbeit wird jedoch gezeigt, daß alle Skalenregimes des SOS-Modells genau mit denen des Gaußschen Modells übereinstimmen. Die Übergänge im WFR sind typische Phasenübergänge 1. Ordnung, das Divergieren einer Längenskala $\sim 1/\epsilon$ bei Verschwinden der Energielücke ϵ kann im Zusammenhang mit finite-size Effekten leicht verstanden werden [20].

4. Funktionale Renormierung des Potentials

4.1. DIE IDEE DER RENORMIERUNGSGRUPPENMETHODE

Renormierungsgruppenmethoden sind ein besonders wirkungsvolles Hilfsmittel bei der Untersuchung kritischer Phänomene. Sie liefern nicht nur Informationen über kritische Exponenten am Phasenübergang, sondern führen auch zu einem Verständnis der Universalität des beobachteten Verhaltens [21].

Mit Universalität bezeichnet man die wichtige Eigenschaft vieler kritischer Phänomene, daß das Verhalten eines Systems nicht von allen Systemdetails, sondern nur von wenigen *relevanten Parametern* abhängt. Eine ganze Universalitätsklasse von verschiedenen physikalischen Systemen zeigt am Phasenübergang die gleichen Eigenschaften.

Diese Besonderheit ermöglicht es erst, vereinfachte Modellsysteme wie Isingmodelle oder die hier untersuchten Grenzflächenmodelle zu betrachten, und dabei Ergebnisse von physikalischer Relevanz zu erhalten.

Die Renormierungsgruppe (RG) unterzieht das System $\mathcal{H}$ einer *Skalentransformation*. Man mittelt über Fluktuationen auf kleinen Längenskalen und ändert zusätzlich alle Längen um einen Skalenfaktor b (Abb. 15). Hierdurch erhält man ein neues System $\mathcal{H}'$, das aber die gleichen makroskopischen Verhaltensweisen zeigt wie das Ausgangssystem. Mikroskopische Details und auch die Art der Wechselwirkungen haben sich geändert. Die RG wirkt im Raum der betrachteten physikalischen Systeme als nichtlineare Abbildung [22] [23].

Am kritischen Punkt ist, wegen der divergenten Korrelationslängen, keine Längenskala ausgezeichnet. Das System ist also auf makroskopischer Ebene *skaleninvariant*. Diese Situation wird von der RG durch einen Fixpunkt der Abbildung beschrieben. Beginnt man mit irgendeinem System am kritischen Punkt, so führt die Iteration der RG auf einen solchen Fixpunkt. Alle Systeme, deren kritisches Verhalten durch den gleichen Fixpunkt der RG beschrieben wird, gehören der

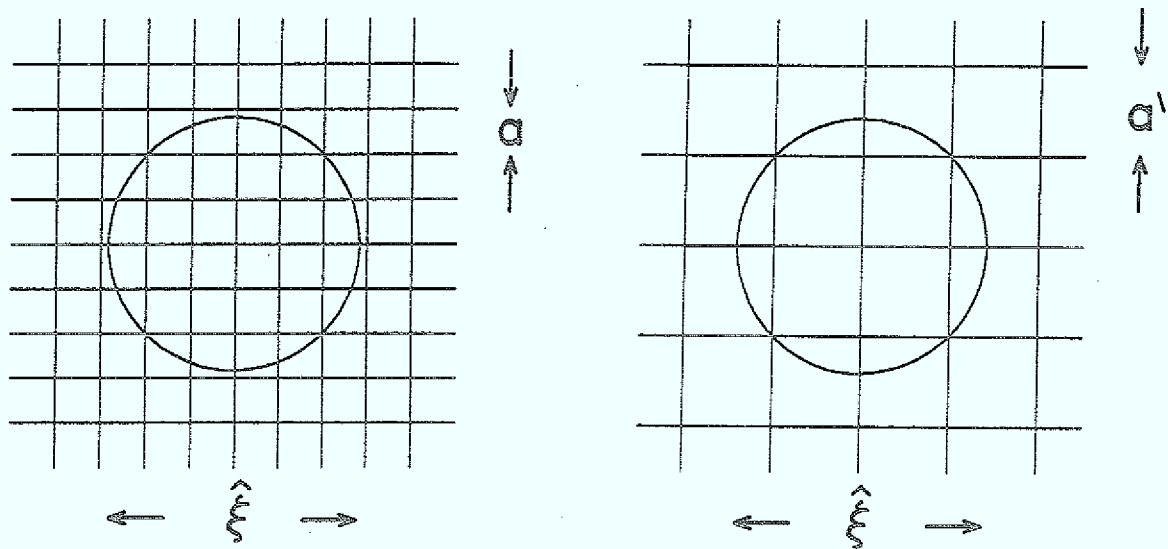


Abb. 15: Schematische Darstellung des Renormierungsvorganges. Durch Ausintegrieren mikroskopischer Freiheitsgrade wird das Gitter ausgedünnt und damit die Gitterkonstante a reskaliert zu $a' = b \cdot a$. Dabei bleibt die Korrelationslänge in physikalischen Einheiten $\hat{\xi} = a \cdot \xi$ unverändert, die in Einheiten der Gitterkonstanten, ξ , wird reskaliert zu $\xi' = 1/b \xi$

gleichen Universalitätsklasse an.

Diese Ideen werden jetzt anhand der hier untersuchten Grenzflächenmodelle mathematisch präzisiert. Ausgehend von der Hamiltonfunktion $\mathcal{H}\{\ell_i\}$ des Systems mit der Zustandssumme

$$Z = \int \prod_i d\ell_i \exp\{-\mathcal{H}/T\} \quad (4.1)$$

mitteln wir über jeden 2. Freiheitsgrad. Dies entspricht einem Reskalierungsfaktor $b = 2$ und führt auf eine neue Hamiltonfunktion $\mathcal{H}'$ mit

$$\exp\{-\mathcal{H}'/T\} = \int \prod_i d\ell_{2i} \exp\{-\mathcal{H}/T\}. \quad (4.2)$$

$\mathcal{H}'$ hängt nur noch von jedem zweiten der ursprünglichen Freiheitsgrade ab. Die Zustandssumme Z , sowie die Korrelationslänge in physikalischen Einheiten $\hat{\xi} = \xi \cdot a$, bleiben dabei unverändert:

$$Z' = Z \quad (4.3)$$

$$\hat{\xi}' = \hat{\xi} \quad (4.4)$$

(a ist die Gitterkonstante, ξ die dimensionslose Korrelationslänge). Da die Gitterkonstante a wie $a' = b \cdot a$ reskaliert wurde, gilt: $\xi' = 1/b \cdot \xi$.

Diese RG Abbildung kann als nichtlineare Abbildung

$$\mathcal{H}' = R_b[\mathcal{H}] \quad (4.5)$$

dargestellt werden.

Aus der RG kann man auch Informationen über kritische Exponenten gewinnen. Zu einem Phasenübergang gehört ein Fixpunkt $\mathcal{H}^*$ mit $R[\mathcal{H}^*] = \mathcal{H}^*$. Linearisiert man $R[\mathcal{H}]$ an dem Fixpunkt $\mathcal{H}^*$, so erhält man einen linearen Operator $\mathcal{L}$ der auf $h = \mathcal{H} - \mathcal{H}^*$ wirkt. In der Nähe des Fixpunktes kann der Fluß der RG genähert werden durch

$$h' = \mathcal{L} h. \quad (4.6)$$

Führt man Eigenfunktionen f_q und Eigenwerte Λ_q von $\mathcal{L}$ ein, so kann man zwischen *relevanten* und *irrelevanten Störungen* unterscheiden. Bei einer relevanten Störung mit $\Lambda > 1$ treibt man vom Fixpunkt weg, eine irrelevante Störung ($\Lambda < 1$) verschwindet unter Anwendung der RG.

Parametrisiert man den RG Fluß in der Nähe des Fixpunktes durch die Amplitude u der relevanten Störung mit dem Eigenwert λ_r , dann beschreibt u den Abstand des Systems vom kritischen Punkt. Die RG transformiert u und $\xi_{||}(u)$ zu

$$u' = \Lambda_r \cdot u \quad (4.7)$$

$$\xi_{||}(u') = \frac{1}{b} \xi_{||}(u) \quad (4.8)$$

Definiert man den Skalenindex y durch

$$b^y = \Lambda_r, \quad (4.9)$$

dann kann dies geschrieben werden als

$$\xi_{||}(u) \approx b \xi_{||}(b^y u) . \quad (4.10)$$

Mit der Wahl $b = u^{-1/y}$ gilt

$$\xi_{||}(u) \sim u^{-1/y} \xi_{||}(1). \quad (4.11)$$

Aus (4.11) kann man direkt ablesen, daß bei Annäherung an den kritischen Punkt bei $u = 0$, die Korrelationslänge $\xi_{||}$ wie $\xi_{||} \sim u^{-\nu_{||}}$ divergiert. Für den kritischen Exponenten gilt dabei $\nu_{||} = \frac{1}{y}$.

Hat man also eine RG definiert, so beginnt man zunächst damit, nach Fixpunkten zu suchen und die zu instabilen Fixpunkten gehörenden relevanten Skalenindizes y zu bestimmen. Man kennt dann das kritische Verhalten der gesamten Klasse von Systemen, die alle unter fortwährender Renormierung auf diese Fixpunkte abgebildet werden.

4.2. RENORMIERUNG DER TRANSFERMATRIX

4.2.1. DEFINITION DER RENORMIERUNGSGRUPPE

Mit Hilfe der Transfermatrix $T(\ell, \ell')$ läßt sich für die hier betrachteten Grenzflächenmodelle auf einfache Weise eine funktionale RG formulieren, die exakt ist. Der Grund dafür ist, daß wir eindimensionale Grenzflächen betrachten, bei denen die wiederholte Integration zur Berechnung der Zustandssumme auf eine Matrixmultiplikation zurückgeführt werden kann.

Geht man nämlich von T über zu $T' = T \cdot T$, so bleibt wegen $Z = Sp\{T^N\} = Sp\{T'^{N/2}\}$ die Zustandssumme unverändert. Außerdem hat man durch die ausgeführte Matrixmultiplikation jeden 2. Freiheitsgrad aussummiert, also eine Reskalierung mit $b = 2$ vorgenommen. Alle Anforderungen an eine RG werden also erfüllt ohne daß irgendwelche Näherungen gemacht wurden.

Bisher wurde das System nur in einer Raumrichtung reskaliert. Zusätzlich muß noch die Variable ℓ reskaliert werden, damit man Fixpunkte erhält. Die

Skaleninvarianz der Grenzfläche erfordert eine Transformation von ℓ wie

$$\ell' = b^\zeta \ell \quad (4.12)$$

wobei ζ der in Abschnitt 3.2 eingeführte Rauigkeitsexponent ist. Für zweidimensionale Systeme ist $\zeta = 1/2$ [4].

Die so eingeführte RG

$$T^{(N+1)}(\ell, \ell'') = \int_{-\infty}^{+\infty} d\ell' T^{(N)}(\sqrt{2}\ell, \ell') T^{(N)}(\ell', \sqrt{2}\ell'') \quad (4.13)$$

hat den trivialen (Gaußschen) Fixpunkt $T^*(\ell, \ell') = \exp\{-\frac{1}{2}(\ell - \ell')^2\}$ wie man sofort durch Einsetzen in (4.13) sieht. Dieser Fixpunkt rechtfertigt die gewählte Reskalierung von ℓ .

Die Besonderheit der RG (4.13) ist ihre Exaktheit. Man kann sicher sein, daß alle Strukturen von dieser RG richtig wiedergegeben werden. Eine Schwierigkeit ist allerdings die Behandlung der kontinuierlichen Matrizen. Da die Fixpunktgleichung (4.13) als nichtlineare Integralgleichung analytisch nur schwer zu untersuchen ist, müssen numerische Methoden eingesetzt werden. Das Diskretisieren von (4.13) führt auf große Matrizen, die einen erheblichen Rechenaufwand erforderlich machen.

4.2.2. DAS FREIE SOS-MODELL ALS BEISPIEL

Ein einfaches Anwendungsbeispiel der oben eingeführten RG soll deren Wirkungsweise demonstrieren. Dazu betrachten wir die RG im Falle freier Grenzflächen, bei denen die TM nur von der Differenz der beiden Variablen ℓ und ℓ' abhängt:

$$T(\ell, \ell') = F(\ell - \ell') \quad (4.14)$$

In diesem Unterraum von Transfermatrizen läßt sich die RG (4.13) mit der Fouriertransformierten

$$\tilde{F}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\ell F(\ell) e^{-ik\ell} \quad (4.15)$$

schreiben als

$$\begin{aligned} F'(\ell/\sqrt{2}) &= \frac{1}{2\pi} \iint dk_1 dk_2 d\ell' \tilde{F}(k_1) e^{ik_1 \ell'} \tilde{F}(k_2) e^{ik_2(\ell-\ell')} \\ &= \int dk \tilde{F}^2(k) e^{ik\ell} . \end{aligned} \quad (4.16)$$

Die RG hat im Fourierraum somit die einfache Form

$$\tilde{F}'(k) = \sqrt{\pi} \tilde{F}^2\left(\frac{k}{\sqrt{2}}\right) . \quad (4.17)$$

Diese sehr einfache Abbildung hat natürlich immer noch den trivialen Gaußschen Fixpunkt

$$T^*(\ell, \ell') = \exp\left\{-\frac{J}{2}(\ell - \ell')^2\right\} \quad (4.18)$$

bzw.

$$\tilde{F}^*(k) = \frac{1}{\sqrt{2J}} e^{-\frac{k^2}{2J}} . \quad (4.19)$$

Dies folgt sofort durch Einsetzen in (4.17) wenn man beachtet, daß es nicht auf Vorfaktoren vor der TM $T(\ell, \ell')$ oder $F(\ell)$ ankommt, da sie bei der Berechnung physikalischer Observablen immer wegfallen. Als Fixpunkt gilt eine Funktion, die *bis auf einen konstanten Vorfaktor* durch die RG reproduziert wird.

Der triviale Fixpunkt (4.19) beschreibt die Skaleninvarianz freier Grenzflächen mit dem Rauigkeitsexponenten $\zeta = \frac{1}{2}$ auf großen Längenskalen. Auch das SOS-Modell hat diese Eigenschaft und wird durch den Gaußschen Fixpunkt beschrieben.

Dies ist einfach zu zeigen. Für das SOS-Modell mit

$$F(\ell) = e^{-I|\ell|} \quad (4.20)$$

und

$$\tilde{F}(k) = I \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{I^2 + k^2} \quad (4.21)$$

ergibt sich mit (4.17) für die N -fache RG-Iterierte sofort

$$\tilde{F}^{(N)}(k) = I^m \frac{2^{m-1}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(I^2 + \frac{k^2}{m})^m} \quad \text{mit} \quad m = 2^N . \quad (4.22)$$

Mit $\lim_{n \rightarrow \infty} (1 + \frac{x}{n})^n = e^x$ gilt im Grenzfalle großer N

$$\lim_{N \rightarrow \infty} F^{(N)}(k) \sim e^{-\frac{k^2}{I^2}}. \quad (4.23)$$

Man erreicht also den Gaußschen Fixpunkt mit einer Grenzflächensteifigkeit $J = I^2/2$.

Auf großen Längenskalen verhält sich das SOS-Modell genau wie das Gaußsche Modell. Die Eigenschaften der freien Grenzfläche mit Rauigkeitsexponent $\zeta = \frac{1}{2}$ sind universell und werden durch den trivialen Fixpunkt beschrieben.

Dieses Ergebnis legt es natürlich nahe, bei beiden betrachteten Modellen gleichartiges kritisches Verhalten bei Entbindungsübergängen zu erwarten, wie es in dieser Arbeit gezeigt wird.

4.3. FUNKTIONALE RENORMIERUNG DES GAUSS'SCHEN MODELLS

4.3.1. EINE EXAKTE RENORMIERUNGSGRUPPE FÜR BENETZUNGSÜBERGÄNGE

Die Renormierungsgruppe (4.13) wird nun im Falle des Gaußschen Modells betrachtet. Dabei werden an die Potentiale $V(\ell)$ die Randbedingungen $V(\ell) \rightarrow 0$ für große ℓ sowie $V(\ell) = \infty$ für $\ell < 0$ gestellt, so daß Benetzungsübergänge studiert werden können.

Zur Vereinfachung werden dimensionslose Variablen $z \equiv \sqrt{\frac{J}{T}}\ell$ und $U(z) \equiv \frac{1}{T}V(\sqrt{\frac{T}{J}}z)$ eingeführt, mit denen die TM die Form

$$T(z, z') = \exp\left\{-\frac{1}{2}(z - z')^2 - \frac{1}{2}(U(z) + U(z'))\right\} \quad (4.24)$$

hat.

Unter der Renormierung (4.13) bleibt der erste Term in der TM als Fixpunkt fest, während das Potential $U(z)$ renormiert wird.

Die Renormierung der TM soll jetzt als Renormierung des Potentials formuliert werden. Hierzu ist es nötig eine verallgemeinerte Potentialfunktion $U(z, z')$ einzuführen. Diese hängt von zwei Variablen z und z' ab. Für das Potential $U(z, z')$

kann eine Renormierungsvorschrift angegeben werden, wenn man als symmetrische Startfunktion $U^{(0)}(z, z') = \frac{1}{2}(U(z) + U(z'))$ setzt. Einsetzen der TM (4.24) in die RG (4.13) führt auf die Renormierung des Potentials U

$$U^{(N+1)}(z, z'') = -\ln \int_0^\infty \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} \exp\left\{-\left(z' - \frac{z+z''}{\sqrt{2}}\right)^2 - G(z' | z, z'')\right\} \\ G(z' | z, z'') = U^{(N)}(z', \sqrt{2}z) + U^{(N)}(z', \sqrt{2}z'') \quad . \quad (4.25)$$

Die Symmetrie der Potentiale $U(z, z') = U(z', z)$ bleibt unter Renormierung erhalten.

Eine etwas einfachere Darstellung erhält man bei Betrachtung der Gewichtsfunktion $P(z, z') = \exp\{-U(z, z')\}$. Anstelle von (4.25) erhält man für die Renormierung von P

$$P^{(N+1)}(z, z'') = \int_0^\infty \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} e^{-(z' - \frac{z+z''}{\sqrt{2}})^2} P^{(N)}(z', \sqrt{2}z) P^{(N)}(z', \sqrt{2}z'') \quad (4.26)$$

Beide Gleichungen sind natürlich identisch. Da für $z < 0$ wegen $U(z) = \infty$ der Integrand verschwindet ist die harte Wand implizit in (4.25) und (4.26) enthalten. Sie wird durch Abschneiden der Integration bei $z = 0$ beschrieben.

Ausgehend von der RG (4.25) wird nun versucht Fixpunkte zu finden, sowie eine Vorstellung von der Struktur des Flusses $U^{(N+1)} = R[U^{(N)}]$ durch den Funktionenraum zu gewinnen.

4.3.2. ANALYTISCHE UNTERSUCHUNG DER FIXPUNKTGLEICHUNG

Nichtlineare Integralgleichungen wie die Fixpunktgleichung $U^* = R[U^*]$, wobei $R[U]$ die RG Abbildung (4.25) ist, lassen sich nur in Ausnahmefällen analytisch exakt lösen. Zwei solche Ausnahmen sind die von Huse [15] gefundenen Fixpunkte $U_\pm$ von (4.25) mit

$$U_\pm(z, z') = -\ln(1 \pm e^{-2zz'}) \quad . \quad (4.27)$$

Dies läßt sich durch Einsetzen in (4.25) und Durchführen der Integration, leicht zeigen.

Beide Fixpunkte sind kurzreichweitig, das heißt sie fallen exponentiell wie $\sim e^{-2zz'}$ auf Null ab. Sie beschreiben das SFR kurzreichweitiger Potentiale [7].

Mit Hilfe einer Sattelpunktsnäherung [24] wird jetzt das asymptotische Verhalten anderer möglicher Fixpunkte bestimmt.

Dazu wird das Integral in (4.25) für große Werte von z und z' genähert. Es muß ein Integral der Form

$$I(a) = \int_0^\infty \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} e^{-(z'-a)^2 - f(z')} \quad (4.28)$$

berechnet werden. Der Exponent $-g(z') = -(z' - a)^2 - f(z')$ wird um sein Minimum bei $z = z^*$ mit

$$z^* - a = -\frac{1}{2}f'(z^*) \quad (4.29)$$

entwickelt als

$$g(z) \approx (z^* - a)^2 + f(z^*) + \left(1 - \frac{1}{2}f''(z^*)\right)(z - z^*)^2. \quad (4.30)$$

Wenn der Integrand $e^{-g(z)}$ in der Nähe des Sattelpunktes $z = z^*$ das Integral (4.28) dominiert, dann ist die Entwicklung eine geeignete Näherung.

Durch Einsetzen von (4.30) in (4.28) und Durchführen der Integration erhält man

$$I(a) \approx e^{-(z^*-a)^2 - f(z^*)} \frac{\phi(z^*)}{\left(1 - \frac{1}{2}f''(z^*)\right)^{1/2}} \quad (4.31)$$

mit

$$\phi(z) = \int_{-\infty}^z \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} e^{-z'^2}. \quad (4.32)$$

In unserem Falle ist $a = (z + z'')/\sqrt{2}$ und $f(z') = U(z', \sqrt{2}z) + U(z', \sqrt{2}z'')$. Betrachtet man das asymptotische Verhalten für große z und z'' , also $a \rightarrow \infty$, so gilt mit (4.29)

$$z^* \approx a, \quad (4.33)$$

da $f'(z) \rightarrow 0$ für große z . Außerdem gilt $\phi(z^*) \approx 1$ und man erhält in führender Ordnung

$$I(a) \approx e^{-f(a)}. \quad (4.34)$$

Aus der Fixpunktgleichung wird in dieser Näherung eine lineare Funktionalgleichung

$$U^*(z, z'') = U^*\left(\frac{z + z''}{\sqrt{2}}, \sqrt{2}z\right) + U^*\left(\frac{z + z''}{\sqrt{2}}, \sqrt{2}z''\right) \quad (4.35)$$

die das asymptotische Verhalten der Fixpunkte $U^*(z, z')$ beschreibt, da für $a \rightarrow \infty$ die Sattelpunktsnäherung beliebig gut wird.

Die einzigen Lösungen von (4.35) sind

$$U^*(z, z'') = \frac{\rho}{z \cdot z''} \quad (4.36)$$

mit einem freien Parameter ρ . Dies kann man durch einfaches Einsetzen sofort nachprüfen.

Es werden alle langreichweitigen Fixpunkte richtig beschrieben. Bei kurzreichweitigen Fixpunkten ist die Näherung ungeeignet, da sie in diesem Fall für $a \rightarrow \infty$ nicht exakt wird. Beide aus physikalischen Gründen erwarteten kurzreichweitigen Fixpunkte sind aber die exakt bekannten $U_{\pm}$, so daß dies kein Problem darstellt.

Nun wenden wir uns dem Verhalten der Fixpunkte an der Wand zu. Hierzu betrachten wir Gleichung (4.26), da diese etwas einfacher zu studieren ist als (4.25). Setzt man verschiedene Ansätze für $P(z, z') = \exp\{-U(z, z')\}$ in (4.26) ein und prüft ob für $z, z' \rightarrow 0$ die Fixpunktgleichung konsistent erfüllbar ist, so führt nur die Wahl

$$P^*(z, z') \sim (z \cdot z')^{\sigma/2} \quad (4.37)$$

zum Erfolg. Alle anderen einfach gewählten Ansätze sind offensichtlich inkonsistent. Das hieraus folgende Verhalten für die Fixpunkte

$$U^*(z, z') \approx -\frac{\sigma}{2} \ln z \cdot z' \quad \text{für } z, z' \rightarrow 0 \quad (4.38)$$

wird durch numerische Untersuchungen bestätigt.

Diese asymptotischen Entwicklungen (4.36) und (4.38) geben erste Hinweise auf die Existenz langreichweitiger Fixpunkte. Auf die Frage, ob es aber neben den $U_{\pm}$ weitere Fixpunkte gibt und wie diese in der gesamten z, z' -Ebene aussehen, darüber geben analytische Näherungen keine Auskunft.

4.3.3. NUMERISCHE SIMULATION DES RG-FLUSSES

Bei der RG Abbildung (4.25) handelt es sich um eine nichtlineare Integraltransformation. Es ist unumgänglich diese Abbildung numerisch zu simulieren, da für nichtlineare Probleme kein geeigneter Apparat analytischer Methoden zur Verfügung steht.

Auch die numerische Simulation von (4.25) führt auf große Schwierigkeiten. Zunächst muß die Integration in (4.25) durchgeführt werden (z.B. Simpsonregel [25]). Wählt man auf dem Integrationsintervall n Stützstellen, so muß man die Potentiale $U^{(N)}$ als $n \times n$ -Matritzen abspeichern und bei jedem RG-Schritt n^2 Integrationen durchführen.

Betrachtet man kurzreichweitige Potentiale, so kann man einfach ein endliches Integrationsintervall $[0, a]$ wählen, wobei $U(z, z')$ für $z, z' > a$ einfach gleich Null gesetzt wird.

Die Integration von a bis ∞ läßt sich dann durch eine Errorfunktion ausdrücken. Auf dem Intervall $z = 0 \dots a$ können n Stützstellen mit gleichem Abstand eingeführt werden.

Wesentlich subtiler ist die Integration bei langreichweitigen Potentialen. Hier muß die Integration von Null bis ∞ durchgeführt werden, da ein Abschneiden der Integration sofort ein kurzreichweitiges Potential erzeugen würde. Dieses Potential würde auf die bekannten kurzreichweitigen Fixpunkte $U_{\pm}$ führen.

Zur Durchführung der Integration über das gesamte Intervall $[0, \infty]$ wird dieses mit Hilfe der Variablentransformation

$$y = \frac{z/c}{1 + z/c} \quad (4.39)$$

mit einem frei wählbaren Parameter c auf das Intervall $y = 0 \dots 1$ abgebildet. Dieses Intervall wird nun in n äquidistante Stützstellen eingeteilt.

Betrachtet man diese Stützstellen auf dem ursprünglichen Intervall $z = 0 \dots \infty$, so liegen sie in der Nähe der Wand eng benachbart. Bei großen Werten von z wächst ihr Abstand jedoch wie $\sim (1 + z)^2$.

Der zunehmende Abstand zwischen den Stützstellen bei großen Werten von z führt zu Ungenauigkeiten bei der Integration. Dieses Problem läßt sich geschickt

umgehen, wenn man in diesem Fall das Integral nicht durch eine Summe über die Stützstellen berechnet. Die Sattelpunktsnäherung (Abschnitt 4.3.2) liefert nämlich gerade dann gute Werte, wenn die Simpsonintegration versagt, und kann im Bereich großer z verwendet werden.

Für das Reskalieren der Funktion mit einem Faktor 2^6 muß zwischen den Stützstellen interpoliert werden. Fehler treten hier im Wesentlichen bei großen Werten von z auf, da die Stützstellen dann weit auseinanderliegen.

Diese Fehler beim Interpolieren lassen sich durch die Wahl einer geeigneten Variablentransformation verringern. Die Transformation (4.39) ist so gewählt, daß Fehler bei linearer Interpolation des asymptotischen Verhaltens der Fixpunkte $\sim \frac{1}{z \cdot z'}$ klein bleiben. Dies ermöglicht eine Behandlung langreichweitiger Potentiale.

Das so beschriebene numerische Verfahren läßt sich leicht als Fortran Programm realisieren. Als Startpotential benötigt man eine Funktion $U^{(0)}(z, z')$, bei der sowohl die Amplitude ρ des langreichweitigen Teils als auch die Stärke des anziehenden Teils u in der Nähe der Wand parametrisiert werden kann.

Für unsere Zwecke eignet sich wegen ihrer Einfachheit die Startfunktion

$$U^{(0)}(z, z') = \begin{cases} u & z \cdot z' < R \\ \frac{\rho}{z \cdot z'} & z \cdot z' > R \end{cases} \quad (4.40)$$

mit beliebigem R . Es kann natürlich jede beliebige andere Funktion mit dem gleichen asymptotischen Verhalten gewählt werden. Sie muß sich nur auch durch zwei entsprechende Variablen parametrisieren lassen.

Ausgehend von einer solchen Startfunktion wird die RG numerisch iteriert. Wie auch die Sattelpunktsnäherung zeigt, bleibt das asymptotische Verhalten des Potentials dabei unverändert.

Für das Verhalten von $U(z, z')$ unter Renormierung gibt es drei Möglichkeiten:

- (i) Die Iteration konvergiert gegen einen stabilen Fixpunkt U_0^* . Dies geschieht, wenn die anziehende Wechselwirkung nicht stark genug ist, die Grenzfläche zu binden. Die Skaleninvarianz der ungebundenen Grenzfläche wird durch einen Fixpunkt beschrieben.
- (ii) Ist dagegen die Grenzfläche an die Wand gebunden, so ist die Situation natürlich nicht skaleninvariant und die Iteration konvergiert nicht gegen ei-

nen Fixpunkt. In diesem Falle wird das Potentialminimum gegen die Wand gedrückt, wobei es gleichzeitig gegen große negative Werte divergiert.

- (iii) Stellt man die Stärke der anziehenden Wechselwirkung u gerade so ein, daß man sich am kritischen Punkt des Entbindungsübergangs befindet, so konvergiert das Verhalten einige Zeit gegen einen Fixpunkt U_c^* , wenn der Parameter ρ innerhalb des Intervalls $-\frac{1}{8} < \rho < \frac{3}{8}$ liegt. Da der Fixpunkt instabil ist, wird man jedoch wieder weggetrieben.

Für $\rho < -\frac{1}{8}$ findet man keinen Fixpunkt. Die Grenzfläche ist hier immer ungebunden. Im Falle $\rho > \frac{3}{8}$ sieht man den Phasenübergang als Separatrix, der RG-Fluß konvergiert jedoch nicht gegen einen Fixpunkt. Dieser Fall (Unterregime C) wird ausführlich in Abschnitt 4.3.7 besprochen.

Die Suche nach Fixpunkten der RG durch Iteration ist sehr aufwendig. Die stabilen Fixpunkte U_0^* sind zwar sehr leicht mit guter Genauigkeit zu finden, die instabilen Fixpunkte U_c^* bereiten jedoch große Schwierigkeiten. Der kritische Punkt muß mit einer relativen Genauigkeit von ca. 10^{-12} bekannt sein, damit man gute Näherungen der Fixpunktpotentiale erhält. Die Bestimmung eines derart genauen kritischen Wertes von u erfordert ca. 2 Stunden CPU-Zeit mit einem vektorisierten Programm auf einer CRAY-X/MP 22.

Die mit diesem Verfahren bestimmten Fixpunkte zeigen alle eine überraschende Eigenschaft, die die Untersuchung der Fixpunktstruktur wesentlich vereinfacht. Sie sind innerhalb der numerischen Genauigkeit Funktionen nur des Produkts der beiden Variablen z und z' : $U^*(z, z') = \bar{U}(z \cdot z')$ (Abb. 5).

Es genügt also, die Funktion $\bar{U}(x)$ zu bestimmen und numerisch zu überprüfen, ob $\bar{U}(z \cdot z')$ wirklich ein Fixpunkt der RG ist.

Mit dieser Methode, die im folgenden Kapitel beschrieben wird, kann die gesamte Fixpunktstruktur der RG sehr genau untersucht werden. Es zeigt sich so, daß es eine parabolische Linie von Fixpunkten gibt, die bei $\rho = 3/8$ plötzlich abbricht.

4.3.4. DIE EINDIMENSIONALE FIXPUNKTGLEICHUNG

Die numerischen Iterationen der Gleichung (4.25) zeigen, daß die Fixpunkte $U^*(z, z')$ nur Funktionen des Produktes $z \cdot z'$, $U^*(z, z') = \bar{U}(z \cdot z')$ sind.

Leider kann diese Aussage nicht analytisch belegt werden, sie ist aber bei allen numerisch bestimmten Fixpunkten mit großer Genauigkeit erfüllt.

Diese Beobachtung ermöglicht eine neue Vorgehensweise. Unter der Voraussetzung, daß die Funktionen $\bar{U}(z \cdot z')$ Fixpunkte von (4.25) sind, kommt man zu einer einfachen Gleichung für die $\bar{U}$. Es gilt dann

$$\bar{U}(z^2) = -\ln \int_0^\infty \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} \exp\{-(z' - \sqrt{2}z)^2 - 2\bar{U}(\sqrt{2}zz')\} \quad (4.41)$$

(4.41) ist immer noch eine nichtlineare Integralgleichung. Da die $\bar{U}(z^2)$ nur von einer Variable abhängen, ist das Problem um eine Dimension reduziert und somit viel einfacher zu studieren.

Analytische Entwicklungen des asymptotischen Verhaltens für große und kleine z lassen sich bis in höhere Ordnungen durchführen (Anhang A und B). Man gewinnt so wertvolle analytische Informationen über die Struktur der Fixpunkte.

Numerisch läßt sich (4.41) als nichtlineare Integralgleichung direkt lösen. Hierzu diskretisiert man die Integration in (4.41) und betrachtet das so entstandene nichtlineare Gleichungssystem. Lösungen dieses Gleichungssystems lassen sich mit Hilfe eines verallgemeinerten Newton-Verfahrens [25] (Newton-Rhaphson-Methode) iterativ finden. Beispiele sind in den Abbildungen 6 und 7 dargestellt.

Man startet mit einer Näherungsfunktion für die Lösung, die das asymptotische Verhalten $\sim \rho/z^2$ enthalten muß. Je nachdem ob diese Startfunktion einen schwachen oder starken anziehenden Teil in Wandnähe hat, erreicht man den ungebundenen Fixpunkt $\bar{U}_0$ bzw. den kritischen Fixpunkt $\bar{U}_c$.

Setzt man die so bestimmten Funktionen $\bar{U}(z \cdot z')$ in (4.25) ein, so zeigt sich, daß sie mit großer Genauigkeit Fixpunkte der vollen RG im Raum der $U(z, z')$ sind.

Die Resultate der Untersuchung von (4.41) seien nun kurz zusammengefaßt. Die analytischen Entwicklungen ergeben (siehe Anhang A und B)

$$\bar{U}(z^2) \approx \frac{\rho}{z^2} + 1/2 \frac{\rho}{z^4} + \dots \quad \text{für große } z \quad (4.42)$$

$$\bar{U}(z^2) \approx -\ln\{z^{2\sigma}(C_0 + C_1 z^2 + C_2 z^4 + \dots)\} \quad \text{für kleine } z \quad (4.43)$$

Dabei sind die C_i Konstanten, die aber noch von dem Parameter σ abhängen. Beide Entwicklungen haben in führender Ordnung das schon bekannte Verhalten (4.38) und (4.36) der Fixpunkte von (4.25).

Es zeigt sich außerdem (Anhang A), daß die Lösungen (4.43) nur existieren, solange $\sigma > -1$ ist. Für $\sigma \leq -1$ wird das Integral in (4.25) und (4.41) an der Wand singulär.

Jeder Fixpunkt läßt sich durch die beiden Parameter ρ und σ eindeutig identifizieren. Trägt man die Werte ρ und σ der durch das Newtonverfahren ermittelten Fixpunkte in ein (ρ, σ) Diagramm ein (Abb. 8), so liegen diese alle auf der Parabel

$$\rho = \rho^*(2 - \sigma) \quad \text{mit} \quad \rho^* = -\frac{1}{8}. \quad (4.44)$$

Der Parabelast mit $\sigma > 1$ besteht aus den stabilen Fixpunkten $\bar{U}_0$, die die ungebundene Grenzfläche beschreiben. Der zweite Parabelast $-1 < \sigma < 1$ bricht bei $(\rho, \sigma) = (\rho^{**}, -1)$ mit $\rho^{**} = 3/8$ plötzlich ab und besteht aus instabilen Fixpunkten. Sie beschreiben den kritischen Punkt im Unterregime B.

Ein ausgezeichneter Punkt ist der Parabelscheitel $(\rho, \sigma) = (\rho^*, 1)$ der zu Unterregime A gehört. Für $\rho < \rho^*$ gibt es keine Fixpunkte mehr, hier ist die Grenzfläche immer gebunden.

Mit Hilfe der numerischen Untersuchung findet man somit eine ganze Linie von Fixpunkten mit einer parabolischen Struktur. Da diese Ergebnisse genau die analytischen Resultate für das SOS-Modell aus Kapitel 3 bestätigen, kann man davon ausgehen, daß diese parabolische Struktur wirklich exakt ist.

4.3.5. DER ÜBERGANG INS UNTERREGIME C

Betrachten wir nun, was am Punkt $(\rho, \sigma) = (\rho^{**}, -1)$ geschieht, an dem die Fixpunktlinie plötzlich aufhört.

Wir bewegen uns entlang der Fixpunktlinie auf diesen Endpunkt zu. Hierbei wird die Singularität an der Wand immer stärker, bis das Integral in (4.41) bzw. (4.25) bei $\sigma = -1$ nicht mehr existiert.

In der Nähe dieses Endpunktes mit $\sigma = -1$ schmiegen sich die Fixpunkte $\bar{U}_\sigma(z^2)$ immer mehr an den stabilen Fixpunkt $\bar{U}_3(z^2)$ an, der auf dem anderen Parabelast liegt und das gleiche asymptotische Verhalten hat (Abb. 9).

Man trifft also am Endpunkt der Fixpunktlinie auf den gegenüberliegenden Parabelast, das heißt die Linie von Fixpunkten bildet einen *geschlossenen Ring* im Funktionenraum.

Da dieses Anschmiegen an $\bar{U}_3$ bei kleinen Werten von z geschieht, läßt es sich durch die analytische Entwicklung (4.43) der Fixpunktgleichung an der Wand beschreiben.

Wir betrachten nun die Funktion $\bar{P}_\sigma(z^2) = e^{-\bar{U}_\sigma(z^2)}$. Ausgehend von (4.43) setzt man $\sigma = -1 + \epsilon$ und betrachtet kleine ϵ . Setzt man die in Anhang A bestimmten Werte für die C_i ein, so erhält man

$$\bar{P}_{-1+\epsilon}(z^2) = z^{-1+\epsilon} \left\{ \epsilon \sqrt{2\pi} (1 - z^2) + \sqrt{\frac{\pi}{2}} (1 + K_1 \epsilon) z^4 - \sqrt{\frac{\pi}{2}} (1 + K_2 \epsilon) z^6 \right\}, \quad (4.45)$$

mit zwei Konstanten K_1 und K_2 . Bildet man den Grenzfall kleiner ϵ , so erhält man

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \bar{P}_{-1+\epsilon}(z^2) &= z^3 \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} (1 - z^2) + \dots \right) \\ &\equiv \bar{P}_3(z^2) \quad . \end{aligned} \quad (4.46)$$

Es zeigt sich, daß dieser Grenzwert bis in höherer Ordnung in z mit der Entwicklung von $\bar{P}_3(z^2)$ übereinstimmt.

Die Funktion $\bar{U}_{-1+\epsilon}(z^2)$ hat ein Maximum an der Stelle $z = z_0$. Der Wert von z_0 kann für kleine ϵ mit Hilfe von (4.45) bestimmt werden.

Für $z > z_0$ stimmen $\bar{U}_{-1+\epsilon}$ und $\bar{U}_3$ sehr genau überein. An der Wand, bei $z < z_0$ zeigen beide Funktionen eine Divergenz mit unterschiedlichem Vorzeichen. Nähert man sich dem Punkt $\sigma = -1$ so wird z_0 wie $z_0^4 \approx \frac{2}{3}\epsilon$ gegen die Wand gedrückt.

Im Funktionenraum existiert kein instabiler Fixpunkt mit $\sigma = -1$. Betrachtet man den Grenzübergang (4.46) genauer, so sieht man, daß er nur für endliche z gilt. Bei $z = 0$ bleibt nämlich immer eine Singularität übrig. Der Term $\epsilon z^{-1+\epsilon}$ kann als eine distributionsartige Singularität ähnlich der δ -Funktion aufgefaßt werden, da das Integral bei kleinen z für $\epsilon \rightarrow 0$ konvergent bleibt.

Diese Beobachtung läßt die Interpretation zu, daß am Punkt $\sigma = -1$ ein instabiler Fixpunkt existiert der für endliche z identisch zu $\bar{U}_3(z^2)$ ist, bei $z = 0$ jedoch eine distributionsartige Singularität aufweist.

4.3.6. SKALENINDIZES UND KRITISCHE EXPONENTEN

Die Linie instabiler Fixpunkte U_c^* im Parameterintervall $-1 < \sigma < 1$; $\rho^{**} > \rho > \rho^*$ beschreibt Phasenübergänge 2. Ordnung der Grenzfläche mit parameterabhängigen (nichtuniversellen) kritischen Exponenten. Diese Übergänge bilden das Unterregime B.

Wie in Abschnitt 4.1 gezeigt wurde, kann der kritische Exponent $\nu_{||}$ für die Divergenz der parallelen Korrelationslänge $\xi_{||}$ aus dem relevanten Skalenindex y am Fixpunkt durch $\nu_{||} = 1/y$ bestimmt werden. Der Wert y variiert dabei entlang der Fixpunktlinie.

Der Skalenindex y bei einem Fixpunkt läßt sich sehr gut numerisch ermitteln. Hierzu wird der lineare Operator $\mathcal{L}$, der in Gleichung (4.6) eingeführt wurde, bestimmt.

Wir entwickeln dazu Gl. (4.26) um einen Fixpunkt $P^*(z, z')$. Setzt man $P^{(N)} = P^* + p^{(N)}$ in (4.26) ein, wobei $p^{(N)}$ eine kleine Störung des Fixpunktes ist, so erhält man in 1. Ordnung in $p^{(N)}$

$$p^{(N+1)} = \mathcal{L} p^{(N)} \quad (4.47)$$

mit

$$p^{(N+1)}(z, z'') = \int_0^\infty \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} e^{-(z' - \frac{z+z''}{\sqrt{2}})^2} \times p^{(N)}(z', \sqrt{2}z) P^*(z', \sqrt{2}z'') + P^*(z', \sqrt{2}z) p^{(N)}(z', \sqrt{2}z''). \quad (4.48)$$

Die mit Hilfe von (4.41) bestimmten Fixpunkte können nun in (4.48) eingesetzt werden. Die Wirkung des Operators $\mathcal{L}$ auf beliebige Funktionen kann so numerisch bestimmt werden.

Beginnt man mit einer beliebigen Startfunktion $p^{(0)}$ und wendet $\mathcal{L}$ darauf wiederholt an, so dominiert die Eigenfunktion von $\mathcal{L}$ mit dem größten Eigenwert $\Lambda_0 = b^y$. Diese Eigenfunktion f_0 läßt sich direkt durch Iteration von (4.48)

erzeugen, der Eigenwert Λ_0 wird einfach durch Division der Amplitude zweier aufeinanderfolgender Iteration bestimmt.

Die so bestimmten Werte von y folgen, mit einer Abweichung von nur ca. 1%, der einfachen Beziehung

$$y = \frac{1 - \sigma}{2} \quad , \quad -1 < \sigma < 1 . \quad (4.49)$$

Mit (4.44) und (4.11) erhält man damit genau das Ergebnis (3.70) $\nu_{||} = 2/[1 + 8\rho]^{1/2}$.

Es sei hier noch angemerkt, daß auch im Unterregime C ($\rho > \rho^{**}$), wo keine Fixpunkte existieren, eine Verallgemeinerung dieses Verfahrens auf den richtigen Skalenindex $y = 1$ führt. Man kann hier zwar nicht um einen Fixpunkt P^* entwickeln, es ist aber möglich eine ähnliche Entwicklung um den kritischen RG-Fluß $\tilde{P}^{(N+1)} = R[\tilde{P}^{(N)}]$ der Iteration (4.26) zu betrachten.

Setzt man $P^{(N)} = \tilde{P}^{(N)} + p$ mit einer kleinen Störung p , so kann man linearisieren:

$$R[P^{(N)}] \approx R[\tilde{P}^{(N)}] + \mathcal{L}_N p \quad (4.50)$$

Dabei ist

$$\begin{aligned} (\mathcal{L}_N p)(z, z'') &= \int_0^\infty \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} e^{-(z' - \frac{z+z''}{\sqrt{2}})^2} \\ &\times p(z', \sqrt{2}z) \tilde{P}^{(N)}(z', \sqrt{2}z'') + \tilde{P}^{(N)}(z', \sqrt{2}z) p(z', \sqrt{2}z'') . \end{aligned} \quad (4.51)$$

Zu dem Operator $\mathcal{L}_N$ kann ein Skalenindex y_N bestimmt werden. Für große N konvergiert dieser gegen einen Wert $y = \lim_{N \rightarrow \infty} y_N$.

Die Folge y_N läßt sich numerisch ermitteln. Solange sich der RG-Fluß nahe am kritischen Punkt befindet, konvergiert die Folge y_N mit einem Fehler von ca. 1% tatsächlich gegen den Wert $y = 1$, unabhängig von dem Parameter ρ (Abb. 11). Wenn der RG-Fluß dann vom kritischen Punkt wegtreibt, divergiert die Folge y_N .

4.3.7. DAS UNTERREGIME C IN DER RENORMIERUNGSGRUPPE

Betrachtet man die RG (4.25) und beginnt mit Startpotentialen (4.40) mit $\rho > \rho^{**}$ (Unterregime C), so zeigt der RG-Fluß ein ungewöhnliches Verhalten. Im Falle einer gebundenen sowie einer ungebundenen Grenzfläche sieht man keinen Unterschied zu dem schon beschriebenen Unterregime B. Insbesondere findet man auch hier stabile Fixpunkte U_0^* .

Am kritischen Punkt, der sich auch hier durch eine Separatrix im Fluß bemerkbar macht, stellt man fest, daß die Iteration nicht auf einen Fixpunkt führt (Abb. 10). Dieses Fehlen eines Fixpunktes deutet darauf hin, daß das einfache Skalenverhalten mit nur einer Längenskala, wie man es in Unterregime B findet, hier ungültig wird.

Wir wollen nun dieses Verhalten der RG im Unterregime C besser verstehen. Dazu betrachten wir die Gewichtsfunktion $P^{(N)}(z, z') = \exp\{-U^{(N)}(z, z')\}$.

Mit Gleichung (3.18) sieht man, daß $P^{(N)}(z, z)$ die reskalierte Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(z)$ der Grenzfläche in einem endlichen System ist. Durch Iterieren der Transfermatrix bildet man nämlich höhere Potenzen T^n der ursprünglichen Matrix T . Bei jedem weiteren Schritt geht man dann über von T^n zu T^{2^n} , was einer Verdopplung der Systemgröße entspricht. Dabei ist $n = 2^N$, und N die Zahl der RG-Schritte.

Diese Beobachtung legt es nahe, aus dem RG-Fluß Informationen über den Weg zum thermodynamischen Limes unendlicher Systemgröße zu gewinnen ("finite-size-Verhalten"). Für große Werte von z ist $P^{(N)}(z, z) \approx 1$. Als Wahrscheinlichkeitsverteilung ist $P^{(N)}$ somit nicht normierbar und die Grenzfläche immer ungebunden.

Dies ist nicht überraschend, da in einem endlichen System die Grenzfläche immer mit einer endlichen Wahrscheinlichkeit in den ungebundenen Zustand tunneln kann. Erst in einem unendlichen System kann ein gebundener Zustand existieren [16].

Die Funktion $P^{(N)}(z, z)$ hat genau ein Minimum an der Stelle $z = z_0^{(N)}$. Iteriert man die RG (4.26) am kritischen Punkt, so beobachtet man, daß das Mini-

mum bei z_0 gegen die Wand wandert. Für große N gilt

$$z_0^{(N)} \sim b^{-\delta N} , \quad (4.52)$$

was einen Exponenten δ definiert. Für $z > z_0^{(N)}$ konvergiert die Folge $P^{(N)}$ gegen den stabilen Fixpunkt $P_{2-\sigma}^*$ (Abb. 12).

An der Wand bei $z_\epsilon < z < z_0^{(N)}$ entsteht eine Singularität, die sich wie $\sim z^\sigma$ mit $\sigma < -1$ verhält. z_ϵ ist ein Cutoff der durch wiederholtes Reskalieren wie $z_\epsilon \sim b^{-N/2}$ an die Wand geschoben wird. Bestimmt man den Wert von σ numerisch, so zeigt sich daß er immer noch die parabolische Beziehung (4.44) erfüllt.

Die RG versucht, einen Fixpunkt mit einem passenden Wert von σ zu erreichen. Da das Integral dabei divergieren würde, kann dieser Fixpunkt aber nicht existieren. Stattdessen konvergiert das Verfahren für $z > z_0^{(N)}$ gegen den stabilen Fixpunkt und zusätzlich wächst eine Singularität bei $z < z_0^{(N)}$.

Das Verhalten von $P^{(N)}(z, z)$ für große N läßt sich näherungsweise darstellen als

$$P_\sigma^{(N)}(z, z) \approx a_N z^\sigma + P_{2-\sigma}^*(z, z) \quad (4.53)$$

mit $z > z_\epsilon$ und einer Konstanten a_N . Das Minimum von $P^{(N)}$ an der Stelle $z_0^{(N)}$ verhält sich wie

$$z_0^{(N)} \sim a_N^{1/(2-2\sigma)} \quad (4.54)$$

was man durch einfaches Ableiten von (4.53) nach z sofort sieht.

Der Wert von δ läßt sich bestimmen, wenn man das Verhalten von a_N kennt. Hierzu betrachten wir noch einmal (4.53). Die beiden Terme auf der rechten Seite spiegeln die Konkurrenz zwischen gebundenen Grenzfläche (Singularität an der Wand) und ungebundener Grenzfläche (stabiler Fixpunkt $P_{2-\sigma}^*$) am kritischen Punkt wieder.

Dies führt zu der Annahme, daß a_N gerade so gegen Null konvergiert, daß $\int_{z_\epsilon}^{\text{const}} a_N z^\sigma dz$ mit $z_\epsilon \sim b^{-N/2}$ für große N einen konstanten Wert liefert. Dies erfordert

$$a_N \sim b^{N(\sigma+1)/2} , \quad (4.55)$$

und entspricht dem Aufbau einer distributionsartigen Singularität an der Wand.

Würde a_N schneller gegen Null streben, so würde das Integral über $P^{(N)}$ an der Wand verschwinden. Die Grenzfläche wäre ungebunden da nur noch der stabile Fixpunkt $P_{2-\sigma}^*$ übrig bliebe.

Wäre dagegen das Verschwinden von a_N langsamer als (4.55), so würde das Integral über $P^{(N)}$ an der Wand die Wahrscheinlichkeitsverteilung dominieren. Die Grenzfläche wäre somit an die Wand gebunden.

Der kritische Punkt wird gerade durch das Entstehen einer distributionsartigen Singularität an der Wand beschrieben, bei der sich gebundener und ungebundener Zustand gerade die Waage halten.

Mit Hilfe von (4.54) und (4.55) kann der Exponent δ bestimmt werden. Obige Argumente führen auf

$$\delta = 1/4 \frac{\sigma + 1}{\sigma - 1} , \quad (4.56)$$

was konsistent zu numerisch ermittelten Werten ist. Die numerische Bestimmung von δ bereitet Schwierigkeiten und ist mit Fehlern von bis zu 15% behaftet (Abb. 13).

Der Exponent δ spielt eine zentrale Rolle im Unterregime C. $P^{(N)}(z, z)$ ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Grenzfläche in einem endlichen System der Größe $L_{\parallel} \sim b^N$. Die einzige senkrechte Längenskala $L_{\perp}$, die zur Definition eines Rauigkeitsexponenten aus $P^{(N)}$ benutzt werden kann, ist der Ort des Minimums $z_0^{(N)}$. Wenn wir die fortlaufende Reskalierung berücksichtigen gilt $L_{\perp} \sim z_0^{(N)} b^{N/2}$.

Dies führt mit (4.52) auf

$$L_{\perp} \sim L_{\parallel}^{\tilde{\zeta}} \quad \text{mit} \quad \tilde{\zeta} = \frac{1}{2} - \delta . \quad (4.57)$$

Der Exponent $\tilde{\zeta}$ spielt also die Rolle des *Rauigkeitsexponenten im Unterregime C am kritischen Punkt*.

Eine weitere wichtige Beobachtung ist, daß der Parameter σ auch im Unterregime C an der Wand als Singularität z^{σ} auftritt und immer noch der parabolischen Beziehung (4.44) folgt. Aus Kapitel 3 ist bekannt, daß die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Grenzfläche am kritischen Punkt $P_*(z)$ asymptotisch mit einem Potenzgesetz auf Null abfällt (Gleichung (3.74)). Diese nichtgaußschen Fluktuationen der Grenzfläche führen zu dem ungewöhnlichen Skalenverhalten. Durch

Vergleich mit den dortigen Ergebnissen sieht man, daß

$$P_*(z) \sim z^\sigma \quad \text{für große } z, \quad (4.58)$$

das heißt $\sigma = 1 - 2\mu$ ist.

Daß dieses Verhalten $\sim z^\sigma$ in $P^{(N)}(z, z)$ nicht bei großen z , sondern direkt an der Wand erscheint, ist eine Folge des wiederholten Reskalierens beim Iterieren der RG.

Die Informationen über den thermodynamischen Limes der Grenzfläche werden an die Wand gedrückt und durch die dortige distributionsartige Singularität beschrieben. Der Bereich endlicher z von $P^{(N)}(z, z)$, der gegen $P_{2-\sigma}^*$ konvergiert, enthält Artefakte eines endlichen Systems und gehört zu einer ins Unendliche weggetunnelten Grenzfläche.

Aus dem Fluß der RG im Unterregime C lassen sich also zwei wesentliche Größen bestimmen. Zum Einen findet man im Einklang mit den Ergebnissen von Kapitel 3, daß die Verteilung $P_*(z)$ asymptotisch wie Gleichung (4.58) abfällt. Dieses Verhalten ist charakteristisch für das Unterregime C. Desweiteren beobachtet man den Exponenten $\tilde{\xi}$, der als Rauigkeitsexponent in diesem Unterregime verstanden werden kann. Er beschreibt das finite-size-Verhalten des Systems und wird daher mit den in Kapitel 3 vorgestellten Methoden nicht erfaßt.

4.4. MIGDAL-KADANOFF-RENORMIERUNG (MKR)

4.4.1. VERALLGEMEINERUNG DER RG AUF BELIEBIGE DIMENSIONEN

Bisher wurde eine RG betrachtet, die *exakt* ist und Systeme der Dimension $d = 1 + 1$ behandelt. Wir wollen nun diese RG auf beliebige d verallgemeinern. Dazu müssen wir allerdings Näherungen machen. Wir erhalten so eine approximative RG, die die Raumdimension d als reellen Parameter enthält. Der Spezialfall $d = 2$ ist die schon bekannte exakte RG (4.25).

In mehr als zwei Dimensionen läßt sich die Renormierungsprozedur nicht mehr einfach durch Quadrieren einer Transfermatrix durchführen. Die Idee der MKR

ist es, Bindungen zwischen Gitterpunkten zu verschieben [17]. Dies ist als eine Näherung anzusehen, die das Systemverhalten nur unwesentlich verändert.

Durch das Verschieben der Bindungen erreicht man nun, daß das Ausintegrieren der Freiheitsgrade wieder durch Multiplizieren zweier Transfermatritzen durchgeführt werden kann.

Natürlich müssen nach dem Ausintegrieren die z -Variablen mit dem Faktor b^ζ reskaliert werden. Der Rauigkeitsexponent ζ hat dabei im allgemeinen einen Wert $\zeta \neq 1/2$.

Die Renormierung erfolgt in 3 Schritten:

(i) Ausgangspunkt ist ein $d - 1$ dimensionales Gitter. Auf jedem Gitterpunkt, i , sitzt eine Variable ℓ_i die die Fluktuationen der Grenzfläche senkrecht zu dem Gitter beschreibt.

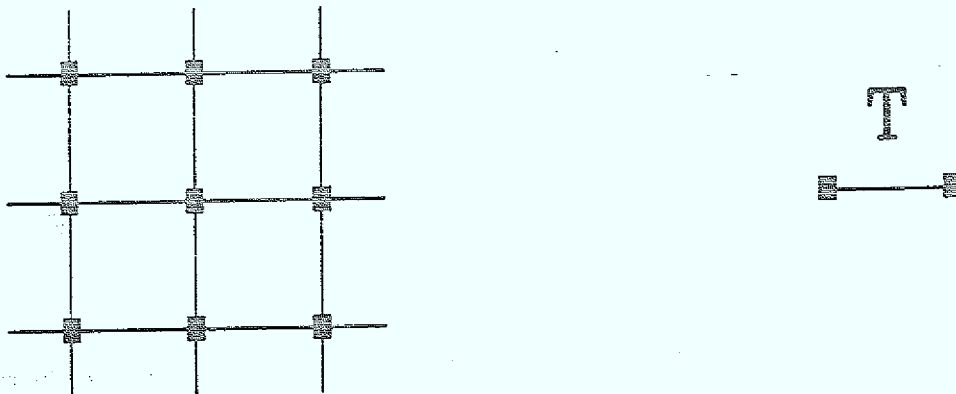
Die Zustandssumme Z kann dargestellt werden als

$$Z = \int \prod_i \prod_\mu d\ell_i T(\ell_i, \ell_{i+\mu}) \quad (4.59)$$

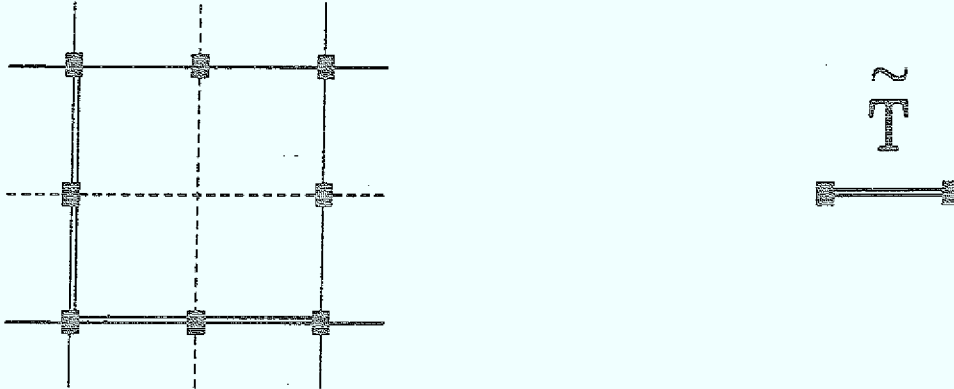
mit der Transfermatrix

$$T(\ell, \ell') = \exp\left\{-\frac{K}{2T}(\ell - \ell')^2 - \frac{1}{T}V(\ell, \ell')\right\}. \quad (4.60)$$

Dabei läuft der Index i über alle Gitterplätze, $i + \mu$ indiziert die zu i benachbarten Plätze. Zu beachten ist, daß das Produkt über μ nur über die Hälfte aller Nachbarplätze geführt werden muß. Dies kann für $d = 3$ in einem Diagramm veranschaulicht werden:



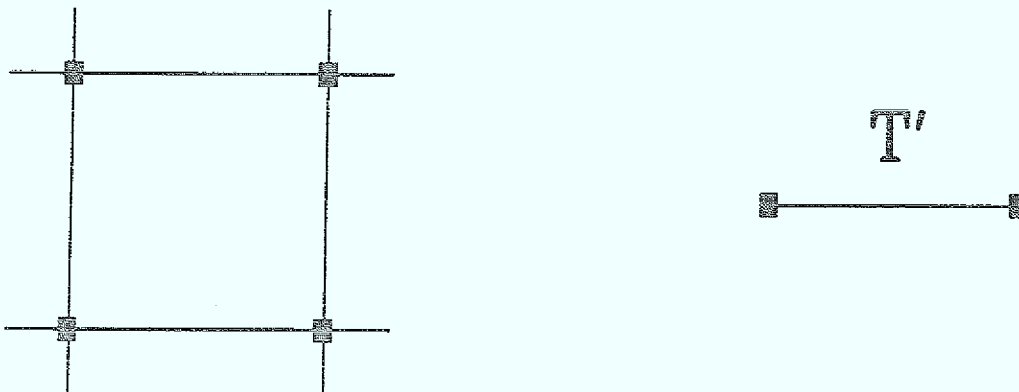
(ii) Jetzt wird jede zweite Bindung verschoben (gestrichelt), so daß die unverschobenen Bindungen mehrfach (genauer: 2^{d-2} -fach) vorhanden sind:



Da der Beitrag dieser Bindungen zur Gesamtenergie um den Faktor 2^{d-2} steigt, verändert sich die Transfermatrix $T(\ell, \ell')$ zu

$$\tilde{T}(\ell, \ell') = \exp\left\{-\frac{K}{2T} 2^{d-2} (\ell - \ell')^2 - 2^{d-2} \frac{1}{T} V(\ell, \ell')\right\}. \quad (4.61)$$

(iii) Die Variablen ℓ_i die jetzt ausintegriert werden müssen, haben nur noch zwei Nachbarn. Das Ausintegrieren dieser Freiheitsgrade erfolgt also wieder durch einfache Matrixmultiplikation $T' = \tilde{T} \cdot \tilde{T}$.



Das Gitter das man so erhält sieht genauso aus wie das Ausgangsgitter, die Gitterkonstante wurde aber mit einem Faktor $b = 2$ reskaliert. Gleichzeitig wurde

aus der Transfermatrix T die renormierte Matrix T' . Außerdem müssen die Variablen ℓ_i alle mit einem Faktor b^ζ reskaliert werden.

Die RG kann also dargestellt werden durch

$$T'(\ell, \ell'') = \int_{-\infty}^{\infty} d\ell' \tilde{T}(2^\zeta \ell, \ell') \tilde{T}(\ell', 2^\zeta \ell'') \quad (4.62)$$

mit

$$\tilde{T}(\ell, \ell') = \exp\left\{-2^{d-2}\left(\frac{K}{2T}(\ell - \ell')^2 + \frac{1}{T}V(\ell, \ell')\right)\right\}. \quad (4.63)$$

Untersucht man, wie K/T renormiert wird, so findet man

$$(K/T)' = 2^{2\zeta+d-3}(K/T). \quad (4.64)$$

Reskaliert man gemäß dem Rauigkeitsexponenten

$$\zeta = \frac{3-d}{2} \quad (4.65)$$

so bleibt K/T unter Renormierung fest, das heißt es existiert wieder der Gaußsche Fixpunkt $T^*(\ell, \ell') = \exp\{-\frac{K}{2T}(\ell - \ell')^2\}$.

Geht man über zu Variablen $z \equiv \sqrt{K/T} \ell$, so findet man mit Hilfe (4.62), (4.63) sowie (4.65) für die Renormierung des Potentials $U(z, z') \equiv V(\sqrt{T/K} z, \sqrt{T/K} z')/T$

$$U^{(N+1)}(z, z'') = -\ln \left\{ 2^{1/2-\zeta} \int_0^\infty \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} \exp\left\{-(2^{1/2-\zeta} z' - \frac{z+z''}{\sqrt{2}})^2 - G(z'|z, z'')\right\} \right\} \\ G(z'|z, z'') = 2^{1-2\zeta}(U^{(N)}(z', 2^\zeta z) + U^{(N)}(z', 2^\zeta z'')) \quad (4.66)$$

Wahlweise kann man natürlich wieder die Renormierung der Gewichtsfunktion $P(z, z') = \exp\{-U(z, z')\}$ betrachten.

Die RG (4.66) ist eine approximative MKR für beliebige Dimensionen d . Für den Fall $d = 2$ (d.h. $\zeta = 1/2$) erhält man die schon bekannte exakte RG (4.25) in zwei Dimensionen.

4.4.2. DAS ASYMPTOTISCHE VERHALTEN DER FIXPUNKTE

Das asymptotische Verhalten der Fixpunkte gibt wichtige Informationen für das Verständnis der Fixpunktstruktur. Das langreichweitige Verhalten definiert zudem die Klasse von Potentialen, die das IFR bilden. Von besonderem Interesse ist der Exponent τ , der das asymptotische Abfallen langreichweitiger Fixpunkte beschreibt.

Dieses Verhalten der Fixpunkte für große z läßt sich mit der in Kapitel 4.3.2 beschriebenen Sattelpunktnäherung ermitteln. Entsprechend zu Gleichung (4.35) erhält man auch hier in führender Ordnung eine Funktionalgleichung:

$$U^*(z, z'') = 2^{1-2\zeta} \{ U^*(2^{\zeta-1}(z + z''), 2^\zeta z) + U^*(2^{\zeta-1}(z + z''), 2^\zeta z'') \} \quad (4.67)$$

Gleichung (4.67) läßt sich jedoch nicht so einfach lösen wie (4.35). es ist jedoch möglich, die Lösung entlang der Diagonale $U^*(z, z)$ anzugeben. Setzt man nämlich $\hat{U}(z) = U^*(z, z)$ in (4.67) ein, so führt dies auf

$$\hat{U}(z) = 2^{2(1-\zeta)} \hat{U}(2^\zeta z) \quad (4.68)$$

mit der Lösung

$$U^*(z, z) = \frac{\rho}{z^\tau} \quad \text{mit} \quad \tau = 2 \frac{1-\zeta}{\zeta}, \quad (4.69)$$

oder auch $\tau = 2(d-1)/(3-d)$. Dieses Ergebnis bestätigt Werte von τ aus anderen RG's und Skalenargumente.

Das Verhalten der Fixpunkte in Wandnähe ist etwas subtiler und nicht leicht zu bestimmen. Sucht man nach Ansätzen, die die Fixpunktgleichung (4.67) für kleine z und z'' selbstkonsistent lösen, so führt nur die Wahl $U^*(z, z) = p(z^\beta + z'^\beta)$ zum Erfolg. Der Exponent β muß dabei aber den festen Wert $\beta = 2 - \frac{1}{\zeta} = \frac{1}{3} - \tau$ haben.

Dieser Ansatz ist auch konsistent mit numerischen Untersuchungen. Schließt man den Spezialfall $d = 2$ mit ein, so ergibt sich für kleine z

$$\begin{aligned} U^*(z, z') &\approx p(z^\beta + z'^\beta) \quad \text{mit} \quad \beta = 2 \frac{2-d}{3-d}; \quad d \neq 2 \\ U^*(z, z') &\approx -\frac{\sigma}{2}(\ln z + \ln z') \quad \text{für} \quad d = 2 \end{aligned} \quad (4.70)$$

Die beiden Parameter p und σ parametrisieren die Linie von Fixpunkten. Im Gegensatz zu σ darf p für $\beta < 0$ nicht negativ werden, da sonst eine exponentielle Divergenz an der Wand auftreten würde.

Die Ergebnisse (4.70) liefern starke Argumente für die Vermutung, daß der Fall $d = 2$; das heißt die exakte RG, eine besondere Situation ist. So führt z.B. die logarithmische Divergenz an der Wand zu dem Potenzgesetz der Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_*(z) \sim z^\sigma$, wie es charakteristisch für Unterregime C ist. Im Falle $d \neq 2$ ist das Verhalten an der Wand immer exponentiell, das heißt $P(z, z) \sim \exp\{-pz^\beta\}$.

Es kann also davon ausgegangen werden, daß das Unterregime C in der MKR nur in $d = 2$ auftritt. Es ist dabei nicht klar, ob das Verschwinden dieses Unterregimes eine Folge der Approximationen ist, oder ob es wirklich nur in zwei Dimensionen existiert.

Gewöhnlich liefern aber Migdal-Kadanoff-Renormierungsverfahren auch in der Nähe der "exakten Dimension" (hier $d = 2$) gute Resultate, was Entwicklungen um diese Dimension interessant macht ("2 + ϵ -Entwicklung").

4.4.3. FIXPUNKTE UND SKALENINDIZES

Versucht man numerisch, Fixpunkte in Dimensionen $d > 2$ zu bestimmen, so stößt man auf erhebliche Schwierigkeiten.

Zum Einen benötigt man eine wachsende Zahl von Stützstellen zum Abspeichern des Potentials, da das Minimum von $U^*(z, z)$ zu größeren z -Werten wandert und gleichzeitig die Singularität an der Wand schärfer wird. Außerdem ist es für $d \neq 2$ nicht mehr möglich, Fixpunkte mit Hilfe einer einfachen eindimensionalen Gleichung zu bestimmen.

Diese Probleme führen dazu, daß es oberhalb von $d = 2.5$ kaum mehr möglich ist, selbst stabile Fixpunkte mit ausreichender Genauigkeit zu bestimmen. Für Dimensionen $d < 2.5$ lassen sich Fixpunkte bestimmen, der Rechenaufwand ist jedoch erheblich. Außerdem konvergiert die Iteration an der Wand nur langsam gegen den Fixpunkt, so daß der Parameter p für das Verhalten bei kleinen z nur ungenau ermittelt werden kann.

d	y	d	y
1.5	0.414	2.1	0.506
1.6	0.463	2.2	0.508
1.7	0.490	2.3	0.502
1.8	0.497	2.4	0.496
1.9	0.497	2.5	0.470
2.0	0.500		

Tab. 1: Skalenindizes y der kurzreichweitigen Fixpunkte ($\rho = 0$) in Abhängigkeit der Dimension d .

Für die Dimension $d = 2.2$ wurden einige Fixpunkte bestimmt. Sie zeigen, daß eine Linie von Fixpunkten mit einer parabolischen Struktur existiert. Die Frage aber, ob es auch hier ein Unterregime C gibt, kann durch diese Numerik nicht beantwortet werden.

Für die kurzreichweitigen Fixpunkte ($\rho = 0$) wurde außerdem der Skalenindex für Dimensionen $1.5 \leq d \leq 2.5$ bestimmt. Dazu wurde die im Kapitel 4.3.3. beschriebene Methode verwendet. Die gewonnenen Werte von y sind in Tabelle 1 aufgelistet.

Da der Wert von y für $d = 2$ vom exakten Wert $y = 1/2$ um weniger als 0.1% abweicht, kann davon ausgegangen werden, daß auch die anderen Werte sehr genau sind (Fehler $\leq 1\%$).

Von besonderem Interesse ist die Frage, wie sich die MKR verhält, wenn man sich der Dimension $d = 3$ nähert. Erwartet wird hier die Existenz von Fixpunkten mit einer wachsenden Zahl von relevanten Skalenindizes. Diese Fixpunkte sollten auch mehrere Potentialminima und -maxima aufweisen [26] [27].

Leider kann hierzu mit Hilfe der MKR bisher noch keine Aussage gemacht werden.

5. Zusammenfassung der Ergebnisse

In dieser Arbeit werden effektive Grenzflächenmodelle in niedrigen Dimensionen betrachtet und das Entbinden der fluktuierenden Grenzfläche von einer festen Wand in lang- und kurzreichweitigen Potentials untersucht.

Ausgangspunkt sind dabei Modelle in $d = 1 + 1$ Dimensionen die durch Transfermatrix- sowie Renormierungsgruppen(RG)-Methoden untersucht werden. Die Renormierungsgruppe läßt sich dann auch für Modelle in beliebiger Raumdimension verallgemeinern.

Die Struktur von Benetzungsübergängen, die durch Transfermatrixmethoden für das SOS-Modell in $d = 1 + 1$ bei speziellen Wechselwirkungspotentialen gefunden werden, stimmen mit bekannten Resultaten eines Kontinuumsmodells (Schrödingergleichung) überein. Ausgehend vom Gaußschen Modell kann eine exakte funktionale RG des Potentials definiert werden. Diese zeigt dann, daß dieses Verhalten tatsächlich für verschiedene Modelle *universell* gültig ist.

Das kritische Verhalten bei Benetzungsübergängen hängt allein von dem asymptotischen Verhalten des Wechselwirkungspotentials $U(z)$ ab. Dabei ist z eine dimensionslose Größe, die den Abstand der Grenzfläche von einer Wand angibt. Es werden vier verschiedene Skalenregimes unterschieden: (i) ein Molekularfeld Regime (MFR), sowie (ii) ein Regime schwacher Fluktuationen (WFR); beide für große d und genügend langreichweitige Potentiale. Desweiteren ein Regime intermediärer Fluktuationen (IFR) für Potentiale, die mit einem dimensionsabhängigen Exponenten $\tau = 2(d-1)/(3-d)$ wie $\sim 1/z^\tau$ abfallen. Dieses Regime enthält eine komplizierte Struktur dreier Unterregimes (A-C). Die Struktur des Phasendiagramms ist in Abb. 8 angegeben. (iv) Alle Potentiale, die schneller als $\sim 1/z^\tau$ auf Null abfallen gehören zum Regime starker Fluktuationen (SFR).

Die exakte RG renormiert ein verallgemeinertes Wechselwirkungspotential $U(z, z')$. Im Raum dieser Potentiale existiert eine ganze *Linie von Fixpunkten* der RG. Diese Fixpunkte $U^*(z, z')$ beschreiben Benetzungsübergänge im IFR und im SFR. Alle diese Fixpunkte haben die Eigenschaft, nur Funktionen des Produkts der beiden Variablen z und z' zu sein: $U^*(z, z') = \bar{U}(z \cdot z')$. Dies ist eine unerwartete Symmetrie.

Die Fixpunktlinie läßt sich im Funktionenraum so parametrisieren, daß sie in einem zweidimensionalen Parameterraum eine exakt parabolische Struktur zeigt. Diese parabolische Linie besteht aus zwei Ästen. Einem ins Unendliche reichenden Parabelast, bestehend aus stabilen Fixpunkten. Diese beschreiben den Zustand einer ungebundenen Grenzfläche. Am Parabelscheitel, an dem beide Äste sich treffen, befindet sich ein marginaler Fixpunkt, der Phasenübergänge unendlicher Ordnung des Unterregimes A beschreibt. Ein zweiter Ast, der aus instabilen Fixpunkten besteht, gehört zu Benetzungsübergängen zweiter Ordnung (Unterregime B). Dieser Ast hört an einem speziellen Endpunkt plötzlich auf. Als analytische Fortsetzung der Fixpunktlinie schließt sich nach diesem Punkt noch eine Separatrix an. Hier finden Phasenübergänge erster Ordnung mit einem *ungewöhnlichen Skalenverhalten* (Unterregime C) statt.

Nähert man sich dem Endpunkt entlang der Fixpunktlinie, so konvergieren die Fixpunkte, bis auf eine Singularität an der Wand, gegen einen Fixpunkt auf dem gegenüberliegenden Parabelast. Der Endpunkt berührt also fast die Fixpunktlinie wieder und es existiert in diesem Sinne ein *geschlossener Ring* im Funktionenraum.

Der RG-Fluß hat eine exakt parabolische Struktur. Da die RG keine Approximationen enthält, beschreibt ihr Fluß im Gegensatz zu früheren Renormierungsverfahren auch das Unterregime C. Wegen des Zusammenbruchs des einfachen Skalenverhaltens mit nur einer Längenskala gibt es dort jedoch keine Fixpunkte, sondern eine Separatrix. Aus dem RG-Fluß ergibt sich für dieses Unterregime das langreichweitige *Potenzverhalten der Wahrscheinlichkeitsverteilung* der Grenzfläche in Übereinstimmung mit früheren Lösungen spezieller Modelle. Desweiteren gibt der RG-Fluß Auskunft über finite-size-Verhalten des Systems. Im Zusammenhang mit diesem finite-size-Verhalten wird man auf die Definition eines Rauigkeitsexponenten $\tilde{\zeta}$ am Übergangspunkt geführt, dessen Wert von $\zeta = 1/2$ abweicht. Der Wert dieses Exponenten $\hat{\zeta}$ läßt sich dabei aus Systemparametern explizit berechnen und es gilt $1/4 < \hat{\zeta} < 1/2$.

Das Verfahren wurde auch auf Dimensionen $d \neq 2$ verallgemeinert. Mit Hilfe einer Methode von Migdal und Kadanoff, bei der Bindungen verschoben werden, erhält man eine verallgemeinerte RG, die d als reellen Parameter enthält.

Diese RG enthält auch für $d \neq 2$ eine Linie von Fixpunkten. Im Gegensatz zu

dem logarithmischen Verhalten der Fixpunkte in $d = 2$ an der Wand, zeigen die Fixpunkte für $d \neq 2$ dort eine Potenzsingularität. Hieraus kann man schließen, daß das Unterregime C nur in dem Sonderfall $d = 2$ existiert. Geht man davon aus, daß die approximative Migdal-Kadanoff-Renormierung die Physik in der Nähe der "exakten" Dimension noch richtig beschreibt, so kommt man auch hierdurch zu dem Schluß, daß das Verschwinden des Unterregimes C für $d \neq 2$ allgemeine Gültigkeit hat. Danach ändert sich das Systemverhalten in Abhängigkeit von der Raumdimension bei $d = 2$ sprunghaft.

Eine experimentelle Verifizierung des Verhaltens in zwei Dimensionen sollte bei Adsorbaten an Oberflächen-Stufen möglich sein, wesentliches Ziel und Ergebnis der gegenwärtigen Arbeit war jedoch die Zusammenfassung von Einzelstudien unter ein übergeordnetes Renormierungskonzept.

Anhang A. Entwicklung der Fixpunkte an der Wand

Gleichung (4.41) für die Funktionen $\bar{U}(z^2)$ läßt sich mit $\bar{P}(z^2) = \exp(-\bar{U}(z^2))$ auch schreiben als

$$\bar{P}\left(\frac{1}{2}z^2\right) = e^{-z^2} \int_0^\infty \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} e^{-z'^2} e^{2z'z} \bar{P}^2(zz') \quad (A.1)$$

Das Integral (A.1) soll für kleine z berechnet werden. Hierzu setzt man als Ansatz für $\bar{U}$ in (A.1)

$$\bar{P}(\eta) = \eta^{\sigma/2} f(\eta) \quad (A.2)$$

ein, wobei $f(\eta)$ in eine Taylorreihe entwickelbar sein soll

$$f(\eta) = C_0 + C_1\eta + C_2\eta^2 \dots \quad (A.3)$$

Entwickelt man die Exponentialfunktion in (A.1) so erhält man

$$f\left(\frac{1}{2}z^2\right) = e^{-z^2} 2^{\sigma/2} \int_0^\infty \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} e^{-z'^2} z'^{\sigma} \left[1 + 2z'z + \dots + \frac{1}{n!}(2zz')^n\right] f^2(zz') \quad (A.4)$$

Mit der Entwicklung (A.3) in (A.4) treten Integrale der Form

$$I(\sigma, m) = \frac{2^{\sigma/2}}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dz' e^{-z'^2} z'^{\sigma+m} \quad (A.5)$$

auf. Diese lassen sich mit Hilfe der Gammafunktion $\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt$ darstellen:

$$I(\sigma, m) = \frac{\Gamma\left(\frac{\sigma+m+1}{2}\right)}{2^{1-\sigma/2}\pi^{1/2}} \quad (A.6)$$

Wenn man auch die Exponentialfunktion vor dem Integral entwickelt, erhält man aus (A.4) ein Gleichungssystem für die C_i . Es läßt sich beginnend mit C_0 rekursiv lösen. Mit $I_m \equiv I(\sigma, m)$ erhält man

$$\begin{aligned} C_0 &= \frac{1}{I_0} & C_1 &= -\frac{1}{I_0} \\ C_2 &= 1/4 \left\{ \frac{2I_2 + I_0}{I_2 I_0} \right\} \\ C_3 &= -1/12 \left\{ \frac{2I_2 + 3I_0}{I_2 I_0} \right\} \\ C_4 &= -1/96 \left\{ \frac{-4I_4 I_2^2 - 12I_4 I_2 I_0 + 3I_4 I_0^2 - 6I_0 I_2^2 - 3I_0^2 I_2}{I_0 I_2^2 I_4} \right\} \\ C_5 &= -1/480 \left\{ \frac{4I_4 I_2^2 - 20I_4 I_2 I_0 + 15I_0^2 I_2 + 30I_2^2 I_0 + 15I_4 I_0^2}{I_0 I_2^2 I_4} \right\} \end{aligned} \quad (A.7)$$

Diese Entwicklung der Fixpunkte

$$\overline{P}_\sigma(z^2) = z^\sigma(C_0 + C_1 z^2 + \dots) \quad (A.8)$$

läßt sich in beliebige Ordnung fortsetzen. Die analytisch bekannten Fixpunkte $U_\pm$ werden von (A.7-8) in allen Ordnungen beschrieben.

Anhang B. Eine Alternative zur Sattelpunktsnäherung

Bestimmt wird das asymptotische Verhalten für große z der Lösungen von

$$e^{-\bar{U}(z)} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} e^{-(z' - \sqrt{2z})^2 - 2\bar{U}(\sqrt{2z} z')} \quad (B.1)$$

Hierbei ist die Wand nicht explizit berücksichtigt, da sie das asymptotische Verhalten nicht beeinflußt.

Für kleine $\bar{U}(z)$, d.h. große z können die Exponentialfunktion entwickelt werden

$$1 - \bar{U}(z) + \frac{1}{2}\bar{U}^2(z) \dots = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} e^{-(z' - \sqrt{2z})^2} \{1 - 2\bar{U}(\sqrt{2z} z') + 2\bar{U}^2(\sqrt{2z} z') \dots\} \quad (B.2)$$

Es müssen also Integrale der Form

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} e^{-(z' - \sqrt{2z})^2} \bar{U}(\sqrt{2z} z') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} e^{-z'^2} \bar{U}(\sqrt{2z} z' + 2z) \quad (B.3)$$

berechnet werden. Entwickelt man $\bar{U}(x)$ an der Stelle $x = 2z$ in eine Taylorreihe, so gilt mit $\partial \bar{U} \equiv \frac{d}{dx} \bar{U}(x)$

$$\bar{U}(\sqrt{2z} z' + 2z) = e^{\sqrt{2z} z' \partial} \bar{U}(2z) \quad (B.4)$$

Durch formale Integration erhält man

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz'}{\sqrt{\pi}} e^{-z'^2 + z' \sqrt{2z} \partial} = e^{\frac{z^2}{2} \partial} \quad (B.5)$$

Aus (B.2) wird somit

$$1 - \bar{U}(z) + \frac{1}{2}\bar{U}^2(z) \dots = e^{\frac{z^2}{2} \partial} \{1 - 2\bar{U}(2z) + 2\bar{U}^2(2z) \dots\} \quad (B.6)$$

mit $e^{z^2/2\partial} \approx 1 + \frac{z^2}{2}\partial + \frac{z^4}{8}\partial^2 \dots$

Geht man mit dem Ansatz

$$\bar{U}(z) = \frac{\rho}{z} + \frac{\rho'}{z^2} + \frac{\rho''}{z^3} \dots \quad (B.7)$$

in Gleichung (B.6), so sieht man, daß (B.7) Lösung von (B.6) ist falls gilt

$$\begin{aligned} \rho' &= \frac{1}{2}\rho \\ \rho'' &= 1/2\rho - 1/6\rho^2 \end{aligned} \quad (B.8)$$

Dabei ist ρ ein freier Parameter, der die Lösungen von (B.1) in allen Ordnungen festlegt.

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] R. Lipowsky, Habilitationsschrift an der Ludwig Maximilians Universität München (1987) (veröffentlicht durch KFA Jülich als Jül-Spez-438)
- [2] S. Dietrich, Wetting Phenomena, Phase Transitions and Critical Phenomena, herausgegeben von C. Domb und J. Lebowitz, Vol. 12
- [3] R. Lipowsky, Physica Scripta T 29, 259 (1989)
- [4] R. Lipowsky und M. E. Fisher, Phys. Rev. B 36, 2126 (1987)
- [5] R. Lipowsky und T. M. Nieuwenhuizen, J. Phys. A 21, L89 (1988)
- [6] C. Jayaprakash, C. Rottman und W.F. Saam, Phys. Rev. B 30, 6549 (1984)
- [7] R. Lipowsky und M. E. Fisher, Phys. Rev. Lett. 57, 2411 (1986)
- [8] R. Lipowsky, Phys. Rev. Lett. 62, 704 (1989)
- [9] R. Zia, Scottish Universities Summer School in Physics, herausgegeben von K. Bowler und A. McKane (1983)
- [10] T. W. Burkhardt, J. Phys. A 14, L63 (1981)
- [11] G. Parisi, Statistical Field Theory S.221 ff., Addison-Wesley (1988)
- [12] M. Abramowitz und I. A. Stegun, Handbook of mathematical functions, Dover Publications, New York (1972)
- [13] V. Privman und N. M. Švrakić, Phys. Rev. B 37, 5974 (1988)
- [14] R. Lipowsky, Europhys. Lett. 7, 255 (1988)
- [15] D. A. Huse, Phys. Rev. Lett. 58, 176 (1987)
- [16] D. M. Kroll und G. Gompper, Phys. Rev. B 39, 433 (1989)
- [17] L. P. Kadanoff, Ann. Phys. 100, 359 (1976)
- [18] H. van Haeringen, J. Math. Phys. 19, 2171 (1978)
- [19] R. K. P. Zia, R. Lipowsky und D. M. Kroll, Am. J. Phys. 56, 160 (1988)
- [20] V. Privman und M. E. Fisher, J. Stat. Phys. 33, 385 (1983)
- [21] S.-K. Ma, Modern Theory of critical phenomena, Benjamin/ Cummings advanced book program (1976)
- [22] R. Lipowsky, Dissertation, Universität München (1982)
- [23] D. R. Nelson und M. E. Fisher, Ann. Phys. 91, 226 (1975)
- [24] C. M. Bender und S. A. Orszag, Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers, S. 280 ff
- [25] W. Press, B. Flannery, S. Teukolsky und W. Vetterling, Numerical Recipes, Cambridge University Press (1986)
- [26] F. David und S. Leibler, wird veröffentlicht
- [27] S. Grotehans und R. Lipowsky, wird veröffentlicht

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die am Zustandekommen dieser Arbeit beteiligt waren:

Mein besonderer Dank gilt Prof. Reinhard Lipowsky für die interessante und vielseitige Aufgabenstellung, sowie die gute Betreuung meiner Arbeit.

Herrn Prof. H. Müller-Krumbhaar danke ich für die stetige Unterstützung, die wesentlich zum Fortgang dieser Arbeit beitrug.

Dr. Daniel Kroll war ein hilfsbereiter Ansprechpartner und stets zu fruchtbaren Diskussionen bereit.

Für die sehr angenehme Arbeitsatmosphäre möchte ich mich bei allen Mitarbeitern des Instituts Theorie III bedanken.

Ein besonderer Dank gilt Frau Luise Gerken für ihre tatkräftige Unterstützung beim Schreiben dieser Arbeit.

Schließlich danke ich dem Institut für Festkörperforschung und der Kernforschungsanlage Jülich für die guten Arbeitsmöglichkeiten und die finanzielle Unterstützung.

