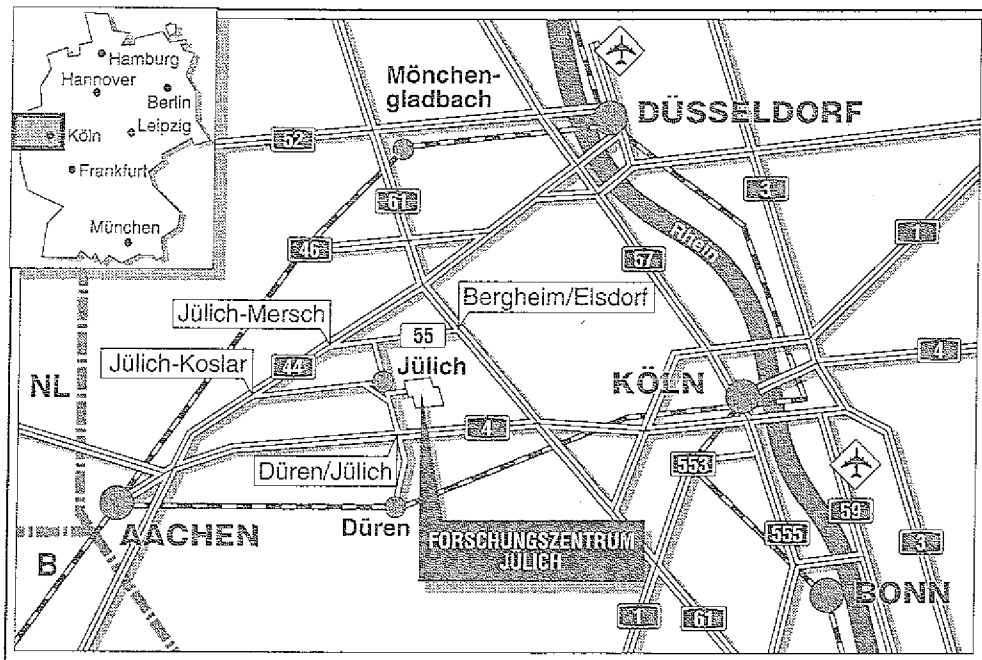


Institut für Festkörperforschung

Kritisches Verhalten von Grenzflächen und Membranen

Stefan Grotehans



Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 2672

ISSN 0366-0885

Institut für Festkörperforschung Jülich-2672

D 19 (Diss. Universität München)

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek
Postfach 1913 · D-5170 Jülich · Bundesrepublik Deutschland
Telefon: 02461/61-6102 · Telefax: 02461/61-6103 · Telex: 833556-70 kfa d

1. The first part of the paper discusses the importance of the study of the history of the world, and the role of the world in the development of the human race. It is stated that the world is a vast and complex system, and that the study of its history is essential for understanding the present and the future. The author argues that the world is a dynamic and ever-changing entity, and that the study of its history is a continuous process. The paper then discusses the role of the world in the development of the human race, and the importance of the study of the history of the world in understanding the human condition.

2. The second part of the paper discusses the role of the world in the development of the human race, and the importance of the study of the history of the world in understanding the human condition. It is stated that the world is a vast and complex system, and that the study of its history is essential for understanding the present and the future. The author argues that the world is a dynamic and ever-changing entity, and that the study of its history is a continuous process. The paper then discusses the role of the world in the development of the human race, and the importance of the study of the history of the world in understanding the human condition.

3. The third part of the paper discusses the role of the world in the development of the human race, and the importance of the study of the history of the world in understanding the human condition. It is stated that the world is a vast and complex system, and that the study of its history is essential for understanding the present and the future. The author argues that the world is a dynamic and ever-changing entity, and that the study of its history is a continuous process. The paper then discusses the role of the world in the development of the human race, and the importance of the study of the history of the world in understanding the human condition.

Stefan Grotehans

Stefan Grotehans

Summary

The phase transition of a manifold from a state bound to a surface to an unbound state is considered in this work. The manifold feels an effective external potential which is motivated by the respective physical system.

A general classification scheme, based on renormalization group calculations, of this unbinding transition is presented. Within this scheme the phase transition depends on the external potential and on the lateral dimension of the manifold. In the framework of an approximate renormalization calculation one can treat membranes, whose conformations are governed by the curvature energy, and interfaces with a finite surface tension simultaneously. The only parameters are the lateral dimension and the roughness of the respective manifold.

Two classes of potentials were investigated. Potentials of the first class contain a hard wall. This hard wall prevents the use of perturbation or linearization methods. However, the approximate renormalization group is nonlinear and the conditions of a hard wall can be considered. It turns out that the limit $d \rightarrow 3$ for interfaces is nonanalytic, since the renormalization group has no fixed points at $d = 3$ anymore where $d = 3$ is just the dimension in which the interface is marginal i.e. logarithmically rough.

In $d > 3$ one expects mean field behaviour of the phase transition. In contrast to bulk critical phenomena one finds a nonanalytic behaviour of the renormalization group when the upper critical dimension is reached. This shows up in a complex bifurcation structure of the fixed points. This limit is studied in detail for wetting and adhesion phenomena, leading to the concept of 'drifting fixed points'.

Symmetrical potentials are the second class which are considered. The order of the phase transition for this class is also investigated. Motivated by the calculations for potentials with a hard wall the limit $d \rightarrow 3$ is again studied. An analog bifurcation structure as for unbinding is found, but now one can use linearized methods to derive exact results. A starting point for the investigation of the symmetric potentials is an exact transfer matrix calculation in $d = 1 + 1$ which serves also as a test for the approximate renormalization group.

Zusammenfassung

Der Phasenübergang einer Fläche von einem gebundenen zu einem freien Zustand steht im Mittelpunkt dieser Arbeit. Die Fläche befindet sich dabei in einem äußeren effektiven Potential, das durch das entsprechende physikalische System motiviert ist. Dabei wird der Schwerpunkt auf eine generelle Klassifikation des Phasenüberganges in Abhängigkeit des äußeren Potentials und der lateralen Dimension der Fläche gelegt. Das ist mit Hilfe von Renormierungsmethoden möglich: Im Rahmen einer approximativen Renormierungs-Rechnung können Membranen, deren Konformation durch die Krümmungsenergie bestimmt wird und Grenzflächen, die eine endliche Oberflächenspannung haben, auf analoge Weise behandelt werden. Dabei gehen die laterale Dimension und die Rauigkeit der jeweiligen Fläche ein.

Zwei Klassen von Potentialen werden untersucht. Die eine Klasse ist durch das Auftreten einer harten Wand im Potential gekennzeichnet. Die harte Wand bewirkt, daß keine perturbativen oder linearisierten Verfahren möglich sind. Die verwendete approximative Renormierungsgruppe dagegen ist nichtlinear und kann an die Randbedingung einer harten Wand angepaßt werden. Im Rahmen dieser Rechnungen zeigt sich, daß der Limes $d \rightarrow 3$ für Grenzflächen nicht analytisch ist. Der Grund ist, daß für $d = 3$ die Renormierungsgruppe keine Fixpunkte mehr liefert, wobei $d = 3$ aber gerade die Dimension ist, in der die Grenzfläche marginal, d.h. logarithmisch rauh ist. Für $d > 3$ erwartet man dann Mean-Field Verhalten des Phasenüberganges. Im Gegensatz zu volumenkritischen Phänomenen findet man hier ein nichtanalytisches Verhalten der Renormierungsgruppe bei Annäherung an die obere kritische Dimension, was sich in einer komplexen Bifurkationsstruktur der Fixpunkte zeigt. Für Benetzungs- bzw. Adhäsionsphänomene wird der Grenzübergang im Detail studiert. Dabei wird man auf das Konzept der driftenden Fixpunkte geführt.

Die symmetrischen Potentiale bilden die andere Klasse von Potentialen, die betrachtet wird. Auch hier wird die Ordnung des Aufrauungsüberganges für verschiedene Potentialtypen untersucht. Motiviert durch die Rechnungen zu Potentialen mit einer harten Wand wird auch für diese Systeme der Grenzfall $d \rightarrow 3$ studiert. Eine analoge komplexe Bifurkationsstruktur wie bei der Entbindung wird gefunden, allerdings lassen sich nun linearisierte Verfahren anwenden, die es ermöglichen, exakte analytische Aussagen zu machen. Ausgangspunkt für die Untersuchung von symmetrischen Potentialen sind exakte Transfer-Matrix Rechnungen in $d = 1 + 1$, die auch als Test für die approximative Renormierungsgruppe dienen.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	3
1.1	Die Skaleninvarianz der rauhen Fläche	12
1.1.1	Effektiver Hamiltonian für freie Grenzflächen und Membranen	13
1.2	Flexible Fläche in einem äußerem Potential	16
1.2.1	Potentiale mit einer harten Wand	17
1.2.2	Symmetrische Potentiale	18
1.2.3	Effektiver Hamiltonian für Gauß'sche Polymere	19
1.3	Einfluß von Fluktuationen auf den Phasenübergang	20
2	Entbindungsübergänge von Membranen und Grenzflächen	24
2.1	Effektives Grenzflächenmodell und funktionale Renormierung	24
2.1.1	Bifurkationsstruktur und Universalitätsklassen für Adhäsions- und Benetzungsübergänge	26
2.1.2	Die Ordnung des Adhäsionsübergangs für reale Membranen	36
2.1.3	Membranen mit lateraler Spannung und der Limes für großes τ	37
2.2	Der Limes für große τ : Driftende Fixpunkte	38
2.3	Driftende Fixpunkte für $\tau = \infty$	45
3	Aufrauhungsübergänge von niedrigdimensionalen Flächen	49
3.1	Aufrauhung von Grenzflächen in $d = 1 + 1$	50
3.1.1	Transfer-Matrix Formalismus	50
3.1.2	Kasten-Potential	51
3.1.3	Potentiale mit langreichweitigem Potenzabfall	52
3.1.4	Potentiale mit $1/l^2$ -Abfall	52
3.2	Lineare Renormierung von symmetrischen Potentialen	55
3.2.1	Lineare Rekursions-Gleichungen	55
3.2.2	Matching-Prozedur	56
3.2.3	Ein Kurzreichweitiges Gauß'sches Potential	57

3.2.4	Langreichweitige Potentiale	58
3.2.5	Störungen um den trivialen Fixpunkt	58
3.2.6	Wettbewerb zwischen kurzreichweitigen- und langreichweitigen Potentiale	59
3.3	Nichtlineare Renormierung von symmetrischen Potentiale	61
3.3.1	Flußgleichungen und Randbedingungen für Aufrauungsübergänge	61
3.3.2	Der Fall $\tau = 2$	62
3.3.3	Bifurkationen von Fixpunkten	65
3.3.4	Der Limes kleiner Werte von τ	70
3.4	Aufrauung von Grenzflächen in drei Dimensionen	72
4	Ausblick/Zusammenfassung	74
A	Anhang: Potentiale mit $1/l^2$ Abfall in $d = 2$ Dimensionen	77
B	Anhang: Matching Prozedur für ein langreichweitiges Potential mit zwei Parametern	79

1 Einführung

Grenzflächen, Membranen, oder Polymere sind Objekte, die thermisch um ihren Gleichgewichtszustand fluktuieren können, da sie oft weich und flexibel sind. Die thermischen Fluktuationen führen zu einer Vielzahl von kritischen Phänomenen und sind der Grund dafür, daß physikalische Phänomene wie Benetzung, Adsorption oder Adhäsion nichttriviale Eigenschaften zeigen [60, 54, 69, 23, 17]. Im folgenden werden diese unterschiedlichen Phänomene beschrieben und schließlich unter einem gemeinsamen Gesichtspunkt zusammengefaßt.

Betrachten wir zuerst die *Benetzung*. Eine gasförmige Volumenphase α sei in Gleichgewicht mit einer festen Volumenphase γ . Zwischen der α -Phase und der γ -Phase kann sich eine dünne, benetzende Schicht einer dritten Phase β befinden, die die γ -Phase mit einem dünnen Flüssigkeitsfilm benetzt, siehe Abb. 1.1.a. Im Fall der *vollständigen* Benetzung wird der Flüssigkeitsfilm kontinuierlich dicker, wenn das System sich der Dreiphasenkoexistenz nähert. Gleichzeitig wachsen die Fluktuationen der α - β -Grenzfläche an, was sich in einer zunehmenden Rauigkeit des Films zeigt. Am Tripelpunkt schließlich ist die Filmdicke unendlich und die β -Phase wird makroskopisch [53, 73]. Ein System zeigt *unvollständige* Benetzung, wenn die Filmdicke bei Annäherung an den Tripelpunkt lediglich gegen einen endlichen Wert anwächst [53, 73]. Je nachdem ob die Filmdicke kontinuierlich oder diskontinuierlich nach unendlich anwächst, wird zwischen einem Benetzungsübergang erster- oder zweiter Ordnung unterschieden. Durch die Fluktuationen der Grenzfläche erhält der Phasenübergang nichttriviale kritische Eigenschaften. Die Undulationen der Grenzfläche sind nicht flächenerhaltend und werden durch die Oberflächenspannung Σ der Grenzfläche bestimmt. Die Oberflächenspannung Σ ist die freie Energie pro Einheitsfläche; sie gibt die Arbeit an, die zum Aufbau von neuer Fläche geleistet werden muß. Bei einer Flüssig-Gas-Grenzfläche entsprechen die Fluktuationen den bekannten Kapillarwellen.

Ein Beispiel für ein System in $d = 1 + 1$ Dimensionen, das *Benetzung* zeigt, ist das zweidimensionale Ising Modell mit nächsten Nachbarkopplungen J_B und einem Rand bei $z = 0$ mit schwächeren Kopplungen $J_S < J_B$ [1, 5, 15]. Durch

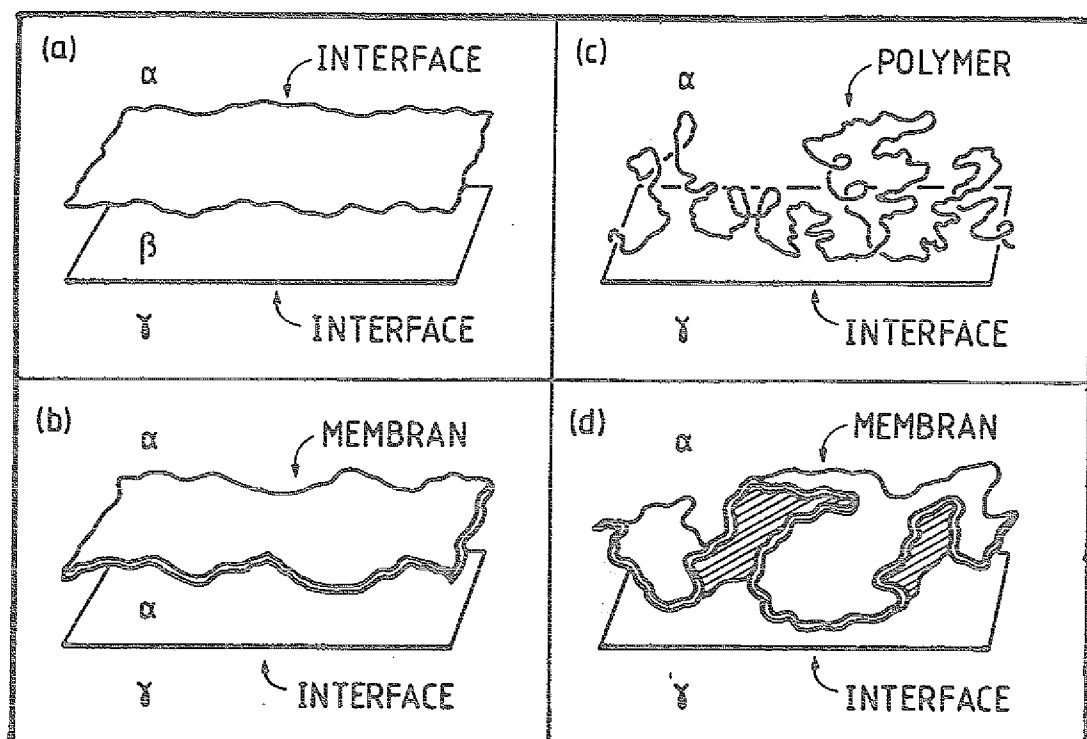


Abbildung 1.1: Geometrie bei: (a) Benetzung, (b) Adhäsion einer orientierten Membran, (c) Adsorption eines Polymers und (d) Adsorption einer gekrümmten Membran.

entgegengesetzte Randbedingungen an die Spins wird eine Grenzfläche in das System gebracht, siehe Abb. 1.2. Bei $T = 0$ wird die Energie minimiert, wenn die Grenzfläche auf dem Rand sitzt, während für endliches T die Grenzfläche anfängt, Exkursionen vom Rand zu machen, um ihre Konfigurations-Entropie zu erhöhen. Damit verbunden ist eine Zunahme der Rauigkeit. Bei einer kritischen Temperatur T_* schließlich ist die mittlere Auslenkung unendlich, die Grenzfläche ist entbunden und hat die Rauigkeit einer freien Grenzfläche.

In einer Monte Carlo Simulation wird gezeigt, daß bei der Adsorption von Atomen an gestuften Oberflächen ebenfalls Benetzung auftreten kann [3]. Die Geometrie des Systems ist in Abb. 1.3.a gezeigt. Man sieht Terrassen der Ausdehnung $L \times M$, auf die Atome adsorbieren können. Die Adatome befinden sich im chemischen Gleichgewicht mit ihrer Gasphase. Aus der Anzahl der eingegangenen Bindungen eines Adatoms mit dem Substrat folgt: Das Anlagern eines Adatoms an die rechte Stufe der Terrasse ist energetisch günstiger als das Adsorbieren auf dem Volumen der Terrasse, wogegen es energetisch ungünstiger ist, wenn sich das Adatom an die linke Stufe der Terrasse anlagert. Durch diese "Randbedingungen" an die Adatome wird ein Benetzungsübergang induziert. In Abb. 1.3.b sieht man die Bedeckung einer Terrasse für drei verschiedene Temperaturen. Für kleine Temperaturen bildet sich eine glatte, eindimensionale Grenzfläche (Grenzlinie) zwischen bedecktem und unbedecktem Substrat

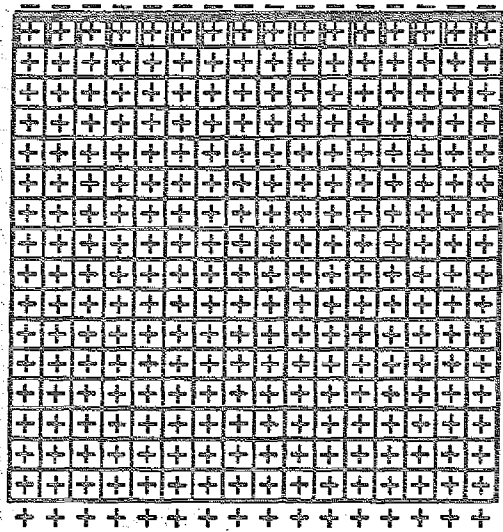
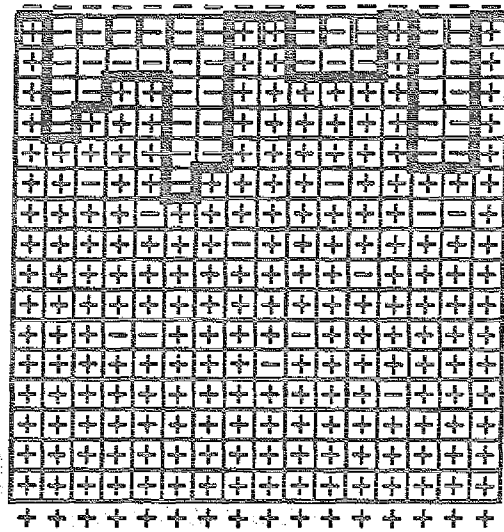
(a) $T = 0$ (b) $T > 0$ 

Abbildung 1.2: Das zweidimensionale Ising Modell, mit einer Randlinie von schwachen Kopplungen. Durch entgegengesetzte Randbedingungen an die Spins wird in das System eine Grenzfläche gebracht. Für $T = 0$ ist die Grenzfläche glatt, wogegen sie für $T > 0$ Exkursionen vom Rand macht.

parallel zur Terrassenstufe aus. Die mittlere Bedeckung ist ungefähr 0 oder 1, jeweils für einen Ort vor oder hinter der Grenzlinie. Für zunehmende Temperaturen wird die Grenzlinie rauher und bei einer kritischen Temperatur T_W schließlich (unteres Bild) ist die mittlere Bedeckung $1/2$ auf der gesamten Terrasse: die Grenzlinie ist rau. Da die Größen L und M endlich sind, hängt die Temperatur T_W von den Randbedingungen an den Terrassenstufen ab.

Ein anderes physikalisches Phänomen, der *Adhäsionsübergang* von Membranen, ist ein analoger Phasenübergang einer flexiblen Fläche. Membranen sind zweidimensionale Schichten von amphiphilen Molekülen. Es gibt verschiedene Typen von Membranen, die in letzter Zeit Gegenstand vieler theoretischer und experimenteller Untersuchungen von Physikern waren [63, 66, 74, 85]. Eine wichtige Gruppe sind die fluiden Membranen, die aus Lipiden bestehen. In wässriger Umgebung formen die Lipide Doppelschichten, um ihren hydrophoben Schwanz vor dem Wasser zu verbergen. In der sogenannten L_α -Phase sind die Moleküle sehr beweglich: Die Lipide können relativ schnell in der Schicht diffundieren, mit einer Diffusionskonstanten von $\simeq 10^{-7} - 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{sec}$. Um ihre Entropie zu erhöhen, fluktuiert die Doppelschicht um ihre Gleichgewichtsposition. Solange die Membran fluide ist, sind die Fluktuationen im wesentlichen durch die Krümmungsenergie bestimmt [34, 35, 36]. Auf der anderen Seite haben polymerisierte Membranen, wie etwa Proteinnetzwerke oder polymeri-

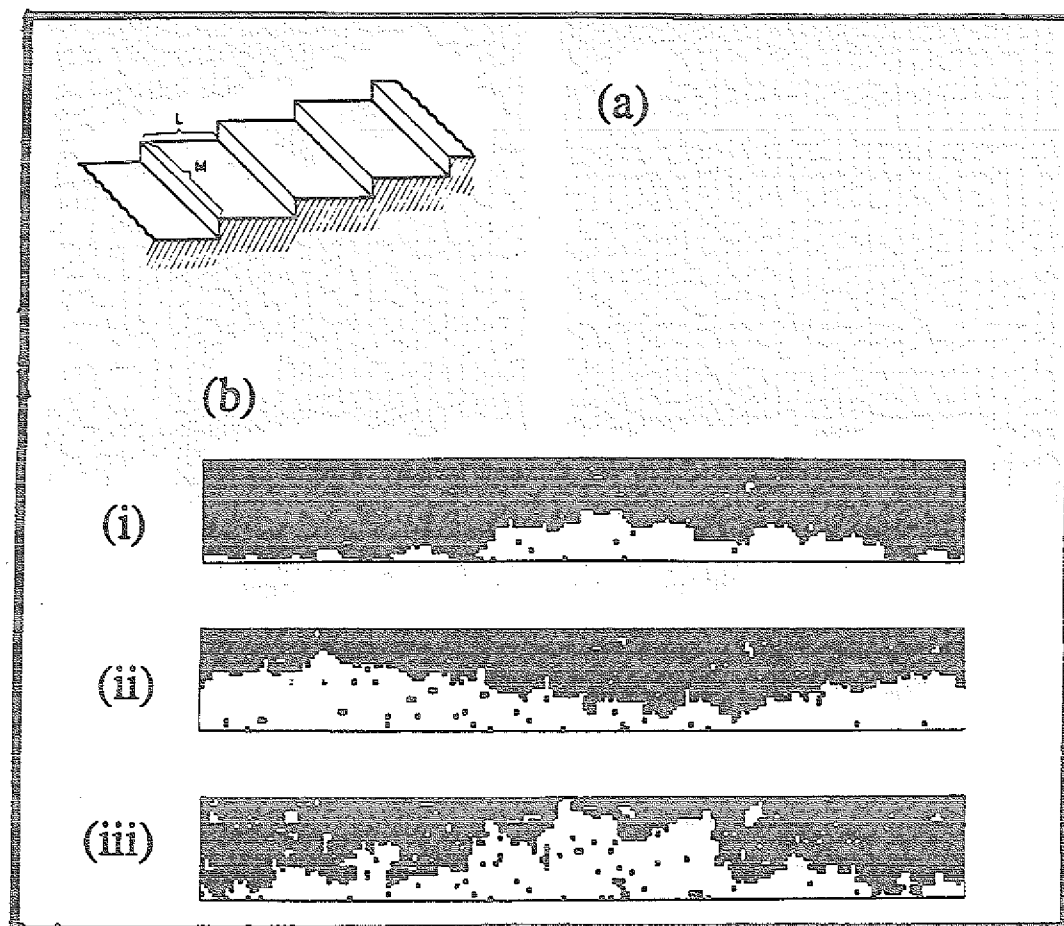


Abbildung 1.3: (a) Geometrie von Benetzung auf gestuften Oberflächen. Die Oberfläche besteht aus Terrassen, die regelmäßig gestuft sind. (b) Terrasse mit Adatomen, schwarz gezeichnet. Bei kleinen Temperaturen bildet sich eine glatte Grenzfläche aus (i), die für zunehmende Temperaturen rauher wird (ii), bei $T = T_W$ schließlich, ist die Grenzfläche rau und die mittlere Bedeckung ist isotrop (iii); E.V. Albano, K. Binder, D. Heermann und W. Paul, 1989, Ref. [3].

sierte Lipide, eine feste Konnektivität [2]. Sie zeigen dann einen Schermodul, der zu reduzierten Fluktuationen im Vergleich zu fluiden Membranen führt [68].

Membranen zeigen eine Vielzahl von Wechselwirkungen, die von intermolekularen Kräften herrühren [40, 72, 71]. Der anziehende Teil der *direkten* Wechselwirkung kann stark genug sein, Membranen an ein Substrat zu binden: Der gebundene, adhäsionierte Zustand ist dann charakterisiert durch einen endlichen mittleren Abstand $\langle l \rangle$ der Membranen vom Substrat. Wenn ein Parameter des Systems wie z.B. die Temperatur geändert wird, kann das System einen Adhäsionsübergang zu einem ungebundenen Zustand mit unendlichem $\langle l \rangle$ haben [52, 57, 56, 67]. Die Geometrie des Adhäsionsüberganges ist in Abb. 1.1.b zu sehen. Wenn jedoch zwei Membranen miteinander wechselwirken kann der Adhäsionsübergang ebenfalls auftreten: das Substrat wird durch die zweite Membran ersetzt und $\langle l \rangle$ gibt dann den mittleren, relativen Abstand der Membranen an.

Der Adhäsionsübergang kann bei verschiedenen Membrantypen auftreten. In Abhängigkeit vom Membrantyp und der paarweisen Wechselwirkung kann folgendes geschehen: (i) Adhäsionsübergänge zweiter Ordnung, bei denen der mittlere Abstand $\langle l \rangle$ kontinuierlich nach Unendlich divergiert, wenn das System seinen Übergangspunkt erreicht. Gleichzeitig wachsen die Fluktuationen an, was zu einem Anwachsen der Membranrauhigkeit führt. Am Übergangspunkt hat die Membran die Rauigkeit des freien Zustandes; oder (ii) Phasenübergänge erster Ordnung, die durch ein sprunghaftes Verhalten des mittleren Abstandes charakterisiert sind: Am Übergangspunkt springt $\langle l \rangle$ von einem endlichen Wert nach Unendlich [31].

Der Adhäsionsübergang von fluiden Membranen wurde in Experimenten beobachtet [67, 36]. In Abb. 1.4 sieht man das Schwellen eines Stapels von Digalactosyldiglycerin (DGDG) Membranen. Dieses Zucker-Lipid bildet in wässriger Lösung Vesikel aus. In 100 mM NaCl Lösung zeigt sich bei etwa 22° C der Adhäsionsübergang.

Auch in Monte Carlo Simulationen konnte der Adhäsionsübergang von fluiden Membranen beobachtet werden [59, 25]. Die experimentellen- und die Monte Carlo Resultate sind konsistent mit einem Phasenübergang *zweiter Ordnung*. Kürzlich durchgeführte Monte Carlo Untersuchungen an polymerisierten Membranen [62, 24, 48] sind ebenfalls im Einklang mit einem kontinuierlichen Übergang. In einigen Mischungen wurden zwei koexistierende lamellare Phasen beobachtet, was einen Phasenübergang erster Ordnung von einem kleinen zu einem großen (aber endlichen) Abstand der Membranen impliziert [81]. Hierin deutet sich an, daß der Adhäsionsübergang auch von *erster Ordnung* sein kann. Eine neuere Monte Carlo Simulation eines Systems mit drei Membranen legt nahe, daß die Ordnung des Phasenüberganges von der Anzahl der wechsel-

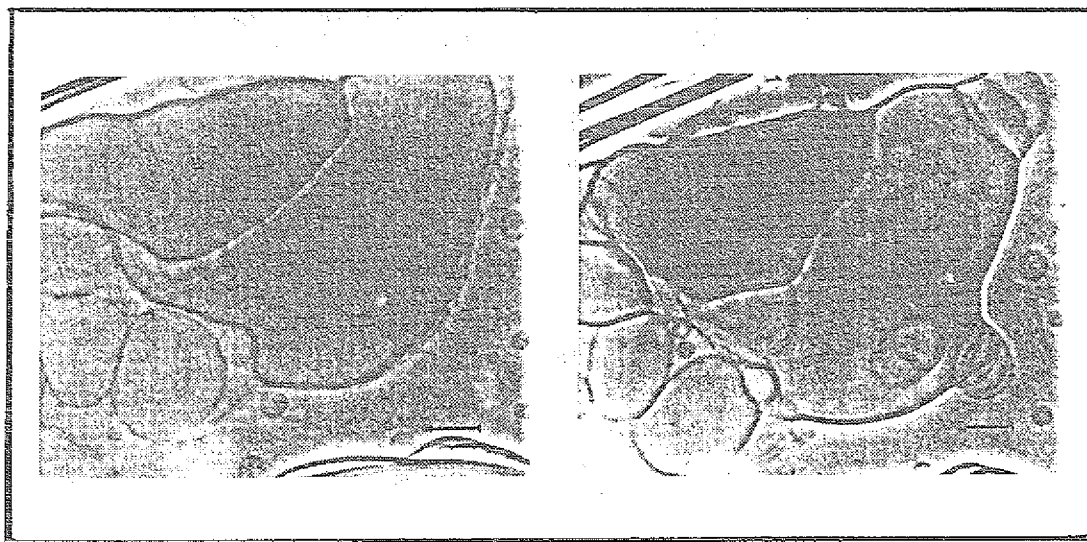


Abbildung 1.4: Adhäsionsübergang eines Stapels von acht Zucker-Lipid Membranen. Oberhalb der Übergangstemperatur (linkes Bild) sieht man einen Membranstapel, in dem die Membranen einen endlichen Abstand haben. Im Mikroskop zeigt sich der Membranstapel als dicke, verschwommene Linie. Unterhalb der Übergangstemperatur (rechtes Bild) sind die Membranen adhäreniert, was sich in einer scharfen Linie des Stapels zeigt. Das überschüssige Wasser hat sich in einer Wassertasche gesammelt; W. Helfrich und M. Mütz, 1988, Ref. [36].

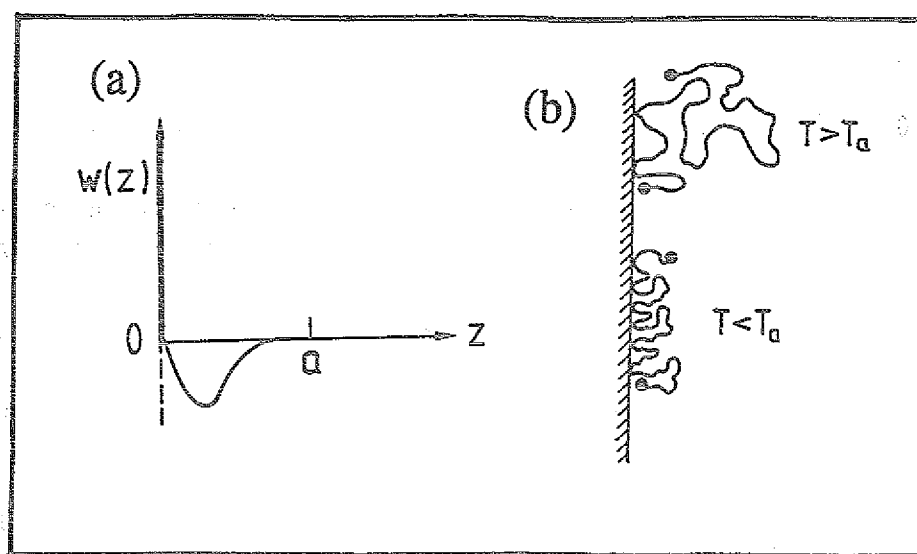


Abbildung 1.5: Adsorption eines Polymers an einem Substrat. (a) Kurzreichweitiges, attraktives Potential zwischen den Monomeren des Polymers und dem Substrat; (b) Bei einer bestimmten Temperatur T_a zeigt das System einen Adsorptionsübergang; E. Eisenriegler, K. Kremer und K. Binder, 1982, Ref. [17].

wirkenden Membranen abhängt: Ein kontinuierlicher Phasenübergang kann diskontinuierlich werden, wenn die Anzahl der beteiligten Membranen erhöht wird [14].

Die *Adsorption* eines Polymers, das mit einem Substrat wechselwirkt, ist ein Beispiel für ein System, in dem ein eindimensionales Objekt einen Phasenübergang zeigen kann. Die Geometrie dieses Systems ist in Abb. 1.1.c zu sehen. Die Monomere des Polymers haben eine kurzreichweitige, attraktive Wechselwirkung mit dem Substrat, die das Polymer an das Substrat binden möchte. Gleichzeitig erhöht das Polymer seine Konformations-Entropie, indem es Exkursionen vom Substrat macht. Aus diesem Wettbewerb ergibt sich, daß das System eine bestimmte Temperatur T_a besitzt, so daß das Polymer für $T < T_a$ adsorbiert und für $T > T_a$ frei ist, siehe Abb. 1.5.

Obwohl die oben beschriebenen Systeme verschieden sind, lassen sie sich doch alle unter einem universellen Gesichtspunkt zusammenfassen: Die Phasenübergänge können als *Entbindungsübergang* einer flexiblen Fläche¹ von einem gebundenen, glatten Referenzzustand in einen ungebundenen, rauhen Zustand angesehen werden [54, 21]. In dieser Betrachtungsweise wird das Augenmerk auf den thermodynamischen Freiheitsgrad gerichtet, der beim Phasenübergang wichtig ist: Wenn die Fläche beim Phasenübergang in den freien

¹oder auch: einer flexiblen niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeit

Zustand orientiert bleibt, ist der relevante Freiheitsgrad der lokale Abstand der Fläche vom Referenzzustand.

Ist die Fläche eine *Grenzfläche* zwischen zwei Volumenphasen, ist ihre Dimension um eins gegenüber der Volumendimension vermindert. Die Volumenphase selbst kann zwei- oder dreidimensional sein: Im dreidimensionalen Fall entspricht das Anwachsen der Flüssigphase im Benetzungsbild dem Entbinden der Flüssig-Gas-Grenzfläche von der Flüssig-Fest-Grenzfläche; ist die Volumenphase zweidimensional, ist die Grenzfläche eine Linie und dem Entbinden entspricht jetzt das Anwachsen einer Domäne bzw. das Anwachsen der adsorbierten Fläche eines Substrates.

Der Adhäsionsübergang von *Membranen* paßt sich ebenso in das Entbindungsbild ein: hier ist die Fläche eine Lipid-Doppelschicht, deren mittlerer Abstand vom Substrat beim Entbindungsübergang nach unendlich geht. Falls der Entbindungsübergang zweier Membranen studiert wird, ist die relevante Größe der Relativabstand der Membranen. Auch hier soll angenommen werden, daß die Membran im freien Zustand nicht gekrumpelt ist [60, 39, 2], d.h. die Orientierung der Membran auch im ungebundenen Zustand beibehalten wird.

Die Adsorption/Desorption eines Polymers an einem Substrat schließlich kann auch als Entbindungsübergang einer (Hyper-)Fläche aufgefaßt werden. Im Gegensatz zu Grenzflächen und Membranen sind die Polymere typischerweise gekrumpelt. In der Näherung des sogenannten Gauß'schen Polymers separieren aber die lateralen Freiheitsgrade des Polymers ab und beeinflussen so nicht den Adsorptionsübergang. Der Abstand eines Monomers vom Substrat ist hier die relevante Größe, die sich beim Adsorptionsübergang ändert.

Wenn Flächen an ein Substrat oder an eine andere Fläche gebunden sind, wie in Abb. 1.1 gezeigt, müssen Wechselwirkungen zwischen den Flächen, bzw. zwischen Fläche und Substrat, vorhanden sein, deren *attraktiver* Teil die thermischen Fluktuationen der Fläche überwinden kann [61]. Die sogenannte *direkte* Wechselwirkung besteht im allgemeinen aus verschiedenen kurzreichweitigen- und langreichweitigen Anteilen und rührt von den molekularen Kräften zwischen den Molekülen in den Flächen her [61, 20, 72, 40]. Typische Wechselwirkungen sind: elektrostatische Wechselwirkungen; attraktive, langreichweitige van der Waals Wechselwirkungen, resultierend von Dipol-Dipol Kräften; oder strukturelle Wechselwirkungen, die von der kurzreichweitigen Ordnung des Mediums herrühren, in der sich die Flächen befinden. Zusätzlich enthält die direkte Wechselwirkung bei Entbindungsphänomenen eine harten Wand bei Abstand $l = 0$, da sich die Flächen nicht durchdringen können.

Hier sieht man zwei wesentliche Aspekte des Entbindungsüberganges: einmal die direkte Wechselwirkung zwischen den Flächen, deren attraktiver Teil

bewirkt, die Fläche zu binden, und die thermischen Fluktuationen, die zu einer sterischen Abstoßung führen und dabei die direkte Wechselwirkung renormieren [54, 52, 51].

Bei der Beschreibung des Entbindungsüberganges führt die harte Wand in der direkten Wechselwirkung dazu, daß perturbative Methoden nicht ohne weiteres angewendet werden können. Das System enthält keinen geeigneten kleinen Parameter, nach dem entwickelt werden kann [57, 56, 52, 51].

Die *Aufrauungsphänomene* sind eine andere Klasse von physikalischen Phänomenen, bei der die Schwierigkeiten einer harten Wand *nicht* auftreten. Hier befindet sich eine Fläche in einem *symmetrischen* äußeren Potential. Beispiele für Systeme, in denen Aufrauungsphänomene auftreten können sind:

- (i) eine ein- oder zweidimensionale Grenzfläche zwischen zwei Volumenphasen in zwei- oder drei Dimensionen in einem homogenen Gravitationspotential;
- (ii) eine ein- oder zweidimensionale Grenzfläche oder Domänenwand zwischen zwei geordneten Domänen in Anwesenheit eines planaren oder linearen Defekts;
- (iii) ein Polymer, das mit einer Membran oder einer Flüssigkeitsschicht wechselwirkt.
- (iv) Das zweidimensionale Ising Modell mit nächsten Nachbarkopplungen J_B und einer Linie mit schwächeren Kopplungen $J_S < J_B$.

In allen genannten Fällen ist das äußere Potential symmetrisch, d.h. $V(l) = V(-l)$, und enthält für kleine Abstände l einen attraktiven Teil, der darauf hinwirkt, die Fläche zu lokalisieren.

Auch in diesen Systemen kann ein Phasenübergang stattfinden. Nehmen wir einmal an, daß wir einen Kontrollparameter des Systems, wie etwa die Temperatur oder die Potentialstärke $V(0)$ ändern. Die Fläche kann dann einen Phasenübergang zu einem aufgerauhten Zustand haben, in dem beliebig große Exkursionen um den ebenen Referenzzustand vorkommen.

Ebenso wie bei Benetzungs- und Adhäsionsphänomenen geht beim Aufrauungsübergang die Rauigkeit ξ_1 der Fläche, gegeben als die zweite Kumulante des Abstandsfeldes l :

$$\xi_1^2 = \langle [l - \langle l \rangle]^2 \rangle, \quad (1.1)$$

nach Unendlich. Allerdings genügt in der lokalisierten Phase die mittlere Position $\langle l \rangle$ der Bedingung $\langle l \rangle = 0$, wenn keine spontane Symmetriebrechung

auftritt. Das soll hier immer vorausgesetzt werden. Für die lokalisierte Phase ist das immer erfüllt, wenn das äußere Potential ein globales Minimum bei $l = 0$ hat. Zusätzlich gilt die Beziehung $\langle l \rangle = 0$ für *alle* symmetrischen Potentiale in Dimension $d = 1 + 1$: Spontane Symmetriebrechung kann in diesem Fall nicht auftreten, da das Abstandsfeld durch jede kurzreichweitige Barriere tunnelt. Auch in diesen Systemen führen die Exkursionen der Fläche zu nichttrivialem kritischem Verhalten: In Abhängigkeit vom äußeren Potential können in diesen Systemen kontinuierliche- und diskontinuierliche Phasenübergänge auftreten, die nicht ein Verhalten zeigen, das die mittlere Feldtheorie vorhersagt.

An den besprochenen Beispiel-Systemen wird deutlich, daß die Fluktuationen der Fläche wesentlich den jeweiligen Phasenübergang beeinflussen. Daher soll jetzt die Rauigkeit einer freien, flexiblen Fläche diskutiert werden.

1.1 Die Skaleninvarianz der rauen Fläche

Die Grenzfläche oder Membran sei in einem d -dimensionalen System eingebettet. Das System sei im thermischen Gleichgewicht bei der Temperatur T . Bei $T = 0$ ist die Fläche glatt, um ihre Energie zu minimieren. Bei endlicher Temperatur jedoch wird die Fläche um ihren Gleichgewichtszustand fluktuieren, um Konformations-Entropie zu gewinnen. Es bilden sich Berge und Täler aus, die zu einer gewissen Rauigkeit führen.

Um die Rauigkeit der Fläche quantitativ zu behandeln, werden jetzt einige Begriffe eingeführt. Zuerst wird die Dimension d des System aufgeteilt in:

$$d = d_{\parallel} + d_{\perp}, \quad (1.2)$$

wobei $d_{\parallel}$ die laterale Dimension der Fläche beschreibt und $d_{\perp}$ die Dimensionen angibt, in die sich die Fläche verformen kann. Die Fluktuationen können dann durch das $d_{\perp}$ -dimensionale Abstandsfeld $\vec{l}(\vec{x})$ beschrieben werden, wobei $\vec{x}$ eine $d_{\parallel}$ -dimensionale, laterale Koordinate ist. In dieser Parametrisierung werden Überhänge ausgeschlossen. Das bedeutet, daß $d_{\parallel}$ -dimensionale Gradienten, wie etwa $\vec{\nabla} l(\vec{x})$, als klein angesehen werden und die Fläche immer noch in Richtung ihres planaren Referenzzustandes orientiert bleibt. Das ist nur für Flächen der Fall, die nicht gekrumpelt sind, was im folgenden angenommen wird [60, 39, 2]. Die Formfluktuationen der Fläche kann nun durch die Differenzkorrelationsfunktion:

$$\Delta C(x) \equiv \frac{1}{2} \langle [\vec{l}(\vec{x}) - \vec{l}(0)]^2 \rangle \quad (1.3)$$

charakterisiert werden.

Für Systeme, in denen die Fläche gebunden, also glatt ist, bleibt die Funktion $\Delta C(x)$ für große x endlich, während für raue Flächen die Differenzkorrelationsfunktion für große x monoton anwächst. In diesem Fall verhält sich die Differenzkorrelationsfunktion für große x typischerweise wie [51]:

$$\Delta C(x) \sim x^{2\zeta}, \quad (1.4)$$

wobei ζ der sogenannte Rauigkeitsexponent ist. Dieses Potenzverhalten impliziert $\Delta C(x/b) \equiv \Delta C(x)/b^{2\zeta}$ für $x \gg a$, wobei b ein Reskalierungsparameter und a ein "Cutoff" für kurze Abstände ist. Die Fluktuationen der rauhen Fläche sind daher asymptotisch skaleninvariant unter der Transformation:

$$x \rightarrow x/b \text{ und } l \rightarrow l/b^\zeta. \quad (1.5)$$

Wenn die Fläche asymptotisch nur rau, also nicht gekrumpelt ist, ist der Rauigkeitsexponent $\zeta < 1$ und die Vernachlässigung von Überhängen ist gerechtfertigt. Der marginale Fall $\zeta = 0$ entspricht einem logarithmischen Anwachsen der Differenzkorrelationsfunktion:

$$\Delta C(x) \sim \ln(x/a), \quad (1.6)$$

Für große $\xi_{\parallel}$ nimmt man folgende Skalenform für die Differenzkorrelationsfunktion $\Delta C(x)$ an:

$$\Delta C(x) \sim \xi_{\parallel}^{2\zeta} \mathcal{C}(x/\xi_{\parallel}), \quad (1.7)$$

mit $\mathcal{C}(y) \approx \mathcal{C}_0 y^{2\zeta}$ für kleine y , wenn $\zeta > 0$ ist. Im Fall von $\zeta = 0$ hat $\Delta C(x)$ die Skalenform:

$$\Delta C(x) \sim \ln(\tilde{\mathcal{C}}(x/\xi_{\parallel})\xi_{\parallel}/a), \quad (1.8)$$

mit $\tilde{\mathcal{C}}(y) \approx y$ für $y \rightarrow 0$ [51].

Zur Veranschaulichung einer skaleninvarianten Fläche betrachte man ein Stück einer Fläche mit linearer Ausdehnung L_{in} . Die lineare Länge $L_{\parallel}$ der projizierten Fläche $L_{\parallel}^{d_{\parallel}}$ und die typische Ausdehnung $L_{\perp}$ der Fläche skalen dann wie [60]:

$$L_{\parallel} \sim L_{in} \text{ und } L_{\perp} \sim L_{\parallel}^{\zeta} \sim L_{in}^{\zeta}. \quad (1.9)$$

In Abbildung (1.6) ist ein Stück einer skaleninvarianten Grenzfläche dargestellt.

1.1.1 Effektiver Hamiltonian für freie Grenzflächen und Membranen

Die Fluktuationen freier Membranen oder freier Grenzflächen ohne Überhänge können durch den effektiven Hamiltonian [60, 61]

$$\mathcal{H}\{l\} = \int d^d x \frac{1}{2} K (\vec{\nabla}^n l(\vec{x}))^2 \quad (1.10)$$

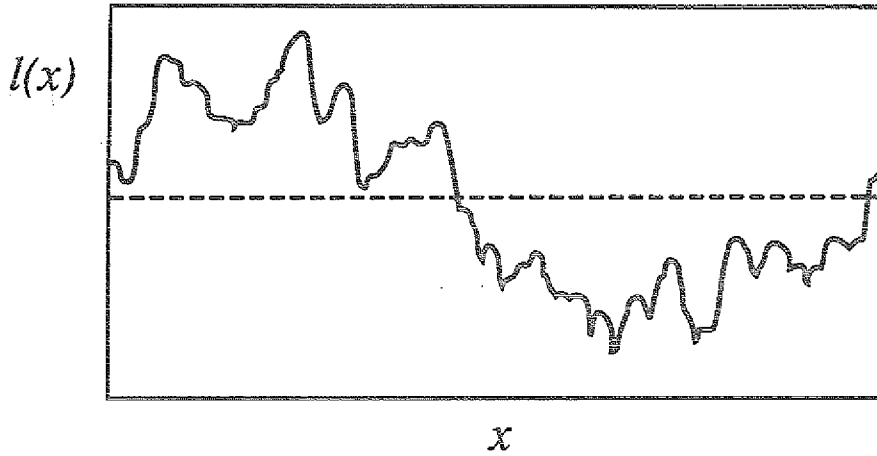


Abbildung 1.6: Eine skaleninvariante Grenzfläche in $d = 1 + 1$ mit $\zeta = \frac{1}{2}$.

beschrieben werden. Dabei ist $\vec{x}$ eine $d_{\parallel} = d - 1$ dimensionale laterale Koordinate und $l = l(\vec{x})$ ist das skalare Auslenkungsfeld. Implizit enthält $\mathcal{H}$ einen "Cutoff" a von der Größe der Moleküle in der Fläche.

Die Größen n , K haben jeweils für Membranen, bzw. Grenzflächen eine andere Bedeutung:

(i) Bei Grenzflächen ist K die effektive Grenzflächenspannung und $n = 1$. Für eine $d_{\parallel} = d - 1$ dimensionale Grenzfläche ist der Rauigkeitsexponent ζ bei thermischer Aufrauhung gegeben durch $\zeta = (2 - d_{\parallel})/2 = (3 - d)/2$ Ref. [51].

(ii) Für Membranen ist K die effektive Biegesteifigkeit und n hängt mit dem Rauigkeitsexponenten ζ über $n = 1 + \zeta$ zusammen [57, 56, 52]. Fluide Membranen haben $\zeta = 1$ während polymerisierte oder kristalline Membranen ein $\zeta \simeq 0.5$ haben [62, 25, 48].

Die unterschiedliche Definition von K und n spiegelt die physikalische Verschiedenheit der beiden Objekte wieder, die jetzt kurz diskutiert werden soll.

Im Fall von Grenzflächen sind die Fluktuationen nicht flächenerhaltend und die Größe K ist die effektive Oberflächenspannung, die angibt wieviel Energie pro Einheitsfläche aufgebracht werden muß, um zusätzliche Fläche zu erzeugen. Der exakte Ausdruck lautet demnach:

$$\mathcal{H}\{z\} = \int d^d x K [\sqrt{1 + (\vec{\nabla} l(\vec{x}))^2} - 1] \quad (1.11)$$

Da Überhänge ausgeschlossen werden, kann die Wurzel in (1.11) bis zu erster Ordnung in $(\vec{\nabla} l(\vec{x}))^2$ entwickelt werden, was dann auf den Hamiltonian in (1.10) führt. In der effektiven Oberflächenspannung K wird berücksichtigt, daß ein anisotroper Teil der Oberflächenspannung Σ einen zusätzlichen Beitrag zum effektiven Hamiltonian liefert. Wenn die Oberflächenspannung Σ sich wie $\Sigma = \Sigma_0 + \frac{1}{2} \Sigma_1 (\vec{\nabla} l(\vec{x}))^2$ verhält, ist K gegeben durch $K \equiv \Sigma_0 + \Sigma_1$ [51]. Nur wenn

die Oberflächenspannung isotrop ist, etwa an einer Flüssig-Gas-Grenzfläche, ist $K \equiv \Sigma_0$. Der Wert von $\zeta = (2 - d_{||})/2 = (3 - d)/2$ ergibt sich aus der Forderung, daß der freie Hamiltonian unter der anisotropen Skalentransformation (1.5) invariant sein soll.

Der effektive Hamiltonian (1.10) wird auch in der Beschreibung von Konformationen von Membranen angewendet. Dabei können fluide aber auch polymerisierte Membranen mit fester Konnektivität beschrieben werden [63, 61].

Betrachten wir zuerst die fluiden Membranen. Die einfachste Modellmembran besteht aus einer Doppelschicht aus Lipiden. Lateral können die Lipidmoleküle relativ schnell diffundieren und deshalb durch Verformungen entstandene Dichteschwankungen relativ schnell wieder ausgeglichen. Es ist daher plausibel anzunehmen, daß die Fluktuationen der fluiden Membran primär durch ihre Biegesteifigkeit und ihre Krümmung bestimmt sind. Das führt auf das Krümmungsmodell für fluide Membranen, das wie folgt definiert ist: In jedem Punkt auf der zweidimensionalen Membranfläche können die beiden Hauptkrümmungen C_1 und C_2 definiert werden, die die mittlere Krümmung $C_1 + C_2$ und die Gauß'sche Krümmung $C_1 C_2$ festlegen. Im Krümmungsmodell ist dann die Konfigurationsenergie definiert als [63]:

$$\mathcal{H} = \oint dA \{ -\kappa C_0 (C_1 + C_2) + \frac{1}{2} \kappa (C_1 + C_2)^2 + \kappa_G C_1 C_2 \}, \quad (1.12)$$

wobei das Integral sich über die gesamte Membranfläche erstreckt und dA das intrinsische Flächenelement repräsentiert. Der Parameter κ ist die Biegesteifigkeit, C_0 die spontane Krümmung und κ_G das Gauß'sche Krümmungsmodul der Membran.

Lipidmembranen bilden in wässriger Umgebung geschlossene Flächen, sogenannte Vesikel [74, 8]. Das Krümmungsmodell (1.12) ist der Ausgangspunkt zur Bestimmung von Vesikelformen; in dieser Arbeit wird aber der Schwerpunkt auf mesoskopische Membranfluktuationen gelegt, für die das Krümmungsmodell weiter vereinfacht werden kann. Im Limes kleiner Krümmungen der Membranfläche ergibt sich der effektive Hamiltonian (1.10), wenn wieder die Parametrisierung $(\vec{x}, l(\vec{x}))$ der Membranfläche benutzt und der Krümmungs-Hamiltonian (1.12) nach kleinen $\vec{\nabla}^2 l(\vec{x})$ entwickelt wird.

Die Näherung kleiner Krümmungen ist gerechtfertigt, wenn der Rauigkeitsexponent $\zeta < 1$ ist. Aus der Invarianzforderung des Hamiltonians (1.10) unter der Skalentransformation (1.5) für zweidimensionale fluide Membranen ohne Selbstvermeidung ergibt sich der Wert $\zeta = 1$. In diesem Fall sind Membranstücke, die größer als die Persistenzlänge ξ_p sind, unkorreliert [22, 23]. Die Parametrisierung $(\vec{x}, l(\vec{x}))$ der Membranfläche ist dann nicht mehr sinnvoll, da die Membran auf diesen Skalen Überhänge zeigt. Reale Lipidmembranen haben

aber eine reduzierte Biegesteifigkeit $\kappa/T \approx 20$, so daß die Persistenzlänge:

$$\xi_P = a \exp(2\pi\kappa/T) \quad (1.13)$$

sehr viel größer als die Ausdehnung realer Membranen ist und die Näherung kleiner Krümmungen, d.h. der Hamiltonian (1.10) gerechtfertigt ist [61].

Polymerisierte oder kristalline Membranen sind Membranen, in denen die Monomere eine feste Konnektivität haben. Laterale Biegeelastizität führt bei diesen Objekten zu einer reduzierten Rauigkeit und demnach zu einem kleineren Rauigkeitsexponenten ζ im Vergleich zu fluiden Membranen [68, 43, 42]. Im Rahmen eines Kontinuums-Modells können polymerisierte Membranen wie eine elastische Platte behandelt werden [47]. Man benutzt die Parametrisierung $(x_1 + u_1(x_1, x_2), x_2 + u_2(x_1, x_2), l(x_1, x_2))$ um eine um den Referenzzustand $(x_1, x_1, 0)$ verformte Membran zu charakterisieren. Aus den Verformungen (u_1, u_2, l) wird der Verzerrungstensor über

$$u_{ij} \approx \frac{1}{2}(\partial_i u_j + \partial_j u_i + \partial_i l \partial_j l) \quad (1.14)$$

definiert.

Zusätzlich zur Krümmungsenergie einer fluiden Membran:

$$\mathcal{H}_b\{l\} = \int d^2x \frac{1}{2} \kappa (\nabla^2 l)^2 \quad (1.15)$$

kommt jetzt noch der Anteil von der Verzerrungsenergie:

$$\mathcal{H}_s\{u_1, u_2, l\} = \int d^2x (\mu u_{ij}^2 + \frac{1}{2} \lambda u_{kk}^2) \quad (1.16)$$

zu dem Hamiltonian $\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_b + \mathcal{H}_s$ hinzu. Die Lamé Koeffizienten λ, μ parametrisieren die elastischen Eigenschaften der polymerisierten Membran. Eine Ausintegration der lateralen Verschiebungen ergibt eine effektive Biegesteifigkeit κ , die von der Membranausdehnung abhängt. Auf großen Skalen führt das auf eine Rauigkeit der polymerisierten Membran, die durch einen Rauigkeitsexponenten $\zeta \simeq 1/2$ charakterisiert ist [62, 25, 48].

1.2 Flexible Fläche in einem äußerem Potential

Benetzungs- und Adhäsionsphänomene lassen sich als Phasenübergang einer fluktuierenden Fläche in einem äußeren Potential beschreiben. Der freie Hamiltonian (1.10) erhält dann noch einen Zusatzterm, so daß der vollständige

Hamiltonian für Grenzflächen und Membranen lautet [61]:

$$\mathcal{H}\{l\} = \int d^{d-1}x \left[\frac{1}{2} K (\vec{\nabla}^n l(\vec{x}))^2 + V(l) \right]. \quad (1.17)$$

Das äußere Potential, in dem sich die Fläche befindet, wird durch den Term $V(l)$ repräsentiert.

Die statistischen Größen des Modells werden von der Zustandssumme

$$Z = \int D\{l\} e^{-H(l)/T} \quad (1.18)$$

abgeleitet, wobei $\int D\{l\}$ ein Pfadintegral über alle möglichen Konfigurationen der flexiblen Fläche bezeichnet.

Falls das äußere Potential attraktiv genug ist, kann die Fläche im gebundenen Zustand sein. Im gebundenen Zustand ist die Fläche nur auf Skalen, die kleiner als die laterale Korrelationslänge $\xi_{\parallel}$ sind, selbstähnlich, d.h. invariant unter der Skalentransformation (1.5). Die laterale Korrelationslänge wird über die Korrelationsfunktion

$$\langle [\vec{l}(\vec{x}) \vec{l}(0)]^2 \rangle_C \equiv \Delta C(\infty) - \Delta C(x) \quad (1.19)$$

definiert, die für große x wie $\sim \exp(-x/\xi_{\parallel})$ abfällt [51, 53].

Beim Aufrauungsübergang einer Fläche von einem glatten zu einem rauen Zustand divergieren dann simultan die Längenskalen $\xi_{\perp}^2 = \Delta C(\infty)$ und $\xi_{\parallel}$. Bei den Entbindungsübergängen divergiert noch zusätzlich der mittlere Abstand $\langle l \rangle$.

Die obigen Betrachtungen gelten unabhängig von der Form des Potentials; es sollen nun konkrete physikalische Potentiale betrachtet werden, die das jeweilige physikalische System widerspiegeln. Falls das Potential $V(l)$ die Wechselwirkung zweier Flächen repräsentiert, enthält das Potential eine harte Wand bei $l = 0$, da sich die Flächen nicht durchdringen können.¹

1.2.1 Potentiale mit einer harten Wand

Betrachten wir wieder zuerst die Adsorption: hier wechselwirkt eine zweidimensionale Flüssig-Gas-Grenzfläche mit einer Flüssig-Fest-Grenzfläche, bzw. mit der Substratoberfläche. Die Wechselwirkung rührt von den zwischenmolekularen Kräften her und hat bei kurzreichweitigen Kräften die generische Form: [49, 11]

$$V(l) = -W \exp(-l/\xi_b) + \exp(-2l/\xi_b), \quad (1.20)$$

¹Falls nicht nur eine Grenzfläche fluktuiert, wie hier stillschweigend angenommen wurde, kann man Schwerpunkts- und Relativkoordinaten einführen; l ist dann der relative Abstand der beiden Grenzflächen und die Überlegungen gelten dann auch für diese Systeme.

$l = l(x_1, x_2)$ ist die Relativkoordinate, die den Abstand der beiden Grenzflächen angibt, ξ_b ist die Volumenkorrelationslänge des Systems und W ist die temperaturabhängige Amplitude des attraktiven Teils der Potentials. Ein Potential wie in (1.20) kann durch Aufsummation von kurzreichweitigen Zweiteilchen-Wechselwirkungen erhalten werden.

Im Fall des zweidimensionalen Ising Modells wird die Reihe der schwächeren Kopplungen durch das kurzreichweitige attraktive Potential $V(l) \equiv [(J_S - J_B)/a] \delta_{l,0}$ repräsentiert. Auch hier wird eine harte Wand bei $l = 0$ zusätzlich zu $V(l)$ eingeführt, da die Grenzfläche den Rand nicht schneiden darf. Denkbar ist auch ein System in dem die Kopplungen durch eine langreichweitige Störung $J(l) \sim W/l^m$ modifiziert sind, das resultierende Potential $V(l) \equiv J(l)/a$ ist dann ebenfalls langreichweitig. Dieses System läßt sich mit Hilfe von Transfer-Matrix Rechnungen für eine Reihe von Potentialen exakt lösen [13, 45, 55] und spielt daher als Referenzsystem eine wichtige Rolle.

Die Wechselwirkung ungeladener Membranen kann als die Summe der langreichweitigen, attraktiven van der Waals Wechselwirkung und der kurzreichweitigen, repulsiven Hydratations-Wechselwirkung geschrieben werden: $V(l) = V_H(l) + V_W(l)$ [72, 71, 52]. Die Hydratations-Wechselwirkung $V_H(l)$ hat die Form:

$$V_H(l) = A_H \exp(-l/l_H), \quad (1.21)$$

wobei $l_H \simeq 0.3$ nm und $A_H \simeq 0.2$ J/m² ist. Die van der Waals Wechselwirkung $V_W(l)$ kann für $l > 0.3$ nm geschrieben werden als [72, 71, 52]:

$$V_W(l) \approx -\frac{W}{12\pi} \left[\frac{1}{l^2} - \frac{2}{(l+\delta)^2} + \frac{1}{(l+2\delta)^2} \right], \quad (1.22)$$

wobei die Hamaker Konstante $W \simeq 10^{-22} - 10^{-21}$ J ist und $\delta \simeq 4$ nm die Membrandicke bezeichnet. Für große Abstände l impliziert dies $V_W(l) \sim -W\delta^2/l^4$. Auch in diesem System wird aus physikalischen Gründen $V \equiv \infty$ für $l < 0$ angenommen.

1.2.2 Symmetrische Potentiale

Betrachtet man den Einfluß des Gravitationspotentials auf eine Flüssig-Gas-Grenzfläche, kann das ebenfalls mit den effektiven Hamiltonian (1.17) beschrieben werden. Das entsprechende äußere Potential ist dann harmonisch und lautet:

$$V(l) = \frac{1}{2} G l^2, \quad (1.23)$$

wobei die Konstante G durch $G = g(\rho_l - \rho_g)$ gegeben ist, mit der Gravitationskonstanten g und den Massendichten $\rho_{l,g}$.

Die Grenzfläche zwischen zwei geordneten Domänen in zwei oder drei Dimensionen spürt in Anwesenheit einer planaren Defektlinie, bzw. einer planaren Defekzebene das kurzreichweitige Potential:

$$V(l) = G\delta_{l,0}. \quad (1.24)$$

Dieses Potential kann modifiziert werden wenn langreichweitige Kräfte in dem System auftreten. Potentiale der Form:

$$V(l) = \begin{cases} G & \text{für } |l| < l_0 \\ W|l|^{-r} & \text{für } |l| > l_0 \end{cases} \quad (1.25)$$

können dabei wichtig werden. Die Größe l_0 charakterisiert den Bereich, in dem der kurzreichweitige Anteil des Potentials wirkt.

1.2.3 Effektiver Hamiltonian für Gauß'sche Polymere

Die mesoskopischen Eigenschaften von Polymeren ohne Selbstvermeidung können durch den effektiven Hamiltonian

$$\mathcal{H}\{\vec{r}\} = \int_0^{N_a} ds a^{-1} \left[\frac{1}{2} T \left(\frac{d\vec{x}}{ds} \right)^2 + \frac{1}{2} T \left(\frac{dl}{ds} \right)^2 + V(l) \right]. \quad (1.26)$$

beschrieben werden [58]. Hier ist $V(l)$ die potentielle Energie eines Monomers mit Abstand l von der Referenzebene. Die Konfiguration des Polymers ist durch den Vektor $\vec{r}(s) = (\vec{x}(s), l(s))$ beschrieben, wobei s die Sequenz der N Monomere abzählt. Da die lateralen Koordinaten $\vec{x}$ von der senkrechten Koordinate l entkoppeln, kann das Problem exakt gelöst werden und ist equivalent zu einer Grenzfläche in einem externen Potential in $d = 1 + 1$ Dimensionen.

Ein Beispiel-System ist ein Polymer, das mit einer Membran wechselwirkt, die sich in wässriger Umgebung befindet. Das Polymer erniedrig seine Energie, wenn seine Monomere in der Membran sind. Falls die Selbstvermeidung unberücksichtigt bleibt, beschreibt der Hamiltonian (1.26) dieses System. Das Potential der Form:

$$V(l) = G\delta_{l,d} \quad (1.27)$$

gibt den Energieunterschied pro Monomer an, der zwischen einem Monomer in Wasser bzw. einem Monomer in der hydrophoben Umgebung der Membran mit Dicke d besteht.

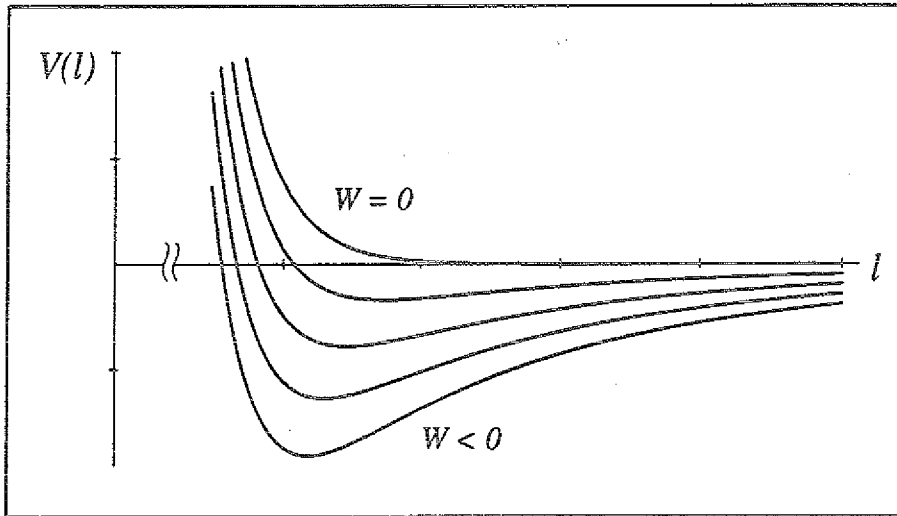


Abbildung 1.7: Der Adhäsionsübergang in der mittleren Feld Näherung. Das Wechselwirkungs-Potential wird für verschiedene Werte von W gezeigt, in abnehmender Ordnung von unten nach oben. Bei $W = 0$ sind die Membranen entbunden.

1.3 Einfluß von Fluktuationen auf den Phasenübergang

Der Einfluß von Fluktuationen auf den Adhäsionsübergang von Membranen soll jetzt kurz dargestellt werden. Es zeigt sich an diesem System, daß im allgemeinen eine systematische Behandlung der Fluktuationen von Flächen notwendig ist.

In der mittleren Feld (Mean-Field) Näherung werden alle Fluktuationen der Fläche vernachlässigt und der mittlere Abstand $\langle l \rangle$ folgt aus

$$\frac{dV(l)}{dl} \Big|_{l=\langle l \rangle} = 0. \quad (1.28)$$

Für Membranen, die in einem Potential $V(l) = V_H(l) + V_W(l)$ wechselwirken, ist $\langle l \rangle < \infty$, vorausgesetzt $W > 0$.

Daher schließt man, daß Membranen einen Adhäsionsübergang zweiter Ordnung zeigen, der bei der Phasengrenze $W = 0$ stattfindet, siehe Abbildung (1.7) und auch Ref. [32]. Weiter sagt die mittlere Feld Näherung aus, daß zwei Membranen für alle endlichen Temperaturen gebunden bleiben. Das ist aber

generell nicht richtig, da die Fluktuationen der Membran den Phasenübergang nichttrivial modifizieren.

Allgemein erleidet eine gebundene Fläche einen Entropieverlust, der zu einer effektiven, fluktuations-induzierten sterischen Abstoßung $V_{FL}(l) \sim 1/l^\tau$ mit dem Zerfallsexponenten $\tau = d_{||}/\zeta$ führt [51, 57, 56, 29]. Wenn man die obigen Werte für ζ einsetzt erhält man $\tau = 2$ und $\tau = 4$ jeweils für fluide- und polymerisierte Membranen. Andere Werte von τ wären denkbar und können auftreten, wenn z.B. langreichweitige Kräfte in der Membran vorhanden sind.

Eine $d - 1 = d_{||}$ dimensionale Grenzfläche ist durch den Rauigkeitsexponenten $\zeta = (2 - d_{||})/2$ charakterisiert, woraus für eine Grenzfläche in $d = 1 + 1$ ebenfalls $\tau = 2$ folgt. In $d = 2 + 1$ hat man dagegen $\tau = \infty$, da hier $\zeta = 0$ ist, was einer logarithmischen Rauigkeit der Grenzfläche entspricht. Tatsächlich ist es möglich in $d = 2 + 1$ einen Rauigkeitsübergang einer freien Grenzfläche zu haben. Unterhalb der Rauigkeitstemperatur T_R ist die Grenzfläche glatt und ein periodisches Gitterpotential, welches die Gitterstruktur des darunterliegenden Substrats widerspiegelt, ist relevant, wogegen oberhalb von $T = T_R$ die Grenzfläche logarithmisch rauh ist und das periodische Potential vernachlässigt werden darf [7]. Es soll im folgenden angenommen werden, daß immer $T > T_R$ gilt und somit die freie Grenzfläche rauh ist.

Naheliegend ist es, eine simple Superposition der direkten Wechselwirkung $V(l)$ mit der fluktuations-induzierten Wechselwirkung $V_{FL}(l)$ vorzunehmen und auf das daraus resultierende Potential wieder die mittlere Feld Näherung anzuwenden. Leider ist jedoch dieser Zugang unsystematisch und im allgemeinen nicht anzuwenden [51, 52]. Wenn wir Abb. 1.8 betrachten, sehen wir, daß die einfache Superposition dieser beiden Wechselwirkungen zu einem neuen Maximum im Gesamtpotential führt. Wenn wir die Hamaker Konstante ändern, wandert das Minimum durch die Nulllinie, vgl. Abb. 1.8, das Maximum jedoch bleibt bestehen. Das entspricht einem Phasenübergang erster Ordnung: bei $W = W_*$ springt $\langle l \rangle$ nach Unendlich, da das Minimum bei $l = \infty$ das globale Minimum wird, wenn W weiter verkleinert wird.

Es wird deutlich, daß eine systematische Methode benutzt werden muß, die die Fluktuationen der Fläche richtig behandelt. Dann ist auch eine Klassifizierung des Phasenüberganges möglich und es können nichttriviale kritische Exponenten bestimmt werden. Eine geeignete Methode ist die *nichtlineare funktionale Renormierung*, die im nächsten Kapitel auf den Adhäsions- bzw. Benetzungsübergang von Grenzflächen und Membranen angewendet wird.

Ein offenes Problem ist der Benetzungsübergang in drei Dimensionen, der sowohl mit Hilfe einer linearen Renormierung [11, 49, 19] als auch mit Monte Carlo Methoden untersucht wurde [9, 28, 46, 30]. In der Sprechweise der

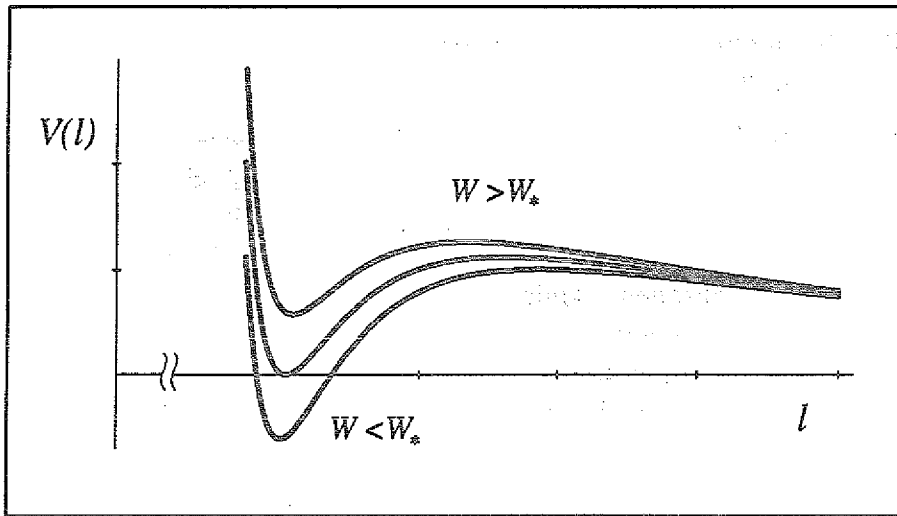


Abbildung 1.8: Superposition der direkten Wechselwirkung und der sterischen Wechselwirkung, jeweils für $W < W_*$, $W = W_*$ und $W > W_*$. Das Maximum der Gesamtwechselwirkung bleibt bestehen, wenn das Minimum die Null-Linie schneidet.

Renormierungsgruppen-Theorie ist dieses System aber gerade ein marginaler Fall: Systeme mit $d > 3$ zeigen Mean-Field Verhalten, Systeme mit $d < 3$ hingegen zeigen nichttriviale kritische Exponenten. Es ist daher lohnend, im Rahmen der nichtlinearen Renormierung den Grenzfall von $d \rightarrow 3$ zu untersuchen.

In den obigen Beispielen wurden Potentiale mit einer harten Wand betrachtet. Das folgende Beispiel macht deutlich, daß auch in symmetrischen Potentialen der Einfluß der Fluktuationen studiert werden muß. Dazu betrachte man Abbildung (1.9). Man sieht ein symmetrisches Potential, das ein globales Minimum bei $l = 0$ besitzt, aber darüber hinaus einen repulsiven Bereich bei endlichem l hat. Das obige Mean-Field Argument liefert wieder die Aussage, daß unabhängig von der Stärke des repulsiven Bereichs des Potentials, die Fläche gebunden ist, solange bei $l = 0$ ein globales Minimum besteht. Der Einfluß der Fluktuationen kann aber dafür sorgen, daß ein Phasenübergang zu einer freien Phase schon bei endlicher Tiefe des Potentialminimums auftreten kann. Auch hier prognostiziert die mittlere Feld-Näherung einen Phasenübergang erster Ordnung, wenn das Minimum bei $l = 0$ einen Nulldurchgang hat und die Potentialbarrieren endlich bleiben. Es wird daher ebenfalls für die Aufrauungsphänomene eine systematische Theorie benötigt, die das richtige kritische Verhalten liefert.

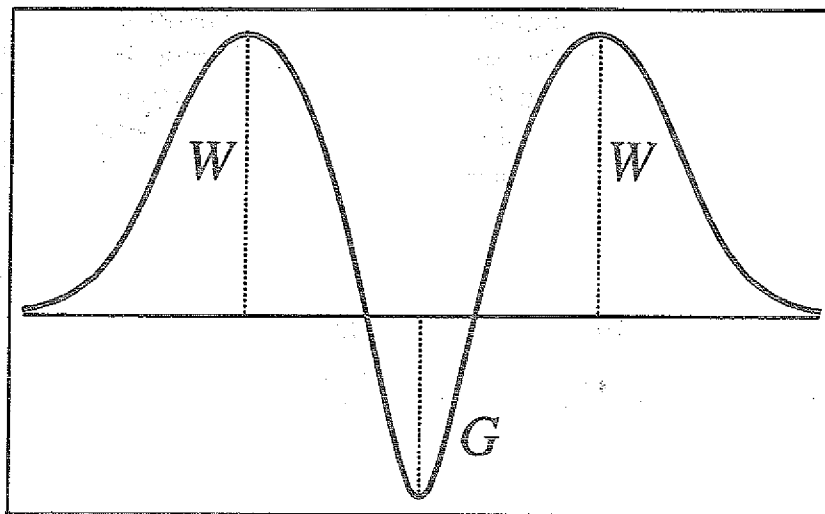


Abbildung 1.9: Ein symmetrisches Potential mit einer Barriere bei endlichem Abstand l . Die mittlere Feld Näherung sagt unabhängig von W immer einen gebundenen Zustand voraus, solange $G < 0$ ist.

2 Entbindungsübergänge von Membranen und Grenzflächen

In diesem Kapitel werden Adhäsionsübergänge von Membranen und Benetzungsübergänge von Grenzflächen untersucht. Obwohl beide Systeme verschieden sind, lassen sie sich doch im Rahmen des effektiven Grenzflächenmodells mit ähnlichen Methoden behandeln, vgl. Abschnitt (1.1.1). Beiden Systemen ist gemeinsam, daß sie einen Phasenübergang von einer gebundenen Phase zu einer ungebundenen Phase zeigen können, der durch thermische Fluktuationen modifiziert wird. Wie in der Einführung gezeigt wurde, kann die mittlere Feld Näherung in solchen Fällen nicht angewendet werden. Im Rahmen von funktionalen Renormierungsgruppen (RG) Rechnungen kann der Einfluß von thermischen Fluktuationen auf den Phasenübergang systematisch untersucht werden. Ein weiterer Vorteil dieser Methode liegt darin, daß sie einen allgemeinen Zugang zu diesen Phänomenen ermöglicht und darüber hinaus die Möglichkeit bietet, eine Klassifikation von physikalischen Systemen vorzunehmen, die ein identisches kritisches Verhalten zeigen.

Prinzipiell lassen sich *exakte* RG formulieren [84, 82, 83, 80, 41, 77], die aber leider schwer zu studieren sind. Daher vereinfacht man sie zweckmäßiger Weise, indem man geeignete approximative Schemata benutzt. Hier sollen zwei approximative RG benutzt werden. Die eine basiert auf einer *Hard-Cutoff* [82, 79] Prozedur, die andere auf einem *Soft-Cutoff* [84, 70, 76] Schema. Es wird sich zeigen, daß beide Approximationen zu konsistenten Aussagen führen.

2.1 Effektives Grenzflächenmodell und funktionale Renormierung

Der effektive Hamiltonian (1.17)

$$H\{l\} = \int d^{d-1}x \left\{ \frac{1}{2} K (\nabla^n l)^2 + V(l) \right\} \quad (2.1)$$

ist der Ausgangspunkt der RG Rechnung. Der lokale Abstand zweier $(d-1)$ -dimensionaler wechselwirkender Flächen wird mit $l(\vec{x})$ bezeichnet; für thermisch angeregte Undulationen ist die freie Energie pro Fläche gegeben durch: $\frac{1}{2}K(\nabla^n l)^2$, wobei im Membranfall K die effektive Biegesteifigkeit und $n = 1 + \zeta$ ist; bei Grenzflächen ist K die effektive Oberflächenspannung und $n = 1$. Der effektive Hamiltonian enthält einen impliziten "Cutoff" a für die kurzwelligen Fluktuationen, der von der Größe der Moleküle ist, die die Fläche bilden. Der zweite Term, die direkte Wechselwirkung, enthält bei Adhäsions- und Benetzungsphänomenen eine harte Wand bei $l = 0$, da die beiden Flächen sich nicht durchdringen können.

Die statistischen Größen des Modells, das durch (2.1) definiert ist, werden von der Zustandssumme

$$Z = \int D\{l\} e^{-H\{l\}/T} \quad (2.2)$$

abgeleitet, wobei $\int D\{l\}$ ein Pfadintegral über alle möglichen Flächenkonfigurationen bezeichnet.

Allgemein wirken RG Transformationen als nichtlineare Abbildungen im Funktionenraum der Wechselwirkungen [64, 82, 83, 80, 41, 77], hier der direkten Wechselwirkung. Sie wirken in zwei Schritten, die die Zustandssumme Z invariant lassen. Zuerst werden kurzwellige Fluktuationen ausintegriert. Im Hard-Cutoff (HC) Schema werden alle Fluktuationen $l_>$:

$$l_>(x) := \left(\int_p^\Lambda - \int_p^{\Lambda/(1+\delta s)} \right) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}} l(p), \quad (2.3)$$

die einen Wellenvektor in der Kugelschale mit Radius $\Lambda \sim a^{-1}$ und Dicke δs haben, ausintegriert. Mit $\int_p^\Lambda$ wird das Integral über die Impulse bezeichnet, das für große Impulse vom Cutoff $\Lambda \simeq 1/a$ abgeschnitten wird. Nach der Ausintegration hat das System dann den neuen Cutoff $a(1 + \delta s)$ [82, 79, 80].

Im Soft-Cutoff (SC) Verfahren sind prinzipiell alle Fluktuationen präsent, allerdings werden die kurzwelligen Moden durch eine Gewichtungsfunktion unterdrückt. Einer kompletten Ausintegration im HC Fall entspricht hier das teilweise Ausintegrieren von Moden, was dann auf eine neue Gewichtungsfunktion mit einer stärkeren Unterdrückung der kurzwelligen Fluktuationen führt [84, 70, 76].

Bei beiden Schemata wird das System in einem zweiten Schritt entsprechend

$$x' = x/(1 + \delta s), \quad (2.4)$$

$$l' = l/(1 + \zeta \delta s). \quad (2.5)$$

reskaliert. Im HC Fall stellt das sicher, daß der Cutoff wieder seinen ursprünglichen Wert a zurückerlangt. Im SC Fall fällt die Gewichtungsfunktion dann wieder auf ihrer ursprünglichen Längenskala ab. Das anisotrope Reskalieren von l mit dem Faktor ζ stellt sicher, daß der Hamiltonian der freien Fläche (2.1) invariant unter der RG Transformation ist, die Skaleninvarianz der freien Fläche also gesichert ist. Der Unterschied zwischen Membranen und Grenzflächen ist in diesem Schema lediglich durch verschiedene Werte von ζ gegeben [57, 56].

Allgemein erhält man für beide Verfahren eine Flußgleichung für das Wechselwirkungspotential. Um die Wirkung dieser Flußgleichung zu verstehen, könnte man die RG Gleichung aufintegrieren und den resultierenden RG Fluß studieren [51]. Diese Vorgehensweise ist jedoch sehr aufwendig und erfordert typischerweise eine große Anzahl von Iterationen. Statt dessen wollen wir eine globale Analyse der Fixpunktstrukturen durchführen, die eine systematische Untersuchung der Ordnung des Phasenübergangs und seiner universellen Eigenschaften erlaubt.

Die erste RG Transformation, die wir untersuchen wollen, ist eine Erweiterung [57, 56, 51] von Wilsons approximativen Rekursionen [82] und basiert auf einer Hard-Cutoff Prozedur. Für infinitesimalen Reskalierungsfaktor $b \rightarrow 1 + \delta s$ führt diese funktionale RG zu den Flußgleichungen [57, 56, 51]

$$\frac{\partial U}{\partial s} = \zeta \left[\tau U + y \frac{\partial U}{\partial y} + \ln \left(1 + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right) \right] \quad (2.6)$$

mit $\tau = d_{\parallel}/\zeta$ und dimensionslosen Variablen $y \sim l$ und $U \sim V$.

Im Rahmen des SC Schemas führt die Konstruktion einer anderen approximativen RG [80, 84, 76] auf die Flußgleichung:

$$\frac{\partial U}{\partial s} = \zeta \left[\tau U + y \frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial U}{\partial y} \right)^2 \right]. \quad (2.7)$$

In beiden Fällen hängt der RG Fluß nur von dem Parameter $\tau = d_{\parallel}/\zeta$ ab. Der explizite Vorfaktor ζ kann für $\zeta \neq 0$ in s absorbiert werden. Die Anwendung der RG Rechnungen auf konkrete physikalische Systeme reduziert sich auf ein Auswerten der RG Transformation mit dem entsprechenden Parameter τ . Wir wollen deshalb eine globale Analyse der RG Gleichungen für verschiedene τ -Werte vornehmen.

2.1.1 Bifurkationsstruktur und Universalitätsklassen für Adhäsions- und Benetzungsübergänge

Die Rekursionsgleichungen (2.6) und (2.7) geben verlässliche Resultate für Grenzflächen in zwei Dimensionen [57, 56]. Dieses System ist charakterisiert

durch einen Parameter $\tau = 2$ und kann mit Hilfe von Transfer-Matrix Rechnungen exakt gelöst werden [18, 55], siehe auch Abb. 3.1 für das analoge Aufrauungsproblem. Die approximativen RGs geben kritische Exponenten mit Abweichungen von ein paar Prozent vom exakten Resultat.

Zuerst studieren wir die Fixpunkte $U^*(y)$ mit $\partial U^*/\partial s = 0$. Im HC Fall gehorchen sie der Gleichung

$$\tau U^* + y \frac{\partial U^*}{\partial y} + \ln \left[1 + \frac{\partial^2 U^*}{\partial y^2} \right] = 0, \quad (2.8)$$

und im SC Fall haben wir die Gleichung

$$\tau U^* + y \frac{\partial U^*}{\partial y} + \frac{\partial^2 U^*}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial U^*}{\partial y} \right)^2 = 0. \quad (2.9)$$

Die Fixpunktgleichungen (2.8) und (2.9) müssen durch geeignete Randbedingungen ergänzt werden. Für Entbindungsübergänge möchte man eine harte Wand bei $y = 0$ und für große y einen Abfall des Potentials nach Null haben. Diese Randbedingungen führen auf eine ganze *Linie* von Fixpunkten $U^*(y) = U^*(y|\sigma)$ mit $\sigma > 0$. Für den HC Fall ist das asymptotische Verhalten der Fixpunkte gegeben durch [56]

$$U^*(y) \approx \sigma/y^\tau + [(\tau + 2)/\tau] \ln y \quad (2.10)$$

für kleine y und durch

$$U^*(y) \approx \rho_L(\sigma)/y^\tau + \rho_S(\sigma)y^{\tau-1} \exp(-y^2/2) \quad (2.11)$$

für große y . Für den SC Fall führt eine asymptotische Analyse von (2.9) auf

$$U^*(y) \approx \ln(\sigma/y) + \frac{1}{6}y^2 \left[1 - \tau \left(\ln(\sigma/y) + \frac{5}{6} \right) \right] \quad (2.12)$$

für kleine y [31] und für große y auf dasselbe asymptotische Verhalten wie in (2.11).

Die Funktion $\rho_L(\sigma)$ für den potenzabfallenden Teil der Fixpunkte kann durch numerische Integration der beiden Fixpunktgleichungen (2.8) oder (2.9) mit jeweils (2.10) bzw. (2.12) als Anfangsbedingung erhalten werden. An (2.11) sieht man, daß alle Fixpunktpotentiale wie $y^{-\tau}$ abfallen, wenn die Funktion $\rho_L(\sigma)$ ungleich Null ist; falls jedoch $\rho_L(\sigma) = 0$ ist, ist das Fixpunktpotential kurzreichweitig und hat einen Gauß'schen Abfall. Die kurzreichweitigen Fixpunkte sind von besonderem Interesse, da physikalische Potentiale für wichtige

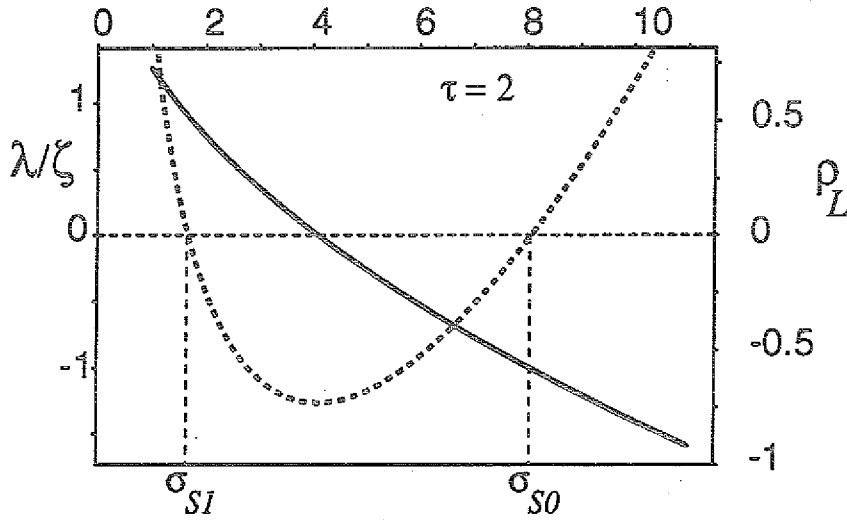


Abbildung 2.1: Die Funktion $\rho_L(\sigma)$ (gestrichelte Kurve) und die Eigenwerte $\lambda_j(\sigma)$ (durchgezogene Kurve) für $\tau = 2$. $\rho_L(\sigma)$ hat zwei Nullstellen, zu denen die beiden kurzreichweitigen Potentiale $U_{S0}^*(y)$ und $U_{S1}^*(y)$ gehören.

Systeme ebenfalls kurzreichweitig sind und ihr kritisches Verhalten demnach durch die Nullstellen der Funktion $\rho_L(\sigma)$ bestimmt ist.

Im folgenden soll die Funktion $\rho_L(\sigma)$ für verschiedene Parameter τ untersucht werden. Für kleine τ ist die Funktion $\rho_L(\sigma)$ konvex nach unten, mit einem Minimum bei σ_{E1} [56, 41, 77] und hat zwei Nullstellen bei $\sigma = \sigma_{S0}$ und $\sigma = \sigma_{S1}$, die den zwei kurzreichweitigen Fixpunkten $U_{S0}^*(y)$ und $U_{S1}^*(y)$ entsprechen, siehe Abb. (2.3). Die Funktion $\rho_L(\sigma)$ für $\tau = 2$ ist in Abb. (2.1) gezeigt. Die daraus folgende Struktur des Phasendiagramms ist in Abb. (2.2) zu sehen [57, 56].

Von der expliziten Form von $U_{S0}^*(y)$ und $U_{S1}^*(y)$ schließt man, daß sie zur kritischen bzw. ungebundenen Phase gehören. Wir werden das später verifizieren, wenn die Eigenstörungen um Fixpunktpotentiale untersucht werden. Da diese beiden Fixpunkte die einzigen kurzreichweitigen sind, ist das kritische Verhalten von allen Wechselwirkungen, die wie y^{-m} , mit $m > \tau$, abfallen, durch das Paar $U_{S0}^*(y)$ und $U_{S1}^*(y)$ bestimmt. Die so definierte Gruppe von Wechselwirkungen zeigt ein identisches kritisches Verhalten und bildet das Regime starker Fluktuationen, das (SFL) Regime [56, 51]. Das Regime intermediärer Fluktuationen (IFL Regime) wird durch die Wechselwirkungen gebildet, die wie $y^{-\tau}$ abfallen. Wie wir weiter unten sehen werden, zeigt das IFL Regime

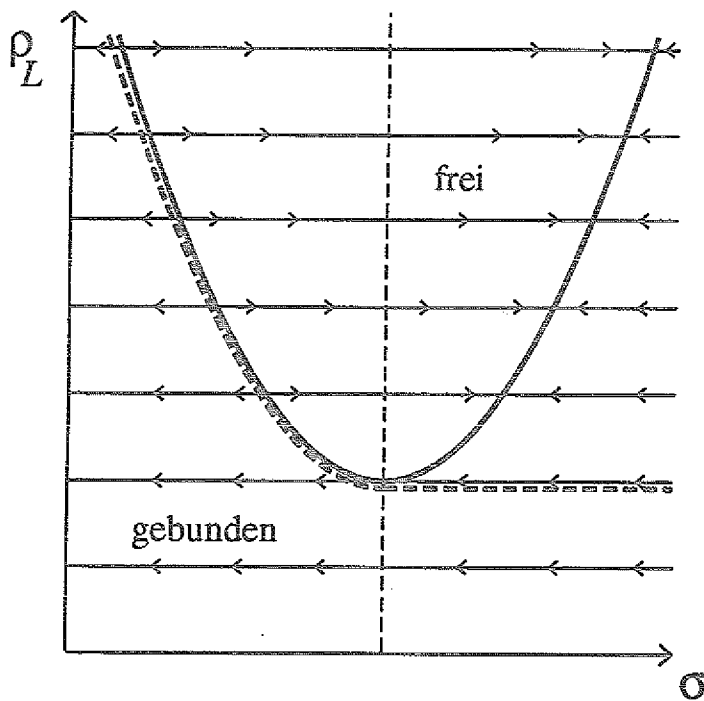


Abbildung 2.2: Phasendiagramm und der parabolische RG Fluß für $\tau = 2$, der aus (2.1) folgt. Die Phasengrenze ist gestrichelt dargestellt und besteht aus zwei Teilen:

- (i) dem parabolischen Teil, an dem die Fixpunkte eine relevante Eigenstörung haben, die kontinuierlich von σ abhängt. Potentiale, die links von diesem Parabelast in die (ρ_L, σ) -Ebene abgebildet werden, haben ein globales Minimum, welches unter der RG Transformation immer tiefer ausgebildet wird. Die Fläche ist gebunden. Potentiale, die zwischen die Parabeläste in die (ρ_L, σ) -Ebene abgebildet werden, treiben unter der RG Transformation auf den rechten Parabelast zu, der aus rein attraktiven Fixpunkten besteht. Aus der rein repulsiven Form dieser Fixpunkte folgt, daß die Fläche frei ist.
- (ii) aus einer Line, die in den Scheitel der Parabel mündet. Die laterale Korrelationslänge divergiert hier wie eine wesentliche Singularität bei Annäherung an die Phasengrenze; R. Lipowsky, 1988, Ref. [56, 57].

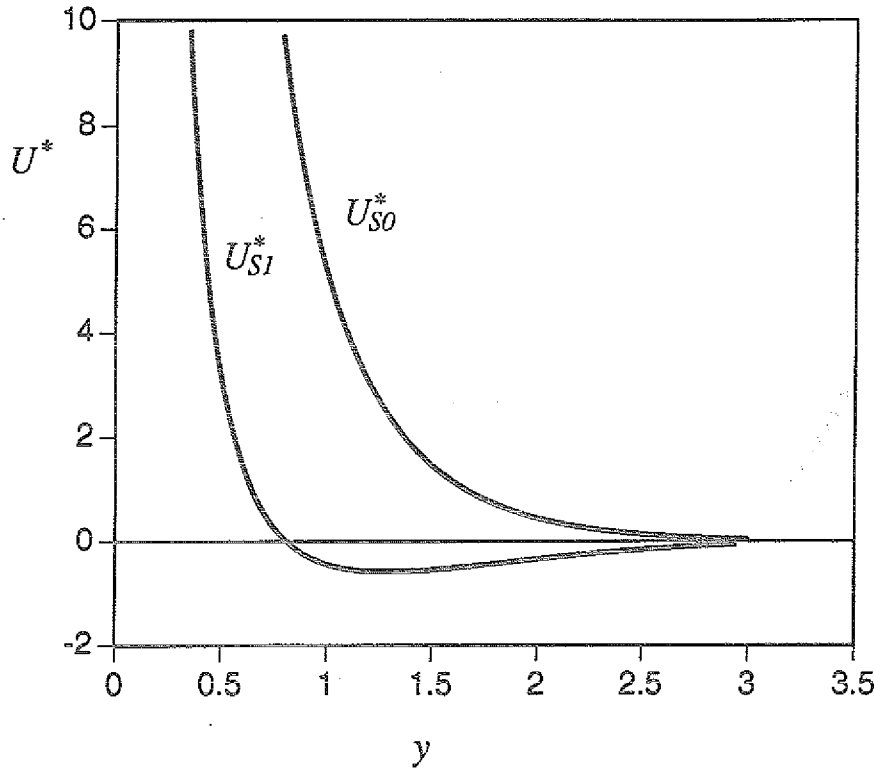


Abbildung 2.3: Die beiden kurzreichweitigen Potentiale $U_{S0}^*(y)$ und $U_{S1}^*(y)$ für $\tau = 2$. Sie repräsentieren jeweils die ungebundene bzw. die kritische Phase.

nichtuniverselles Verhalten, da die kritischen Exponenten von der Amplitude des Potenzabfalls abhängen.

Die *Universalität* des SFL Regimes gilt solange, bis die Funktion $\rho_L(\sigma)$ weitere Nullstellen hat. Das geschieht bei größeren Werten von τ , da dann die Funktion $\rho_L = \rho_L(\sigma)$ mehr Struktur entwickelt.

Zuerst hat $\rho_L(\sigma)$ bei einem bestimmten Wert $\tau = \tau_2$ einen Sattelpunkt der bei $\sigma = \sigma_{E2}$ mit $\sigma_{E2} < \sigma_{S1}$ liegt, siehe Bild (2.4). Aus diesem Sattelpunkt bifurkiert für $\tau > \tau_2$ ein zusätzliches Minimum und Maximum von $\rho_L(\sigma)$ heraus, die die σ -Werte $\sigma = \sigma_{E2}$ und σ_{E2} haben, vgl. Bild 2.5. Das neue Minimum bei $\sigma = \sigma_{E2}$ bewegt sich nach unten für zunehmendes τ und schneidet die σ -Achse bei $\tau = \tau_{S2} > \tau_2$, vgl. Tabelle 2.1. Die Funktion $\rho_L(\sigma)$ hat nun vier Nullstellen.

Wenn τ noch weiter erhöht wird, tritt ein weiterer Sattelpunkt bei $\tau = \tau_3$ auf, der zwischen dem Minimum und dem Maximum der vorherigen Bifurkation liegt. Aus diesem Sattelpunkt entwickelt sich ein neues Paar von Extrema von $\rho_L(\sigma)$, das bei $\sigma = \sigma_{E3}$ und σ_{E3} liegt, siehe Abb. 2.6. Für $\tau > \tau_{S2} > \tau_3$ hat $\rho_L(\sigma)$ ein weiteres Paar von Nullstellen σ_{S3}, σ_{S3} . Die Bifurkationen von $\rho_L(\sigma)$ spiegeln sich auch in einer Zunahme von relevanten Eigenstörungen wieder, die jetzt betrachtet werden sollen.

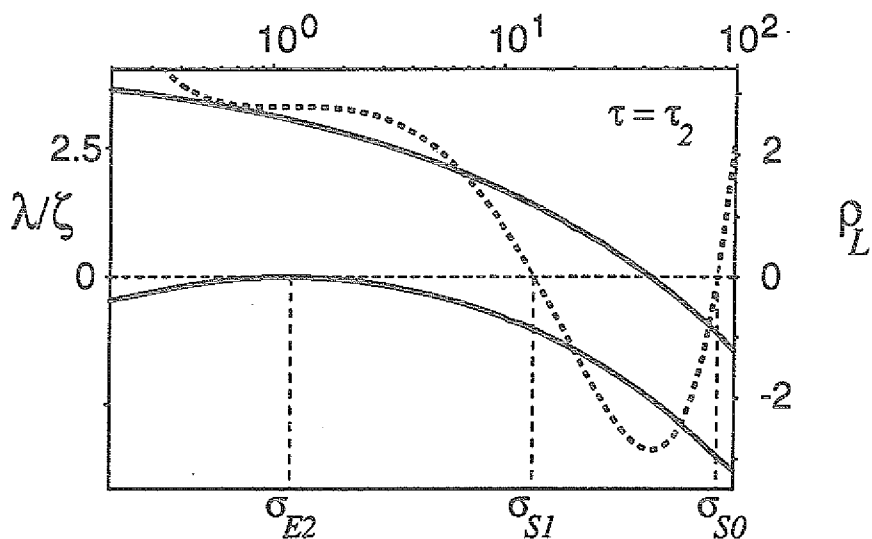


Abbildung 2.4: Die Funktion $\rho_L(\sigma)$ (gestrichelte Kurve) und die Eigenwerte $\lambda_j(\sigma)$ (durchgezogene Kurve) für $\tau = \tau_2$. Bei $\sigma = \sigma_{E2}$ zeigt $\rho_L(\sigma)$ einen Sattelpunkt und $\lambda_2(\sigma)$ berührt die σ -Achse.

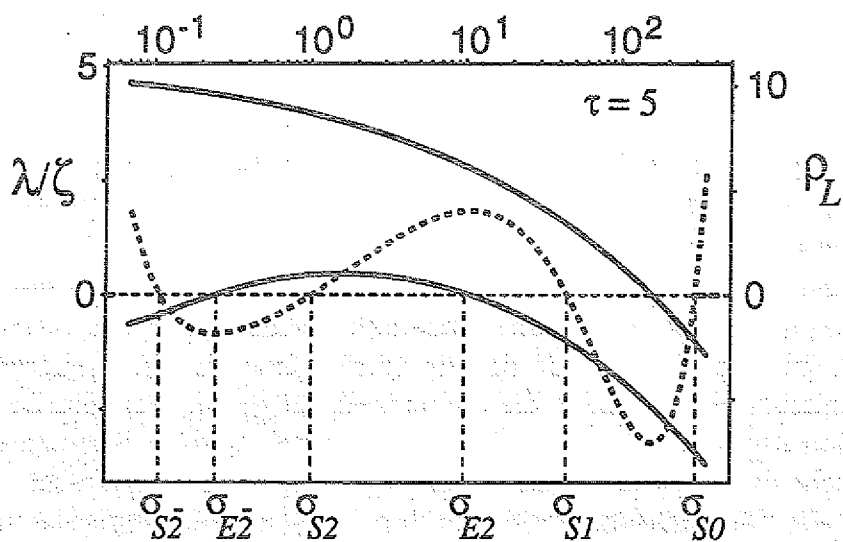


Abbildung 2.5: Dieselben Funktionen wie in Abb. 2.4 für $\tau = 5 > \tau_2$. $\rho_L(\sigma)$ hat jetzt vier Nullstellen. Zwischen σ_{E2} und σ_{E2} ist ein zweiter Eigenwert relevant.

Die Eigenstörungen $f_\lambda(y)$ am Fixpunkt $U^*(y)$ sind durch

$$\left(\tau - \frac{\lambda}{\zeta}\right) f_\lambda + y \frac{\partial f_\lambda}{\partial y} + \left[1 + \frac{\partial^2 U^*}{\partial y^2}\right]^{-1} \frac{\partial^2 f_\lambda}{\partial y^2} = 0 \quad (2.13)$$

für den HC Fall und durch

$$\left(\tau - \frac{\lambda}{\zeta}\right) f_\lambda + y \frac{\partial f_\lambda}{\partial y} - 2 \frac{\partial U^*}{\partial y} \frac{\partial f_\lambda}{\partial y} + \frac{\partial^2 f_\lambda}{\partial y^2} = 0 \quad (2.14)$$

für den SC Fall gegeben. Im HC Fall verhält sich f_λ wie [56]:

$$f_\lambda \sim 1/y^{\tau-\lambda/\zeta} \quad \text{für kleine } y \quad (2.15)$$

und wie

$$f_\lambda(y) \approx C/y^{\tau-\lambda/\zeta} + D y^{\tau-1-\lambda/\zeta} \exp(-y^2/2) \quad (2.16)$$

für große y . Im SC Fall finden wir

$$f_\lambda(y) \approx 1 - (\tau - \lambda/\zeta) y^2/6 \quad (2.17)$$

für kleine y und dasselbe Verhalten wie in (2.16) für große y .

Relevante Störungen mit einem Potenzabfall $C/y^{\tau-\lambda/\zeta}$ würden den Schwanz von U^* dominieren und dann Potentiale, die wie $y^{-\tau}$ oder schneller abfallen, aus dem SFL bzw. IFL Regime heraustreiben. Daher fordern wir für alle erlaubten Eigenstörungen:

$$C = C(\lambda/\zeta, \sigma) = 0, \quad (2.18)$$

sowohl im HC als auch im SC Fall [56, 57, 31]. Diese Bedingung selektiert einen *diskreten* aber *unendlichen* Satz von *kurzreichweitigen* Eigenstörungen mit den dazugehörigen Eigenwerten aus.

In Analogie zur Funktion $\rho_L(\sigma)$ können die Eigenstörungen für ein vorgegebenes Fixpunktpotential $U^*(y|\sigma)$ numerisch berechnet werden. Dazu integriert man die Funktion f_λ mit dem in (2.15), bzw. in (2.17) gegebenen Anfangsverhalten solange auf, bis die Asymptotik für große y erreicht ist. Bei der Integration wird der Wert $C = C(\lambda/\zeta, \sigma)$ ermittelt und im Rahmen einer Nullstellensuche durch Variation des Eigenwertes λ/ζ auf Null gebracht.

Es ergibt sich dann das folgende Bild: Für $\sigma > \sigma_{E1}$ sind alle Eigenstörungen irrelevant. Wenn σ kleiner wird, erscheint eine relevante Eigenstörung mit Eigenwert $\lambda_1 > 0$ zuerst bei $\sigma = \sigma_{E1}$, dh. beim Minimum von $\rho_L(\sigma)$. Für $\tau < \tau_2$ ist für jeden Wert von σ keine andere Eigenstörung relevant. Der daraus folgende parabolische RG Fluß [56] ist in Abb. (2.2) dargestellt.

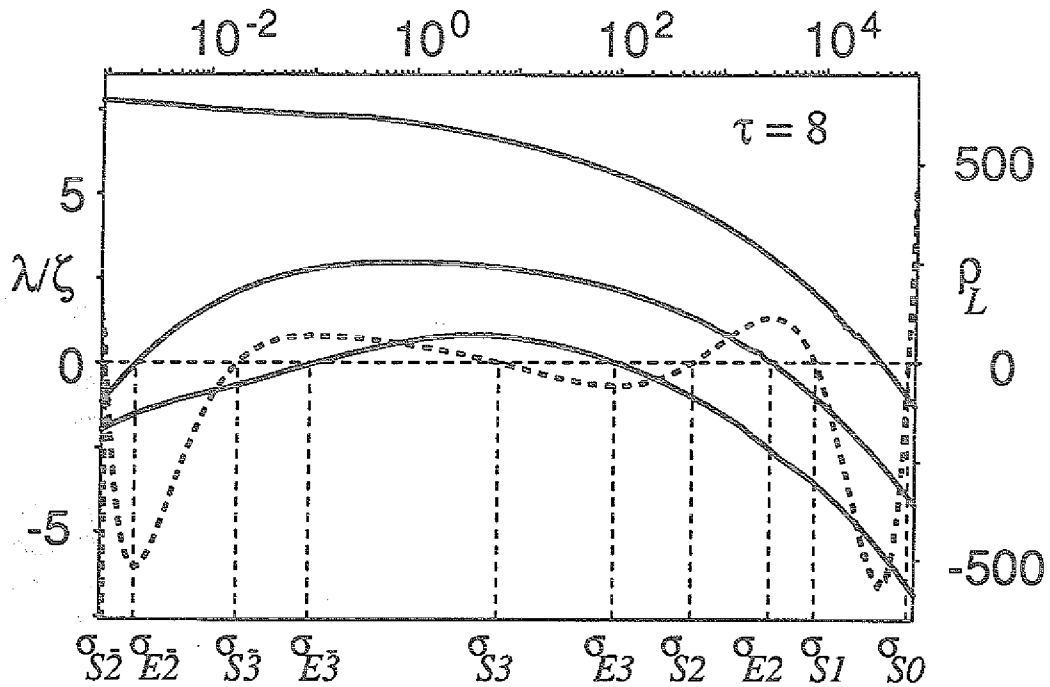


Abbildung 2.6: Für $\tau = 8 > \tau_3$ ist die Bifurkationsstruktur zu sehen. $\rho_L(\sigma)$ hat jetzt sechs Nullstellen. Zwischen σ_{E2} und σ_{E2} bleibt der zweite Eigenwert relevant. Zusätzlich ist ein dritter Eigenwert im Intervall $(\sigma_{E3}, \sigma_{E3})$ relevant.

Wenn jedoch $\tau = \tau_2$ erreicht ist, berührt eine zweite kurzreichweitige Eigenstörung mit Eigenwert $\lambda_2 = \lambda_2(\sigma)$ die σ -Achse bei $\sigma = \sigma_{E2}$, siehe Abb. 2.4. Für $\tau > \tau_2$, wird λ_2 im σ -Bereich zwischen $\sigma_{E2} < \sigma < \sigma_{E2}$ relevant. Für $\tau = \tau_3$, berührt ein dritter Eigenwert, $\lambda_3 = \lambda_3(\sigma)$, die σ -Achse und wird für $\tau > \tau_3$ im Intervall $\sigma_{E3} < \sigma < \sigma_{E3}$ relevant, siehe Abb. 2.6. Man sieht die Verknüpfung zwischen neuen Paaren von Extrema der Funktion $\rho_L(\sigma)$ und dem Auftauchen neuer relevanter Eigenwerte. Da es eine unendliche Anzahl von kurzreichweitigen Eigenstörungen gibt, wiederholt sich diese Art von Bifurkation unendlich oft, wenn τ nach Unendlich geht.

Verbunden mit der relevantesten Eigenstörung sind die kritischen Exponenten des Systems. Der kritische Exponent $\nu_{||}$ beschreibt die Divergenz der lateralen Korrelationslänge $\xi_{||}$ und ist durch

$$\nu_{||} = 1/\lambda_1 \quad (2.19)$$

für $\sigma \leq \sigma_{E1}$ gegeben [56, 57]. Alle anderen kritischen Exponenten können über Skalengesetze durch $\nu_{||}$ oder λ_1 ausgedrückt werden [53]. Der Exponent ψ für den mittleren Abstand der Flächen und der Exponent $\nu_{\perp}$ der Rauigkeit der Fläche genügen:

$$\psi = \nu_{\perp} = \zeta \nu_{||} = \zeta / \lambda_1. \quad (2.20)$$

Der Exponent α für die spezifische Wärme ist durch

$$2 - \alpha = d_{\parallel} \nu_{\parallel} = \tau \psi = \tau / (\lambda_1 / \zeta) \quad (2.21)$$

bestimmt.

Eine Betrachtung der Funktion $\rho_L(\sigma)$ zeigt, daß sich der Eigenwert λ_1/ζ dem Wert τ annähert, wenn σ nach Null geht, siehe dazu die Abb. (2.5) und (2.6), jeweils für $\tau = 5$, bzw. $\tau = 8$. Praktisch ist dies schon für σ -Werte, die kleiner als das σ sind, bei dem die letzte Bifurkation stattfand, erfüllt. Es gilt dann, daß $2 - \alpha \simeq 1$ ist: der Phasenübergang ist von *erster Ordnung*.

Der generische RG Fluß für $\tau_{S2} < \tau < \tau_3$ ist in Abb. 2.7 dargestellt. Der Parameter ρ_L ist durch den langreichweitigen Schwanz der direkten Wechselwirkung bestimmt, während die Koordinaten ρ_1 und ρ_2 die zwei kurzreichweitigen Störungen mit λ_1 und λ_2 repräsentieren. Dieser dreidimensionale Parameter-raum enthält eine zweidimensionale Separatrix zwischen den gebundenen- und den ungebundenen Zuständen, siehe Abb. 2.7. In der Separatrix selbst ist eine Linie von trikritischen Punkten, die eine (schraffierte) Region von Übergängen *erster Ordnung*, von einer (unschraffierten) Region von Übergängen *zweiter Ordnung* trennt.

Der RG Fluß in dem dreidimensionalen Parameterraum ist auf Ebenen mit konstantem ρ_L eingeschränkt. Für $\rho_L \neq 0$, beschreibt der Fluß die Renormierung solcher Potentiale $U^*(y)$, die wie $U^*(y) \sim 1/y^\tau$ für große l abfallen. Für $\rho_L = 0$ andererseits bestimmt der RG Fluß das kritische Verhalten im SFL Regime [54]. Eine Betrachtung von Abb. (2.5) zeigt, daß die Ebene mit $\rho_L = 0$ vier Schnittpunkte mit der Linie von Fixpunkten hat. Das SFL Regime ist also für $\tau_{S2} < \tau < \tau_{S3}$ durch vier kurzreichweitige Fixpunkte mit $\rho_L = 0$ bestimmt.

Der Übersicht halber wurden nur Abbildungen gezeigt, die mit Hilfe des HC Schemas gewonnen wurden. Im Rahmen der Soft-Cutoff Renormierung zeigt sich eine identische Bifurkationsstruktur. Zum Vergleich sind die numerischen Resultate für die beiden Approximationsschemata in Tabelle 2.1 dargestellt. Der Exponent $\psi = \zeta/\lambda_1$ (σ_{S1}), dargestellt in Tabelle 2.1, gehört zum kurzreichweitigen Fixpunkt $U^*(y|\sigma_{S1})$ für kritisches Entbinden im SFL Regime. Es folgt aus Tabelle 2.1, daß die zwei RGs den Wert $\tau_{S2} = 4.6 \pm 0.2$ vorhersagen. Eine konservativere Abschätzung erhält man, wenn man die beiden ψ -Werte für $\tau = 2$ mit dem exakten Wert $\psi = 1$ vergleicht. Dann führen HC Schema und SC Schema jeweils auf: $\tau_{S2} = 4.8 \pm 0.3$, bzw. $\tau_{S2} = 4.5 \pm 0.4$. Alle Abschätzungen sind daher konsistent mit der Grenze $\tau_{S2} \gtrsim 4$.

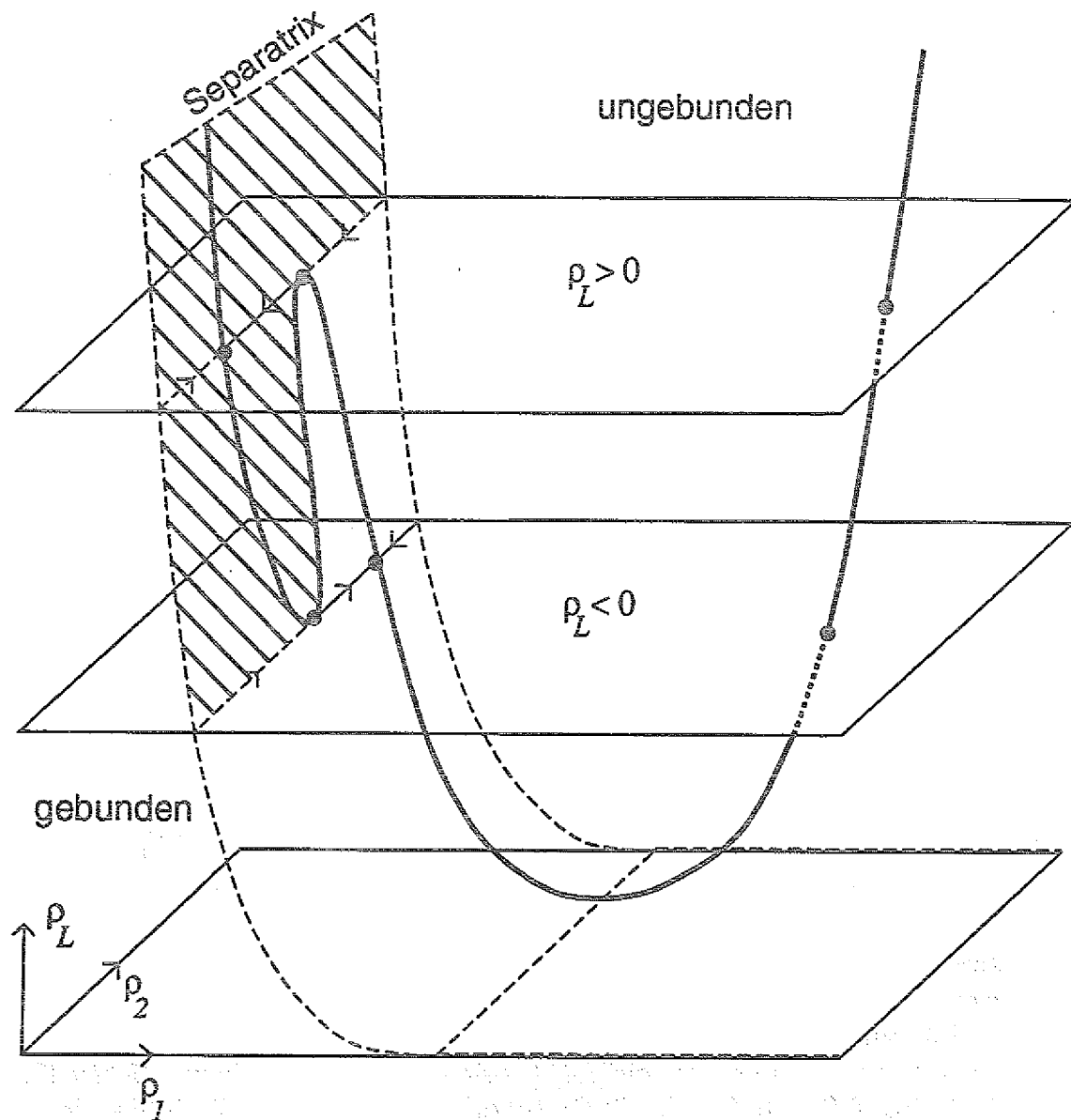


Abbildung 2.7: Fixpunkt-Struktur und RG Fluß für $\tau_{S2} < \tau < \tau_3$. Die Linie von Fixpunkten (durchgezogene Kurve) bestimmt (i) die freien, ungebundenen Zustände und (ii) die Separatrix für Entbindungsübergänge. In der Separatrix liegt eine Linie von trikritischen Punkten, die eine schraffierte Region von Phasenübergängen erster Ordnung von einer unschraffierten Region mit Phasenübergängen zweiter Ordnung trennt.

	$\tau \psi$	$\tau = \tau_2 \psi$	$\tau = \tau_{S2} \psi$	$\tau \psi$	$\tau = \tau_3 \psi$	$\tau = \tau_{S3} \psi$	$\tau \psi$
HC	2 1.06	4.175 0.71	4.797 0.66	5 0.65	6.615 0.58	7.342 0.52	8 0.49
SC	2 1.12	4.077 0.69	4.491 0.66	5 0.62	6.113 0.56	6.613 0.53	8 0.48

Tabelle 2.1: Numerische Resultate für charakteristische τ -Werte τ_2 , τ_{S2} , τ_3 und τ_{S3} , und für den kritischen Exponenten $\psi = \zeta/\lambda_1(\sigma_{S1})$ wie er aus den Hard-Cutoff (HC) und dem Soft-Cutoff (SC) Schema folgt.

2.1.2 Die Ordnung des Adhäsionsübergangs für reale Membranen

Mit Hilfe der obigen Abschätzung soll jetzt untersucht werden, inwieweit reale Membranen universelles Verhalten zeigen. Die attraktiven van der Waals Kräfte können zu einem gebundenen Zustand von realen Membranen führen auch wenn kein äußerer Druck vorhanden ist [72]. Die entsprechende direkte Wechselwirkung fällt wie $\sim 1/l^4$ für großen Abstand l ab, siehe (1.22). Das bedeutet, daß für fluide Membranen mit $\tau = 2$ die van der Waals Wechselwirkung zum SFL Regime gehört. Für $\tau = 2 < \tau_{S2}$ zeigt das SFL Regime universelles Verhalten: Alle Entbindungsübergänge sind bestimmt durch den kurzreichweitigen Fixpunkt $U^*(y|\sigma = \sigma_{S1})$ und müssen so von *zweiter Ordnung* sein.

Für polymerisierte Membranen ist die Situation nicht so einfach. Für $\zeta = 0.5$ und $\tau = 4$ gehören die polymerisierten Membranen zum 'intermediate fluctuation' (IFL) Regime, da die fluktuationsinduzierte Wechselwirkung denselben Potenzabfall hat wie die nichtretardierte van der Waals Wechselwirkung. Im IFL Regime sind die kritischen Exponenten nichtuniversell und hängen von der Amplitude des Potenzschwanzes ab, siehe z.B. Abb. (2.5). Übergänge von erster Ordnung können in diesem Regime auftreten, aber für Wechselwirkungen mit nur einem Minimum ist der Übergang von zweiter Ordnung. Falls $\zeta > 0.5$ ist, gehört die van der Waals Wechselwirkung ebenfalls zum SFL Regime mit universellen Exponenten und wir können nichtuniverselles Verhalten ausschließen, welches wir für $\tau > \tau_{S2}$ gefunden haben.

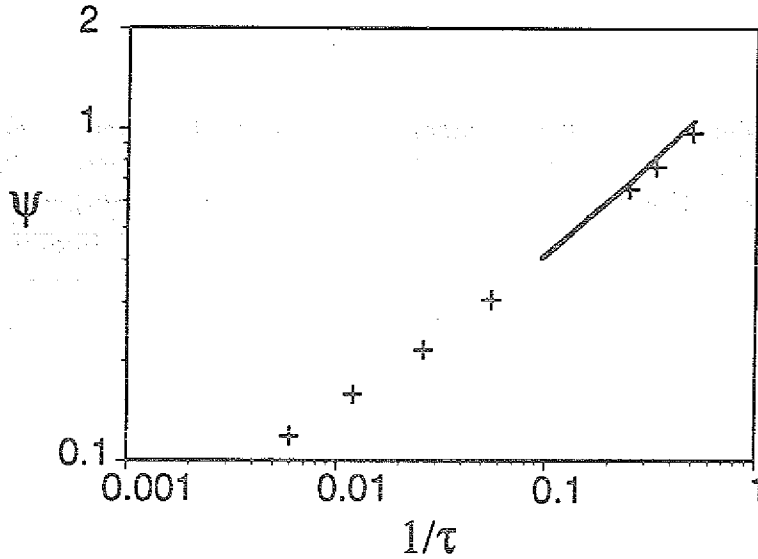


Abbildung 2.8: Der kritische Exponent ψ für den Fixpunkt U_{S1}^* als eine Funktion von $1/\tau$. ψ -Werte, mit (+) bezeichnet, wurden durch eine RG mit endlichem Reskalierungsfaktor $b = 2$ erhalten.[57, 56, 51] Der Unterschied zwischen beiden RG Schemata ist von der Ordnung von ein paar Prozent. Aus den numerischen Rechnungen erhält man $\psi \sim (1/\tau)^{1/2}$ für große τ .

2.1.3 Membranen mit lateraler Spannung und der Limes für großes τ

Zweidimensionale Membranen unter lateraler Spannung und zweidimensionale Grenzflächen in drei Dimensionen sind marginal rau [12, 37] und durch $\tau = \infty$ charakterisiert, was offensichtlich größer als $\tau = \tau_{S2}$ ist. Daher können solche Flächen auch im SFL Regime Phasenübergänge erster Ordnung zeigen. Die van der Waals Anziehung gehört nun in das weak-fluctuation Regime. In diesem Regime ist aber eine Superposition der direkten Wechselwirkung $V(l)$ und der fluktuationsinduzierten Wechselwirkung $V_{FL}(l) \sim \exp(-l/l_0)$ zulässig [50, 54] und führt auf Übergänge erster Ordnung, siehe Abb. 1.8 in der Einführung.

Der Exponenten $\nu_{||}$ und ψ für das SFL Regime zeigen aber singuläres Verhalten für große τ . Man betrachte zum Beispiel den Exponenten ψ für das Fixpunktpotential U_{S1}^* welcher gegen τ in Abb. 2.8 aufgetragen wurde.

Der doppelt logarithmische Plot suggeriert ein Potenzverhalten von ψ wie $\psi \sim (1/\tau)^b$ für große τ mit $b \simeq 1/2$. Wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden, sagen analytische Betrachtungen $b = 1/3$ voraus. Aus beiden Resultaten schließen wir

$$\psi = 0 \text{ und } \nu_{||} = \infty \text{ für } \tau = \infty. \quad (2.22)$$

Für $\tau = \infty$ hat die nichtlineare RG keine Fixpunkte, die kompatibel mit der Randbedingung einer harten Wand sind, vgl. Abschnitt (2.2) und auch

Ref. [51]. Einige frühere Arbeiten verwendeten deshalb die linearisierte Form der nichtlinearen RG, um mit einem Matching-Verfahren das kritische Verhalten des Entbindungsübergangs von Grenzflächen in drei Dimensionen für kurzreichweitige Potentiale herauszufinden [11, 49, 19]. Wenn die Bedingung der harten Wand in das Matching-Verfahren eingebaut wird, findet man drei Regimes. Von diesen Regimes ist jedoch kein Regime dabei, das die Exponenten zeigt, die in (2.22) im Limes $\tau \rightarrow \infty$ erreicht werden. Im Limes von großen τ passen die Resultate der nichtlinearen RG daher nicht mit den Resultaten der linearen RG für $\tau = \infty$ zusammen.

2.2 Der Limes für große τ : Driftende Fixpunkte

Wenn man das Verhalten der Fixpunkte im Limes $\tau \rightarrow \infty$ studiert, wird man auf das Konzept der 'driftenden Fixpunkte' geführt. Dazu betrachte man die kurzreichweitigen Fixpunkte der nichtlinearen RG. Abbildung (2.9) zeigt alle kurzreichweitigen Fixpunktpotentiale $U_{S_i}^*, U_{S_i}^*$ der Hard-Cutoff Renormierung für $\tau = 8$. Man sieht, daß die Form von $U_{S_1}^*$, $U_{S_2}^*$ und $U_{S_3}^*$ sich der von $U_{S_0}^*$ angeglichen hat, das Minimum von $U_{S_1}^*$ beispielsweise ist fast völlig verschwunden. Die Potentiale unterscheiden sich praktisch nur durch den Ort, an dem sie nach Null abfallen.

Die Fixpunkte $U_{S_i}^*$, die Phasenübergängen erster Ordnung entsprechen, sehen für große Abstände y asymptotisch wie die Fixpunkte $U_{S_{i-2}}^*$ aus, haben aber ein ausgeprägtes Minimum bei kleinen y . Der Ort des Minimum bleibt relativ konstant, wenn der τ -Wert geändert wird. Man sieht daher sofort ein, daß das kritische Verhalten der Fixpunkte, d.h. das Verhalten der relevantesten Eigenstörung nicht allein durch den asymptotischen Teil für große y der Fixpunkte gegeben sein kann. Sonst müßten ja z.B. $U_{S_2}^*$ und $U_{S_0}^*$ ein identisches kritisches Verhalten zeigen. $U_{S_2}^*$ hat aber eine relevante Eigenstörung, mit $\nu_{\parallel} = 1/\lambda \approx 1/d_{\parallel}$, während $U_{S_0}^*$ keine relevante Eigenstörung hat.

Man kann aber alle Potentiale danach klassifizieren, ob sie im Limes $\tau \rightarrow \infty$ eine Eigenstörung $\lambda \approx 1/d_{\parallel}$ haben oder nicht. Nach dieser Klassifizierung bilden dann alle $U_{S_i}^*$ und alle $U_{S_i}^*$ jeweils die beiden Klassen ohne, bzw. mit dieser Eigenstörung, wobei immer genau ein Paar $U_{S_i}^*$ und $U_{S_{i+2}}^*$ für große l ein identisches asymptotisches Verhalten zeigt.

Das Verhalten der kurzreichweitigen Fixpunktpotentiale kann analytisch verstanden werden. Dazu betrachten wir wieder die Fixpunktgleichung und

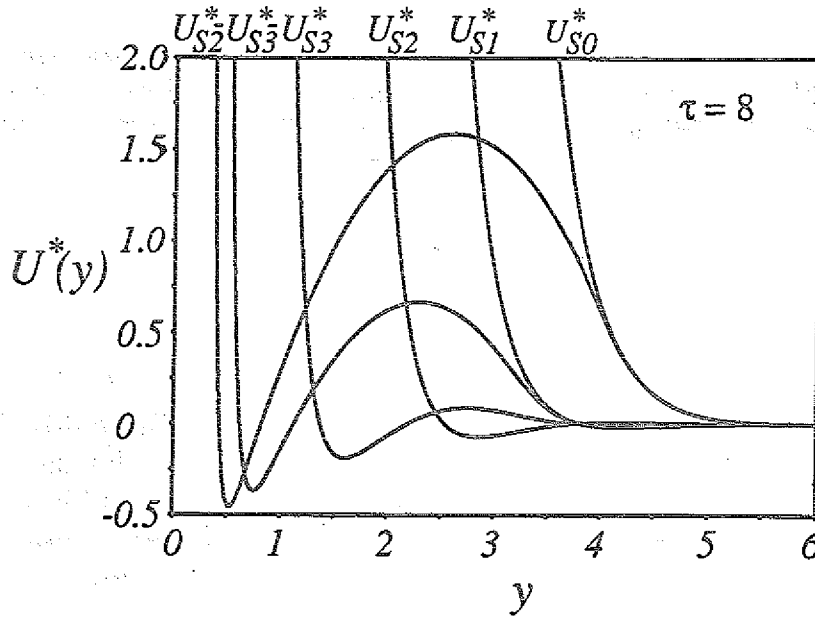


Abbildung 2.9: Alle kurzreichweitigen Fixpunkte für $\tau = 8$

die dazugehörige Eigenwertgleichung für die Hard-Cutoff Renormierung:

$$U^* + \frac{y}{\tau} \frac{\partial U^*}{\partial y} + \ln \left[1 + \frac{\partial^2 U^*}{\partial y^2} \right] = 0, \quad (2.23)$$

$$\left(1 - \frac{\lambda}{d_{\parallel}} \right) f_{\lambda} + \frac{y}{\tau} \frac{\partial f_{\lambda}}{\partial y} + \left[1 + \frac{\partial^2 U^*}{\partial y^2} \right]^{-1} \frac{\partial^2 f_{\lambda}}{\partial y^2} = 0. \quad (2.24)$$

Für die folgende Analyse wurde in den obigen Gleichungen die Größen U und y so umskaliert, daß der Parameter τ nun im Nenner des zweiten Term auftritt, der Einfachheit halber wurden die alten Bezeichnungen beibehalten.

Für große Abstände y kann die lineare Version der Fixpunktgleichung verwendet werden:

$$U^* + \frac{y}{\tau} \frac{\partial U^*}{\partial y} + \frac{\partial^2 U^*}{\partial y^2} = 0. \quad (2.25)$$

Die kurzreichweitige der beiden unabhängigen Lösungen ist gegeben durch:

$$U_{lin}^* = A D_{\tau-1}(y/\sqrt{\tau}) \exp(-y^2/(4\tau)), \quad (2.26)$$

mit $D_{\tau-1}(x)$ einer parabolischen Zylinderfunktion in Standardnotation [4]. Für ganzzahliges τ kann die parabolische Zylinderfunktion durch ein Hermite Polynom ausgedrückt werden, die Lösung kann dann in der Form

$$U_{lin}^* = A H_{\tau-1}(y/\sqrt{2\tau}) \exp(-y^2/(2\tau)) \quad (2.27)$$

geschrieben werden [65]. Die parabolischen Zylinderfunktionen, bzw. Hermite Funktionen, haben einen sogenannten Übergangspunkt (Turning-point), an dem der oszillierende Teil der Funktion in den monotonen Gaußisch abfallenden Teil der Funktion übergeht. Der Übergangspunkt ν_{tp} ist durch $(2\tau - 1)^{1/2}$ gegeben [6, 78]. Der kurzreichweitige Teil der asymptotischen Lösung, wie sie in (2.11) angegeben worden ist, gilt dann für $y/\sqrt{2\tau} \gg \nu_{tp}$ und lautet in dieser Skalierung:

$$U^*(y) \approx \rho_S(\sigma) y^{\tau-1} \exp(-y^2/(2\tau)). \quad (2.28)$$

Für $\tau = \infty$ gibt es keine Fixpunkte mehr, die kompatibel mit den Randbedingungen der harten Wand sind und für große y nach Null abfallen [51]. Man sieht das sofort, wenn man (2.23) für $\tau = \infty$ betrachtet: Es fehlt dann der zweite Term, der die Funktion einer Dämpfung hat. Ohne diesen Term sind die Fixpunkte für große y rein oszillatorisch, siehe auch (2.25). Umgekehrt ist der triviale Fixpunkt zwar kompatibel mit der Randbedingung für große y , aber offensichtlich nicht kompatibel mit der Bedingung einer harten Wand bei $y = 0$. Diese Eigenschaft der RG ist der Grund dafür, daß die Fixpunkte und Eigenstörungen im Limes $\tau \rightarrow \infty$ nichtanalytisch in τ sind. Der Fixpunkt U_{S1}^* beispielsweise, verschwindet erst für Abstände $y/\sqrt{2\tau} > \nu_{tp}$. Da aber der Turning-Point als Funktion von y linear mit τ anwächst, driftet der Bereich, in dem der Fixpunkt U_{S1}^* endlich ist, ebenfalls linear in τ nach Unendlich. Für große τ ist U_{S1}^* dann praktisch Unendlich wenn $y < \nu_{tp}$ ist.

Wir sind aber an dem Verhalten der Fixpunktfunktionen in der Nähe des Übergangspunktes interessiert und müssen eine Entwicklung der parabolischen Zylinderfunktion für $y/\sqrt{2\tau} = \mathcal{O}(\nu_{tp})$ machen. In der mathematischen Literatur findet man die gewünschte Entwicklung, die eine Integaldarstellung der Hermite Funktion benutzt und dabei mit Hilfe der Sattelpunktmethode zum Ziel führt. Da die zweite Ableitung einer Hilfsfunktion am Entwicklungspunkt verschwindet, muß die Integration in die komplexe Ebene gedreht werden. Das führt dann auf die Airy-Funktion $\text{Ai}(x)$, man erhält [6, 78]:

$$D_{\tau-1}(y/\sqrt{\tau}) \sim (\text{Ai}(t) + \mathcal{O}(\tau^{-2/3})), \quad (2.29)$$

wobei die neue Variable t mit y durch $y/\sqrt{2\tau} = \nu_{tp} + t/(\sqrt{2}(\tau - 1)^{1/6})$ zusammenhängt. In führender Ordnung erhält man:

$$y = 2\tau + \tau^{1/3}t - \frac{1}{2} + \mathcal{O}(\tau^{-2/3}). \quad (2.30)$$

Man kann jetzt diese Entwicklung benutzen, um das Verhalten der kurzreichweitigen Fixpunkte im Limes $\tau \rightarrow \infty$ zu studieren. Aus den numerischen

Resultaten weiß man, daß die Form aller kurzreichweitigen Fixpunkte U_{Si}^* gegen U_{S0}^* konvergiert, wobei die U_{Si}^* gegenüber U_{S0}^* verschoben sind. Das legt zusammen mit (2.30) nahe, die Abstandsvariable y wie $y = 2\tau + a\tau^b + z$ umzu skalieren. Dabei ist der erste Term (2τ) durch den Übergangspunkt definiert; der nächste Term ($a\tau^b$) ermöglicht die Verschiebung vom Übergangspunkt, die Parameter a und b sind hier noch nicht festgelegt und werden später an die jeweiligen Fixpunkte angepaßt; die neue Variable z schließlich mißt als Relativkoordinate den Abstand von $2\tau + a\tau^b$.

Die Variable t kann durch z ausgedrückt werden und man erhält als Näherung für das Fixpunktpotential:

$$U_{lin}^* \sim \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{y^2}{2\tau}\right) \{ \text{Ai}(a\tau^{b-\frac{1}{3}} + \tau^{-\frac{1}{3}}(z + \frac{1}{2})) + \mathcal{O}(\tau^{-2/3}) \}. \quad (2.31)$$

Schließlich wird noch der Zusammenhang zwischen y und z eingesetzt und die Airy-Funktion um $a\tau^{b-\frac{1}{3}}$ entwickelt. Es ergibt sich aus obiger Gleichung:

$$U_{lin}^* \sim \exp(-z) \{ \text{Ai}(a\tau^{b-\frac{1}{3}}) + \text{Ai}'(a\tau^{b-\frac{1}{3}}) \tau^{-\frac{1}{3}}(z + \frac{1}{2}) + \mathcal{O}(\tau^{-2/3}) \}. \quad (2.32)$$

Aus der numerischen Intergration der Fixpunktgleichung ist bekannt, daß die Fixpunktfunktion U_{S1}^* genau ein Minimum hat und alle weiteren Fixpunkte U_{Si}^* , mit $i > 1$, ein globales Minimum haben, das dem Minimum von U_{S1}^* entspricht. Die weiteren Minima der U_{Si}^* , mit $i > 1$, sind sehr viel schwächer ausgeprägt und verschwinden im Limes von großen τ sehr viel schneller als das jeweilige globale Minimum. Wenn also nun alle U_{Si}^* , mit $i > 0$, asymptotisch gleich aussehen sollen und das globale Minimum erhalten bleiben soll, wie es die Numerik nahe legt, muß der führende Term in (2.32), d.h. $\text{Ai}(a\tau^{b-\frac{1}{3}})$ verschwinden. Die Forderung $\text{Ai}(a\tau^{b-\frac{1}{3}}) = 0$ ist aber äquivalent zu:

$$a\tau^{b-\frac{1}{3}} = a_k \text{ bzw. } a\tau^b = a_k \tau^{\frac{1}{3}}. \quad (2.33)$$

Dabei ist a_k eine Nullstelle der Airy-Funktion (mit $a_k < 0$). Zuerst folgt aus diesem Resultat, das der Zusammenhang zwischen y und z gegeben ist über:

$$y = 2\tau + a_k \tau^{\frac{1}{3}} + z, \quad (2.34)$$

der Exponent $b = 1/3$ ist. In Ref. [16] wird Gl. (2.34) auf andere Weise gefunden. Weiter folgt aus dieser Parametrisierung, daß alle auftretenden U_{Si}^* mit $i > 0$ durch ein a_i gekennzeichnet werden können, also U_{S1}^* durch a_1 , U_{S2}^* durch a_2 und so fort. Wie schon oben bemerkt, sind dann die entsprechenden U_{Si}^* jeweils durch a_{i-2} charakterisiert. Da nur der lineare Teil der Fixpunktfunktion betrachtet wurde, kann keine Entscheidung getroffen werden, ob für ein gegebenes a_i die Fixpunktfunktion global U_{Si}^* oder $U_{S(i+1)}^*$ ist.

Da jetzt der Zusammenhang zwischen y und z bekannt ist, können wir nun umgekehrt Gleichung (2.34) wieder in die Fixpunktgleichung (2.23) und die Eigenwertgleichung (2.24) einsetzen, man erhält dann:

$$U^* + (2 + a_k \tau^{-2/3} + z \tau^{-1}) \frac{\partial U^*}{\partial z} + \ln \left[1 + \frac{\partial^2 U^*}{\partial z^2} \right] = 0, \quad (2.35)$$

$$\left(1 - \frac{\lambda}{d_{\parallel}} \right) f_{\lambda} + (2 + a_k \tau^{-2/3} + z \tau^{-1}) \frac{\partial f_{\lambda}}{\partial z} + \left[1 + \frac{\partial^2 U^*}{\partial z^2} \right]^{-1} \frac{\partial^2 f_{\lambda}}{\partial z^2} = 0. \quad (2.36)$$

Im Limes $\tau \rightarrow \infty$ erhalten wir die Gleichungen für einen sogenannten "driftenden" Fixpunkt und die Gleichung für die Eigenstörungen um diesen driftenden Fixpunkt:

$$U^* + 2 \frac{\partial U^*}{\partial z} + \ln \left[1 + \frac{\partial^2 U^*}{\partial z^2} \right] = 0, \quad (2.37)$$

$$\left(1 - \frac{\lambda}{d_{\parallel}} \right) f_{\lambda} + 2 \frac{\partial f_{\lambda}}{\partial z} + \left[1 + \frac{\partial^2 U^*}{\partial z^2} \right]^{-1} \frac{\partial^2 f_{\lambda}}{\partial z^2} = 0. \quad (2.38)$$

Formal kann man diese Gleichungen auch für $\zeta = 0$, bzw. $\tau = \infty$, erhalten, wenn man nicht nach Fixpunkten des RG Flusses sucht, wie im Abschnitt (2.1.1) geschehen, sondern nach driftenden Fixpunkten. Im Falle von infinitesimaler Reskalierung sind die driftenden Fixpunkte durch die Forderung

$$\frac{\partial U}{\partial s} = -v \frac{\partial U}{\partial y} \quad (2.39)$$

definiert. Das entspricht dann bei Renormierung mit endlichem Reskalierungsfaktor b der Bedingung: $\mathcal{R}[U_b^*(l)] = U_b^*(l - u(b))$ [51]. Hier wird bei einem Renormierungsschritt die Funktion um den Wert $u(b)$ verschoben. Im Limes $b = 1 + \delta s$ ergibt sich dann obige Bedingung, wobei der Zusammenhang $v = du(b)/db|_{b=1}$ gilt.

In Analogie zu der Untersuchung der Fixpunkte für $\tau < \infty$ kann man ebenfalls die driftenden Fixpunkte für $\tau = \infty$ untersuchen, was im nächsten Abschnitt geschehen soll. Wir stellen hier zunächst fest, daß die kurzreichweitigen Fixpunkte $U_{S_i}^*$ im Bereich des Übergangspunktes alle gegen den driftenden Fixpunkt mit $v = 2$ konvergieren. Das ermöglicht es, exakte analytische Aussagen für das Verhalten der Eigenstörungen im Limes $\tau \rightarrow \infty$ zu machen. Dazu betrachten wir jetzt die Gleichungen (2.35) und (2.36) für großes aber endliches τ und machen die Näherung $|z| \ll \tau$, man erhält:

$$U^* + (2 + a_k \tau^{-2/3}) \frac{\partial U^*}{\partial z} + \ln \left[1 + \frac{\partial^2 U^*}{\partial z^2} \right] \approx 0, \quad (2.40)$$

und

$$\left(1 - \frac{\lambda}{d_{\parallel}}\right) f_{\lambda} + (2 + a_k \tau^{-2/3}) \frac{\partial f_{\lambda}}{\partial z} + \left[1 + \frac{\partial^2 U^*}{\partial z^2}\right]^{-1} \frac{\partial^2 f_{\lambda}}{\partial z^2} \approx 0. \quad (2.41)$$

Die Fixpunktgleichung kann für z in der Nähe des Übergangspunktes wieder linearisiert werden und man erhält die allgemeine Lösung:

$$U_{lin}^* = \exp\{-z(1 + a_k \tau^{-2/3}/2)\} \{A_1 \cos(\sqrt{|a_k|} \tau^{-2/3} z) + A_2 \sin(\sqrt{|a_k|} \tau^{-2/3} z)\} \quad (2.42)$$

Wichtig ist, daß alle Lösungen mit $\exp\{-z(1 + a_k \tau^{-2/3}/2)\}$ abfallen.

Wenn wir die entsprechende Eigenwertgleichung für z ebenfalls in der Nähe des Übergangspunktes betrachten, kann im letzten Term $\frac{\partial^2 U^*}{\partial z^2}$ gegen 1 vernachlässigt werden und man erhält die allgemeine Lösung:

$$f_{\lambda} = \exp\{-z(1 + a_k \tau^{-2/3}/2)\} \{ B_1 \exp(-\sqrt{a_k \tau^{-2/3} + \lambda/d_{\parallel}} z) + B_2 \exp(\sqrt{a_k \tau^{-2/3} + \lambda/d_{\parallel}} z) \}. \quad (2.43)$$

Die Koeffizienten B_1, B_2 hängen wieder von den Anfangsbedingungen und von $\lambda/d_{\parallel}$ ab. In Analogie zu Abschnitt (2.1.1) könnte man nun wieder $\lambda/d_{\parallel}$ solange variieren, bis der Koeffizient $B_2 = 0$ ist, in diesem Falle würde dann die Eigenstörung nicht den driftenden Fixpunkt dominieren und man hätte einen erlaubten Eigenwert gefunden. Das Verfahren wäre allerdings hier schwer durchzuführen, da die Anfangsbedingungen bei $z \approx -2\tau$ festgelegt werden. Weiter ist bei $z \approx -2\tau$ die Näherung $|z| \ll \tau$ verletzt, die Voraussetzung für Gl. (2.41) ist.

Zum Glück fallen alle Fixpunktfunktionen mit einem Exponenten $(1 + a_k \tau^{-2/3}/2)$ exponentiell ab und wir müssen an alle relevanten Eigenwerte die Forderung stellen, daß das Argument der Wurzel in (2.43) nicht positiv sein darf. Dann fallen nämlich die entsprechenden Eigenfunktionen mit dem Exponenten $(1 + a_k \tau^{-2/3}/2)$ ab und dominieren somit nicht mehr die Fixpunktfunktion. Wir fordern also:

$$a_k \tau^{-2/3} + \lambda/d_{\parallel} \leq 0. \quad (2.44)$$

Der größte Eigenwert, $\lambda = \lambda_1$, der mit dieser Forderung verträglich ist, ist dann:

$$\lambda_1/d_{\parallel} = -a_k \tau^{-2/3}. \quad (2.45)$$

Aus der Numerik weiß man, daß der führende Eigenwert zu einer *monotonen* relevanten Eigenstörung gehört. Der größte mögliche Eigenwert, λ_1 , der durch (2.45) gegeben ist, ist aber auch gleichzeitig der einzige, dessen dazugehörige

Eigenfunktion monoton ist, da für ihn das Argument in der Wurzel gerade verschwindet.

Für a_1 , welches dem Fixpunkt mit nur einem Minimum, U_{S1}^* , entspricht, wissen wir aus der Numerik, daß U_{S1}^* nur eine relevante Eigenstörung hat und wir schließen also, daß (2.45) der gesuchte Eigenwert ist. Aber auch für die anderen Fixpunkte U_{Si}^* mit a_i und $i > 1$ gibt (2.45) den *größten* Eigenwert.

Weitere kleinere relevante Eigenwerte treten für die U_{Si}^* mit $i > 1$ auf, siehe Abschnitt (2.1.1), aber aus der Numerik weiß man, daß die dazugehörigen Eigenfunktionen, in Analogie zu den U_{S1}^* , ebenfalls gedämpft oszillatorisches Verhalten zeigen. Das steht im Einklang zu der Ungleichung (2.44), da dann die entsprechenden Eigenwerte zu einem negativen Argument in der Wurzel führen. Für alle Fixpunktfunktionen U_{Si}^* gilt also, daß der führende Eigenwert durch $\lambda_1 = -a_i \tau^{-2/3}$ gegeben ist. Der Eigenwert in Gleichung (2.45) ist exakt im Limes $\tau \rightarrow \infty$, da nur der lineare Teil der RG in die Rechnung eingegangen ist, welcher nicht approximativ ist.

Es ist der Verdienst von Ref. [16], daß dort die Umskalierung: $y = 2\tau + a_k \tau^{1/3} + z$ und die Verbindung zur Airy-Funktion gefunden wurde. Allerdings wurde in [16] übersehen, daß die Eigenfunktion zum größten Eigenwert ein monotonen Verhalten in der Variablen z zeigt. Die Argumentation, die dort zu dem Ausdruck für die Eigenwerte führt, trifft also nur für die kleineren relevanten Eigenwerte zu, für die die Ungleichung (2.44) nicht scharf genug ist. Es soll hier noch die Argumentation von [16] dargestellt werden.

Ausgangspunkt ist nun die Eigenwertgleichung (2.24) für große y , wo wieder im letzten Term $\frac{\partial^2 U^*}{\partial y^2}$ gegen die 1 vernachlässigt werden darf. Die kurzreichweitige Lösung ist:

$$f = A D_{\tau-\lambda/\zeta-1}(y/\sqrt{\tau}) \exp(-y^2/(4\tau)). \quad (2.46)$$

Wieder wird diese Lösung um der Übergangspunkt entwickelt, der nun durch $\nu_{tp} = (2(\tau - \lambda/\zeta) - 1)^{1/2}$ gegeben ist. Man hat:

$$D_{\tau-\lambda/\zeta-1}(y/\sqrt{\tau}) \sim (\text{Ai}(\tilde{t}) + \mathcal{O}(\tau^{-2/3})), \quad (2.47)$$

wobei die neue Variable $\tilde{t}$ mit y durch $y/\sqrt{2\tau} = (2(\tau - \lambda/\zeta) - 1)^{1/2} + t/(\sqrt{2}(\tau - \lambda/\zeta - 1)^{1/6})$ zusammenhängt. Da aber jetzt schon durch die Fixpunktfunktion die Umskalierung $y = 2\tau + a_k \tau^{1/3} + z$ festgelegt ist, folgt für $\tilde{t}$:

$$\tilde{t} = a_k + (z + \frac{1}{2} + \frac{\lambda}{\zeta}) \tau^{-1/3} \quad (2.48)$$

Wieder wird noch der Zusammenhang zwischen y und z eingesetzt und die

Airy-Funktion um $a_k + \lambda/\zeta \tau^{-1/3}$ entwickelt. Es ergibt sich für f_λ :

$$f_\lambda \sim \exp(-z) \left\{ \text{Ai}\left(a_k + \frac{\lambda}{\zeta} \tau^{-1/3}\right) + \text{Ai}'\left(a_k + \frac{\lambda}{\zeta} \tau^{-1/3}\right) \tau^{-\frac{1}{3}} \left(z + \frac{1}{2}\right) + \mathcal{O}(\tau^{-2/3}) \right\}. \quad (2.49)$$

Wenn angenommen wird, daß auch die Eigenstörungen ein Minimum haben sollen, was nicht für die relevanteste Eigenstörung, sondern nur für die kleineren relevanten Eigenstörungen gilt, muß wieder gefordert werden, daß der führende Term in (2.49), d.h. $\text{Ai}(a_k + \frac{\lambda}{\zeta} \tau^{-1/3})$ verschwindet. Daraus folgt für die relevanten Eigenwerte:

$$\lambda_m/d_{\parallel} = [-a_k - (-a_m)] \tau^{-2/3} \text{ mit } a_m > a_k. \quad (2.50)$$

Die relevanten nichtmonotonen Eigenstörungen können also auch in Analogie zu den Fixpunktfunktionen durch die Nullstellen a_m der Airy-Funktion charakterisiert werden. Der führende Eigenwert ist, wie schon oben angemerkt, hier nicht enthalten, er ist durch die Gleichung (2.45) gegeben.

2.3 Driftende Fixpunkte für $\tau = \infty$

Im letzten Abschnitt haben wir gesehen, daß die Fixpunkte in der Nähe des Übergangspunktes $\nu_{tp} \approx 2\tau$ durch die Differentialgleichung für driftende Fixpunkte mit $v = 2$ beschrieben wird. Es ist daher lohnend, die driftenden Fixpunkte für $\tau = \infty$ systematisch zu untersuchen. Allgemein sind driftende Fixpunkte durch die Bedingung

$$\mathcal{R}[U_b^d(l)] = U_b^d(l - u(b)) \quad (2.51)$$

definiert [51]. Bei einem Renormierungsschritt mit endlichem b wird die Funktion um den Wert $u(b)$ verschoben. Im infinitesimalen Limes $b = 1 + \delta s$ ergibt sich im Rahmen der approximativen Hard-Cutoff Renormierung dann folgende Differentialgleichung für die driftenden Fixpunkte:

$$U^d + v \frac{\partial U^d}{\partial z} + \ln \left[1 + \frac{\partial^2 U^d}{\partial z^2} \right] = 0. \quad (2.52)$$

Gl. (2.52) ist eine Verallgemeinerung von (2.37), da hier der Parameter $v \equiv du(b)/db|_{b=1}$ nicht festgelegt ist. Die korrespondierenden Eigenstörungen folgen dann aus der Eigenwertgleichung:

$$\left(1 - \frac{\lambda}{d_{\parallel}} \right) f_\lambda + v \frac{\partial f_\lambda}{\partial z} + \left[1 + \frac{\partial^2 U^d}{\partial z^2} \right]^{-1} \frac{\partial^2 f_\lambda}{\partial z^2} = 0. \quad (2.53)$$

Diese beiden Gleichungen werden jetzt mit v als Parameter untersucht. Betrachten wir zuerst die driftenden Fixpunkte: Für die ursprünglichen Fixpunkte forderten wir die Bedingung einer harten Wand bei Abstand $y = 0$: $U^* \rightarrow \infty$ für $y \rightarrow 0$, da aber nun die harte Wand bei $z = -\infty$ liegt, ist es natürlich die Randbedingung:

$$U^d(-\infty) = \infty \quad (2.54)$$

an die driftenden Fixpunkte zu stellen. Die Randbedingung für $U^d(\infty) = 0$ kann von der Fixpunkten für $\tau < \infty$ übernommen werden.

Driftende Fixpunkte, die diesen Randbedingungen gehorchen, verlaufen für $z \rightarrow -\infty$ wie:

$$U^d \approx \exp(-z/v) + z/v + 2 \ln v - 1 + \mathcal{O}(\exp(z)) \quad (2.55)$$

und für $z \rightarrow \infty$ wie:

$$U^d(l) = A_1(v) \exp\{-(v/2 - \sqrt{v^2/4 - 1})z\} + A_2(v) \exp\{-(v/2 + \sqrt{v^2/4 - 1})z\}. \quad (2.56)$$

Die driftenden Fixpunkte haben die Eigenschaft, daß eine Lösung $U^d(z)$ eine Lösung bleibt, wenn z um a verschoben wird. Das hat die Konsequenz, daß in Gleichung (2.55) die Amplitude der Lösung ohne Einschränkung der Allgemeinheit zu Eins gewählt werden darf. Die Amplituden A_1 und A_2 der Lösung für große z hängen von v ab und sind darüberhinaus durch die einmal getroffene Wahl der Anfangsamplitude bei $z \rightarrow -\infty$ festgelegt. Für große z zeigen die driftenden Fixpunkte für $v < 2$ und $v > 2$ jeweils gedämpftes, bzw. oszillatorisches Verhalten. Bei $v = 2$ liegt gerade der aperiodische Grenzfall, die allgemeine Lösung lautet dann:

$$U^d(l) = (A_1 + A_2 z) \exp(-z). \quad (2.57)$$

Man sieht hier, daß die kurzreichweitigen Fixpunkte für $\tau < \infty$ gerade gegen den kurzreichweitigsten driftenden Fixpunkt bei $\tau = \infty$ konvergieren. Abbildung (2.10) zeigt den Realteil von $b_{1,2} \equiv v/2 \pm \sqrt{v^2/4 - 1}$ als Funktion von v . Eine Numerische Aufintegration von (2.52) zeigt, daß für $v > 2$ die Amplitude $A_1 > 0$ ist und für $v < 2$ die Funktion für große z gemäß (2.56) oszilliert, siehe Abbildung (2.11).

Zum Schluß dieses Abschnittes wollen wir noch die relevanten Eigenstörungen zu den driftenden Fixpunkten untersuchen. Dazu betrachten wir Gleichung (2.53). Asymptotisch ist die Lösung für f_λ für kleine z gegeben durch:

$$f_\lambda \approx \exp\{-(1 - \lambda/d_\parallel)z/v\} - (1 - \lambda/d_\parallel)^2 \exp\{(\lambda/d_\parallel)(z/v)\}, \quad (2.58)$$

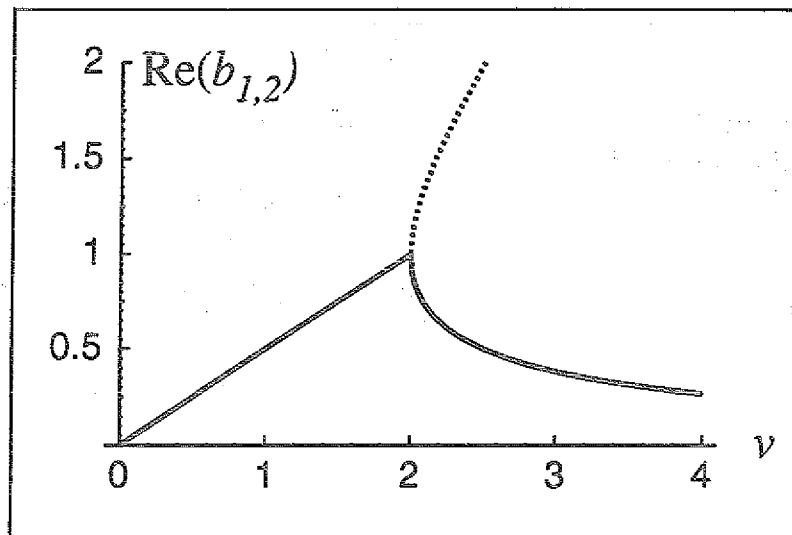


Abbildung 2.10: Realteil von $b_{1,2}$ als Funktion von ν . Für $\nu > 2$ sind beide Lösungen in (2.56) reel und der kurzreichweitigere Ast ist gepunktet dargestellt.

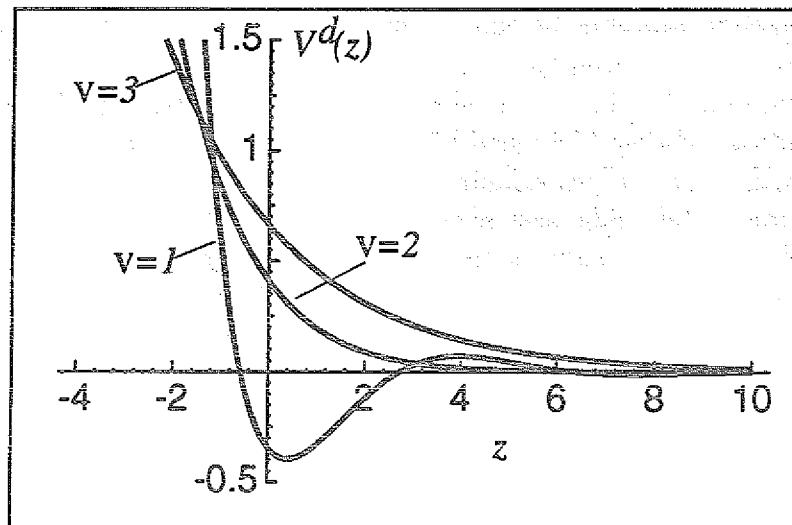


Abbildung 2.11: Driftende Fixpunkte für $\nu < 2$, $\nu = 2$ und $\nu > 2$, die jeweils den überdämpften, aperiodischen und oszillatorischen Fall repräsentieren.

die Lösung für große z lautet:

$$f_\lambda(z) \approx B_1(v, \lambda/d_\parallel) \exp\{-(v/2 - \sqrt{v^2/4 - 1 + \lambda/d_\parallel})z\} + \\ B_2(v, \lambda/d_\parallel) \exp\{-(v/2 + \sqrt{v^2/4 - 1 + \lambda/d_\parallel})z\}. \quad (2.59)$$

Auch jetzt werden erlaubte Eigenwerte durch die Forderung selektiert, das f_λ nicht U^d dominieren darf.

Betrachten wir zuerst den Fall $v \geq 2$: Hier fällt die Fixpunktlösung monoton mit einem Exponenten $b = v/2 - \sqrt{v^2/4 - 1}$ ab. Für relevante Eigenwerte ist die Eigenfunktion ebenfalls monoton, da die Wurzel in (2.59) reel ist. Eine numerische Analyse ergab, daß für $\lambda/d_\parallel \in [0, 1]$ der Koeffizient $B_1 > 0$ ist und die Eigenfunktionen daher immer die Fixpunktfunktion dominieren. Für $v \geq 2$ gibt es also keine relevanten Eigenstörungen an den driftenden Fixpunkten.

Falls jetzt $v < 2$ ist, ist die Fixpunktfunktion oszillierend und es gilt weiter: $0 < (1 - v^2/4) < 1$. Wir nehmen zuerst an, daß $(1 - v^2/4) \leq \lambda/d_\parallel < 1$ ist. In diesem Fall ist die Eigenfunktion immer noch monoton und auch hier ergibt sich aus der Numerik, daß der Koeffizient $B_1 > 0$ ist, es also keine erlaubte relevante Störung mit $(1 - v^2/4) \leq \lambda/d_\parallel < 1$ gibt.

Der letzte Fall schließlich ist $0 \leq \lambda/d_\parallel < (1 - v^2/4)$. Jetzt sind sowohl die driftende Fixpunktfunktion, als auch die Eigenfunktionen oszillatorisch und die Einhüllende fällt bei beiden Funktionen mit $\exp(-v/z)$ ab. Es handelt sich hier um einen marginalen Fall, in dem nur die Amplitude entscheidet, ob f_λ den Fixpunkt U^d dominiert oder nicht. Da allerdings die Amplituden der Eigenfunktion beliebig klein sein können, sind *alle* relevanten Eigenstörungen mit $0 \leq \lambda/d_\parallel < (1 - v^2/4)$ erlaubt.

Zusammengefaßt läßt sich also sagen, daß es für $v > 2$ keine relevanten Eigenstörungen gibt, während es für $v < 2$ ein ganzes Kontinuum von Eigenstörungen gibt, mit Eigenwerten zwischen $0 < \lambda/d_\parallel < (1 - v^2/4)$. Für den marginalen Fall $v = 2$ gilt, daß er keine relevante Eigenstörung mit $\lambda > 0$ hat, in Übereinstimmung mit dem letzten Abschnitt.

3 Aufrauungsübergänge von niedrigdimensionalen Flächen

Die Aufrauung von Flächen soll in diesem Kapitel betrachtet werden. Dabei wird eine Fläche in einem symmetrischen externen Potential betrachtet. Als Beispiele seien hier noch einmal in Erinnerung gebracht: (i) Eine Grenzfläche zwischen zwei Volumenphasen in einem homogenen Gravitationsfeld; (ii) Eine Grenzfläche oder eine Domänenwand zwischen zwei geordneten Domänen; (iii) Ein Polymer, welches mit einer Membran oder einem Flüssigkeitsfilm wechselwirkt; (iv) Das zweidimensionale Ising Modell mit nächsten Nachbar Kopplungen J_b und einer Linie von schwachen Verbindungen $J_0 < J_b$. In allen genannten Fällen ist das äußere Potential V eine Funktion der Abstandskoordinate l und ist symmetrisch: $V(-l) = V(l)$.

Nehmen wir einmal an, daß das Potential bei endlichem l einen attraktiven Teil hat, der stark genug ist, die Fläche zu binden. In diesem Fall ist sie im *lokalisierten Zustand*. Wenn wir nun einen Kontrollparameter, wie etwa die Temperatur oder die Potentialstärke ändern, kann die Fläche von einem lokalisierten Zustand zu einem aufgerauhten Zustand einen *Aufrauungsübergang* haben. Im rauhen Zustand ist die Fläche *delokalisiert* und zeigt beliebig große Exkursionen von ihrem ebenen Referenzzustand.

An einem Aufrauungsübergang geht die Rauigkeit $\xi_\perp$ der Fläche, gegeben durch die zweite Kumulante des Abstandsfeldes l :

$$\xi_\perp^2 = \langle [l - \langle l \rangle]^2 \rangle, \quad (3.1)$$

nach Unendlich. Im weiteren wird nur der Fall betrachtet, wo die mittlere Position $\langle l \rangle$ der gebundenen Phase der Bedingung $\langle l \rangle = 0$ genügt. Das ist immer garantiert, wenn das symmetrische Potential ein globales Minimum bei $l = 0$ hat. Weiter gilt in der gebundenen Phase $\langle l \rangle = 0$ für *alle* symmetrischen Potentiale in $d = 1+1$: Spontane Symmetriebrechung kann hier nicht auftreten, da das Abstandsfeld durch jede kurzreichweitige Barriere 'tunnelt'.

Wie wir im vorangegangenen Kapitel gesehen haben, divergiert die Rauigkeit auch bei *Entbindungsübergängen*. Für diese Systeme enthält das Potential

$V(l)$ eine harte Wand und zusätzlich zu $\xi_{\perp}$, gegeben durch (3.1), divergiert $\langle l \rangle$ ebenfalls am Entbindungspunkt.

Wir werden in diesem Kapitel symmetrische Potentiale ohne harte Wand ebenfalls mit Methoden der funktionalen Renormierung untersuchen. Es wird sich herausstellen, daß auch hier eine Linie von Fixpunkten für jeden Wert des Parameters $\tau = d_{\parallel}/\zeta$ existiert. Im Gegensatz zu Entbindungsübergängen führt das Fehlen einer harten Wand dazu, daß der triviale Fixpunkt $V_{TR}^*(l) \equiv 0$ eine erlaubte Lösung der Fixpunktgleichung ist. An diesem Fixpunkt treten analoge Bifurkationsstrukturen auf, wie wir sie bei der Entbindung fanden. Im Unterschied zur Entbindung können jetzt jedoch exakte Aussagen gemacht werden, da in der Umgebung des trivialen Fixpunktes die lineare Renormierung exakt ist. An diesem Fixpunkt können dann die kritischen Exponenten analytisch berechnet werden. Die Resultate sind weitere Hinweise darauf, daß die in Kapitel 2 gefundene Bifurkationsstruktur kein Artefakt der Renormierungsgruppe, sondern eine intrinsische Eigenschaft des Modell-Hamiltonian (1.17) ist und daher physikalische Relevanz hat. Im Gegensatz zur Entbindung ist der Limes $\tau \rightarrow \infty$ für den Aufrauungsübergang am Bifurkationspunkt analytisch.

3.1 Aufrauung von Grenzflächen in $d = 1 + 1$

Mit Hilfe von exakten Transfer-Matrix Rechnungen wollen wir nun *alle* Universalitätsklassen in $d = 1 + 1$ für Grenzflächen bestimmen. Dasselbe Klassifikationsschema kann ebenso auf Gauß'sche Polymere ohne Selbstvermeidung in $d = 1 + d_{\perp}$ angewendete werden. Ein einfaches Beispiel ist gegeben durch das zweidimensionale Ising Modell mit nächsten Nachbar Kopplungen J_b und einer Linie von schwachen Verbindungen $J_0 < J_b$ [1, 5, 15]. In diesem Fall läuft die Grenzfläche im Mittel parallel zu diesem linearen Defekt und spürt ein effektives Kasten-Potential (das periodische Gitterpotential ist hier irrelevant, da die Grenzfläche für alle $T > 0$ immer rauh ist). Denkbar ist auch eine Situation, in der der lineare Defekt bei $l = 0$ zu einer langreichweitigen Störung der Kopplungskonstanten führt, mit $J = J(l)$ und $J(l) \approx J_b - C/|l|^r$ für große l . In diesem Fall hat das effektive Grenzflächenpotential $V(l) \simeq J(l)/a$ ebenfalls einen langreichweitigen Teil.

3.1.1 Transfer-Matrix Formalismus

In $d = 1 + 1$ hängt die Grenzflächenvariable l nur von einer Ortskoordinate ab und die statistischen Größen können mit Transfer-Matrix Rechnungen erhalten werden [18, 75, 45, 55, 27]. Für $n = 1$ wird im Limes von verschwindendem

kurzwelligen Cutoff, $a \rightarrow 0$, aus der Transfer-Matrix ein Hamilton-Operator. Man bestimmt dann die Eigenwerte E_n und Eigenfunktionen ϕ_n für diesen Hamilton-Operator, die gegeben sind durch:

$$\hat{H}\phi_n = \left\{ -[T^2/2K] \frac{\partial^2}{\partial l^2} + V(l) \right\} \phi_n = E_n \phi_n. \quad (3.2)$$

Das Grenzflächenpotential $V(l)$ spielt nun die Rolle eines 'quantenmechanischen' Potentials. Die interessierenden physikalischen Größen können durch die Eigenwerte und Eigenfunktionen dieser Schrödingerartigen Gleichung ausgedrückt werden. Die Grenzflächen-Energie ist einfach gegeben durch:

$$\Sigma_I = E_0 = (\phi_0 | \hat{H} \phi_0), \quad (3.3)$$

wobei E_0 die Grundzustandsenergie und ϕ_0 die normierte Grundzustandswellenfunktion ist. Hier und später bedeuten die runden Klammern ein Skalarprodukt: $(a|b) = \int_{-\infty}^{\infty} dl \ a^*(l)b(l)$. Die mittlere Position $\langle l \rangle = (\phi_0 | z \phi_0)$ verschwindet identisch, da wir ein symmetrisches Potential angenommen haben. Die Rauigkeit $\xi_{\perp}$ ist gegeben durch:

$$\xi_{\perp}^2 = \langle (l - \langle l \rangle)^2 \rangle = (\phi_0 | (l - \langle l \rangle)^2 \phi_0). \quad (3.4)$$

Die Korrelationslänge $\xi_{\parallel}$ schließlich folgt aus dem Ausdruck für die Differenzkorrelationsfunktion und ist gegeben durch:

$$\xi_{\parallel} = \frac{T}{E_1 - E_0}. \quad (3.5)$$

3.1.2 Kasten-Potential

Zuerst betrachten wir den einfachen Fall eines Kasten-Potentials:

$$V = \begin{cases} G & \text{für } -l_0 < l < l_0, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.6)$$

Solange $G < 0$ ist, hat das Potential einen lokalisierten Grundzustand ϕ_0 mit $E_0 < 0$, wie man einfach ausrechnen kann. Daraus folgt dann, daß die Grenzfläche für alle $G < 0$ lokalisiert ist [1, 5]. Wenn dann G von negativen Werten nach Null geht, verschwindet die Grundzustandsenergie wie $E_0 \approx -2l_0^2 K G^2 / T^2$, und die Grenzfläche rauht auf. Weiter hat der erste angeregte Zustand die Energie $E_1 = 0$ für kleine $|G|$. Das impliziert das kritische Verhalten:

$$\xi_{\perp} \approx (T^2 / K \sqrt{8} l_0) |G|^{-\nu_{\perp}} \quad \text{mit } \nu_{\perp} = 1, \quad (3.7)$$

$$\xi_{\parallel} \approx (T^3 / K 2 l_0^2) |G|^{-\nu_{\parallel}} \quad \text{mit } \nu_{\parallel} = 2, \quad (3.8)$$

und

$$\Sigma_I \approx -(2l_0^2 K / T^2) |G|^{2-\alpha} \quad \text{mit } \alpha = 0. \quad (3.9)$$

Die beiden Längenskalen $\xi_{\perp}$ und $\xi_{\parallel}$ genügen der Relation $\xi_{\perp} \approx (\mathcal{D}_{\infty} T/K)^{1/2} \xi_{\parallel}^{\zeta}$ mit dem Rauigkeitsexponenten, $\zeta = \frac{1}{2}$ und der Amplitude $\mathcal{D}_{\infty} = \frac{1}{4}$.

3.1.3 Potentiale mit langreichweitigem Potenzabfall

Als nächstes wollen wir den Fall von langreichweitigen Potentialen V betrachten, die sich wie $V \approx G|l|^{-r}$, mit $Gr < 0$, für große Werte von $|l|$ verhalten und nur ein Minimum bei $l = 0$ haben. Da diese Potentiale noch stärker attraktiv als das Kasten-Potential sind, ist die Grenzfläche wieder für alle $|G| > 0$ lokalisiert und es gibt einen Aufrauungsübergang bei $|G| = 0$. Für kleine G kann man exakte Aussagen für den Hamilton-Operator benutzen [10], um den Bereich von r zu bestimmen, in dem die Exponenten gegeben durch (3.7)-(3.9) gültig sind. Diese Resultate zeigen, daß man mindestens einen gebundenen Zustand hat, falls das Integral $\int dx V(x) \leq 0$ ist. Im einzelnen gilt: für $r > 2$ hat man einen gebundenen Zustand nur für $\int dx V(x) < 0$ und für kleine G ist die Phasengrenze implizit gegeben durch

$$\int dx V(x) = 0. \quad (3.10)$$

Im Fall $1 < r \leq 2$, hat man für jedes $G < 0$ unendlich viele gebundene Zustände und eine *untere Grenze* zur Phasengrenze ist durch (3.10) gegeben. Bei $r = 1$ divergiert das Integral $\int dx V(x)$. Das zeigt, daß der langreichweitige Teil des Potentials V für das kritische Verhalten relevant wird. Daraus schließen wir, daß die Gleichungen (3.7)-(3.9) gültig sind, solange $r > 1$ ist. Im nächsten Abschnitt werden wir das mit Hilfe der Renormierungsgruppen-Rechnung verstehen.

3.1.4 Potentiale mit $1/l^2$ -Abfall

Potentiale, die wie $V \sim 1/l^2$ für große l abfallen sind von besonderem Interesse in $d = 1 + 1$, da für diese Dimension die entropische Wechselwirkung ebenfalls mit einem Exponenten $\tau = 2$ abfällt (vergl. Einführung). Wir wollen deshalb Potentiale der Form:

$$V(l) = \begin{cases} U & \text{für } -l_0 < l < l_0, \\ W/l^2 & \text{für } |l| \geq l_0. \end{cases} \quad (3.11)$$

untersuchen, wobei U und W positiv oder negativ sein können. Diese Potentiale können drei Extrema haben und ein Maximum anstelle eines Minimums am Ursprung.

Die detaillierte Rechnung ist in Anhang A zu finden, hier sollen nur die Resultate für den Aufrauungsprozeß referiert werden. Es ist üblich, die reskalierten Variablen $u \equiv 2Kl_0^2 U/T^2$ und $w \equiv 2KW/T^2$ einzuführen. Wie in Anhang A gezeigt wird, ist die Phasengrenze $u_c = u_c(w)$ gegeben durch:

$$\sqrt{u_c} \tanh \sqrt{u_c} - \frac{1}{2} = -\mu \quad \text{für } u > 0 \quad (3.12)$$

und durch:

$$-\sqrt{|u_c|} \tan \sqrt{|u_c|} - \frac{1}{2} = -\mu \quad \text{für } u < 0, \quad (3.13)$$

mit $\mu = \sqrt{\frac{1}{4} + w}$. Man beachte, daß $w = 0$, $u_c = 0$ eine Lösung für (3.12) und (3.13) ist. Für kleine Werte von w führt eine Entwicklung von (3.12) und (3.13) um $w = 0$ auf

$$u_c \approx w \quad \text{für kleine } w. \quad (3.14)$$

Die Phasengrenze für die Aufrauung ist in Bild (3.1) dargestellt. Man beachte, daß die Tangente $u_c = w$ bei $w = 0$ mit der unteren Schranke an die Phasengrenze konsistent ist, die im Grenzfall kleiner u_c und w ebenfalls durch (3.14) gegeben ist. Wenn w sich $-\frac{1}{4}$ von oben annähert, erreicht die Übergangslinie $u_c(w)$ den Grenzwert $u_c(-\frac{1}{4}) = u_{mc} = 0.595$. Für große w , nähert sich die Grenzlinie dem asymptotischen Wert $u_c(\infty) = -\pi^2/4$ an.

Diese Ergebnisse zeigen, daß Aufrauungsübergänge genauso wie Entbindungsübergänge durch das Wechselspiel zwischen kurzreichweitigen- und langreichweitigen Teilen des Potentials bestimmt sind [55]: Für nicht zu große w und u kann jeweils ein repulsiver Teil des Potentials zu einer Aufrauung der Grenzfläche führen; hat das Potential jedoch einen stark attraktiven Teil (kurzreichweitig oder langreichweitig) ist die Grenzfläche immer lokalisiert.

Das asymptotische Verhalten für die reskalierte Grundzustandsenergie $e_0 = 2Kl_0^2 E_0/T^2 \equiv -q^2$ in der Nähe der Übergangslinie kann bestimmen werden, wenn man die Entwicklung $u = u(w_c) + \delta u$ benutzt und die Analyse in Anhang A in nächster Ordnung in δu und q wiederholt. Man erhält dann für e_0 das folgende asymptotische Verhalten:

$$|e_0| \sim \begin{cases} \exp(-c/\delta u) & \text{für } \mu = 0 \\ |\delta u|^{1/\mu} & \text{für } 0 < \mu < 1, \\ |\delta u|/\ln |\delta u| & \text{für } \mu = 1, \\ |\delta u| & \text{für } \mu > 1, \end{cases} \quad (3.15)$$

mit $\mu = \sqrt{\frac{1}{4} + w}$ wie zuvor. Für $\mu > 1$ gibt es ein Regime mit ungewöhnlichen Phasenübergängen erster Ordnung, welches ebenfalls für Entbindungsübergänge auftritt (das sogenannte Regime C).

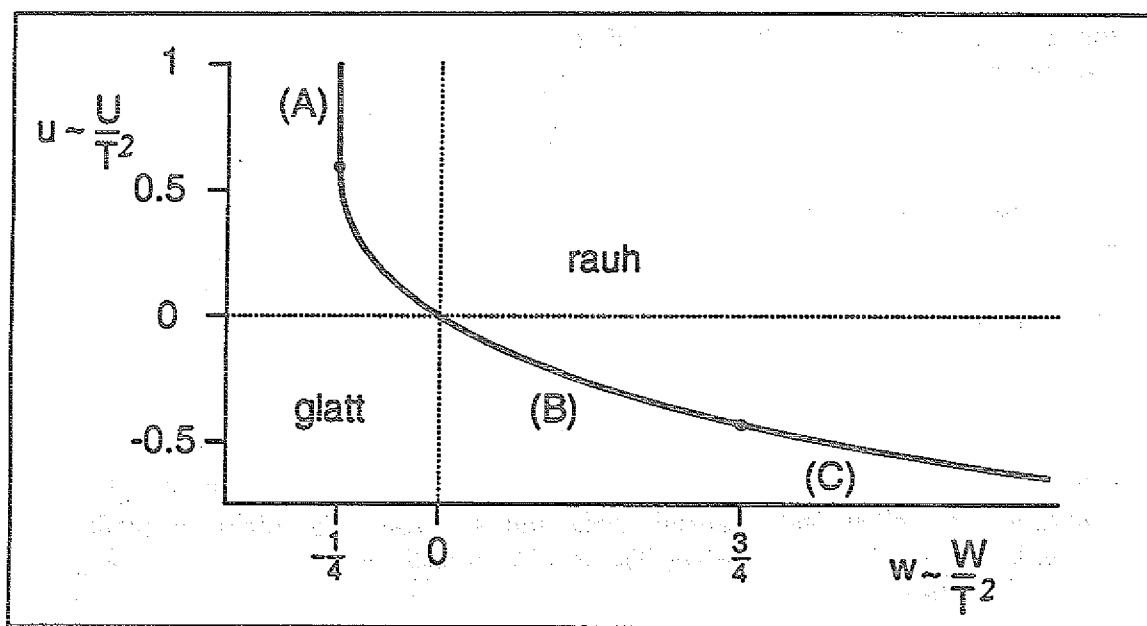


Abbildung 3.1: Phasendiagramm für Aufrauhung in $d = 1+1$ für ein Potential, wie in (3.11) definiert. Die Phasengrenze besteht aus drei Teilen: (A) Für $u > u_{mc} = 0.595$ ist die Übergangslinie gegeben durch $w = -1/4$; für $u < u_{mc}$ folgt die Übergangslinie aus (3.12), bzw. (3.13) und besteht aus den Teilen (B) $-1/4 < w < 3/4$ und (C) für $w > 3/4$.

Die asymptotische Analyse bei Entbindungsübergängen in $d = 1 + 1$ kann für die Aufrauungsübergänge übernommen werden, wenn das Verhalten von e_0 für $w < -\frac{1}{4}$ bestimmt werden soll [55]. Ein Umschreiben der Matching-Bedingung (A.7) in Anhang A ergibt: Man findet immer noch einen gebundenen Zustand für $u < u_c$, wenn w die Line bei $w_c^- = -\frac{1}{4}$ schneidet. Andererseits hat man für $u > u_c$, daß die Grundzustandsenergie, $e_0 = -q^2$, nach Null geht, wenn w sich $w_c^- = -\frac{1}{4}$ von oben annähert. Die Phasengrenze ist folglich gegeben durch $w_c(u) = -\frac{1}{4}$ für $u > u_{mc}$, siehe auch Bild 3.1.

Es folgt nun aus (3.15), daß die Korrelationslänge $\xi_{\parallel} = T/(E_1 - E_0) \sim -1/E_0$ sich für $w > -\frac{1}{4}$ wie

$$\xi_{\parallel} \sim |\delta u|^{-\nu_{\parallel}} \quad (3.16)$$

mit

$$\nu_{\parallel} = \begin{cases} 1/\sqrt{\frac{1}{4} + w} & \text{für } -1/4 < w < 3/4, \\ 1 & \text{für } 3/4 < w. \end{cases} \quad (3.17)$$

verhält.

3.2 Lineare Renormierung von symmetrischen Potentialen

3.2.1 Lineare Rekursions-Gleichungen

Das Modell, definiert in (1.17) wird nun mit Hilfe von funktionaler RG Methoden für symmetrische Potentiale untersucht. Wie wir schon im vorangegangenen Kapitel gesehen haben, ist der nichtlineare Teil der RG Transformation gewöhnlich approximativ und hängt von der Form des Cutoffs ab. Der lineare Teil jedoch ist eindeutig und besteht aus zwei relativ einfachen Transformationen:

(i) Die reduzierte Steifigkeit K/T , die den effektiven Hamiltonian $\mathcal{H}_0\{l\}$ parametrisiert, wird *nicht* geändert, und (ii) Das Potential wird entsprechend der Rekursions-Formel

$$V^{(N+1)}(l) = \mathcal{L}[V^N(l)] \quad (3.18)$$

transformiert, wobei $\mathcal{L}$ ein linearer Operator, definiert durch

$$\mathcal{L}[V(l)] \equiv b^{d-1} \exp\left(\frac{1}{2}(\tilde{a}_{\perp}^2 \partial^2 / \partial y^2)\right) V(y)|_y = b\zeta l \quad (3.19)$$

ist [51, 53]. Dieser differentielle Operator kann in einen Integral-Operator umgeschrieben werden:

$$\mathcal{L}[V(l)] = b^{d-1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl'}{\sqrt{2\pi\tilde{a}_{\perp}}} \exp\left[-\frac{1}{2}(b\zeta l - l')^2 / \tilde{a}_{\perp}^2\right] V(l'). \quad (3.20)$$

In diesen Ausdrücken ist $b > 1$ der übliche Reskalierungsfaktor und $\tilde{a}_\perp$ repräsentiert die Rauigkeit der kurzwelligen Fluktuationen $l_>$ welche gegeben sind durch

$$\tilde{a}_\perp^2 \equiv \langle l_>^2 \rangle = \frac{T}{K} \left(\int_p^\Lambda - \int_p^{\Lambda/b} \right) p^{-2n}, \quad (3.21)$$

wobei $\int_p^\Lambda$ ein Integral über die Impulse ist, welches für große Impulse vom Cutoff $\Lambda \simeq 1/a$ abgeschnitten wird.

3.2.2 Matching-Prozedur

Potentiale, die eine Fläche lokalisieren bis die Potentialstärke $|G|$ nach Null geht, werden bestimmt von dem trivialen Fixpunkt $V_{TR}^*(l) \equiv 0$ und so durch den effektiven Hamiltonian $\mathcal{H}_0\{l\}$. Per Konstruktion der RG entspricht dieser Hamiltonian einem Fixpunkt, der im folgenden als Gauß'scher Fixpunkt bezeichnet wird. Die *lineare* RG Transformation, gegeben durch (3.20), entspricht einer Linearisierung der nichtlinearen RG um den Gauß'schen Fixpunkt. Im Raum der Wechselwirkungspotentiale beschreibt die lineare RG daher den Fluß in der Nähe des trivialen Fixpunktes $V_{TR}^*(l) \equiv 0$. Während eines RG Schrittes mit Reskalierungsfaktor b wird die longitudinale Korrelationslänge $\xi_\parallel(b)$ als Folge der Skalentransformation: $\xi_\parallel(b) = \xi_\parallel/b$ um den Faktor b reduziert. Mehrere, nacheinander ausgeführte, Anwendungen der linearen RG können ersetzt werden durch einen RG Schritt mit größerem b , da die lineare RG Rekursion (3.20) die Halbgruppen-Eigenschaft besitzt. Der Reskalierungsfaktor $b = b_0$ kann so gewählt werden, daß die neue Korrelationslänge von der Größe der Gitterkonstanten ist: $\xi_\parallel(b_0) \simeq a$. Dann ist $\xi_\parallel(b_0)$ genügend klein, so daß für das reskalierte System die Mean-Field-Theorie angewendet werden kann. Im Rahmen von Mean-Field haben wir:

$$\frac{K}{a^{2n}} \simeq \frac{K}{\xi_\parallel^{2n}(b_0)} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}[V(l)]}{\partial l^2} \Big|_{l=0}. \quad (3.22)$$

Es kann dann auf die unskalierte physikalische Korrelationslänge $\xi_\parallel$ des Potentials zurückgeschlossen werden über:

$$\xi_\parallel \approx b_0 \xi_\parallel(b_0) \approx b_0 a. \quad (3.23)$$

Aus der Definition von $\tilde{a}_\perp$ in (3.21), bekommt man

$$\tilde{a}_\perp^2 \sim b_0^{2\zeta} \quad \text{für } b_0 \gg 1. \quad (3.24)$$

Die Matching-Bedingung lautet also:

$$\begin{aligned} \frac{K}{\xi_{\parallel}^{2n}(b_0)} &= b_0^{(d-1)} \frac{\partial^2}{\partial l^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl'}{\sqrt{2\pi\tilde{a}_{\perp}}} e^{-\frac{1}{2}(b_0^{\zeta}l-l')^2/\tilde{a}_{\perp}^2} V(l')|_{l=0} \\ &= b_0^{d-1} b_0^{2\zeta} \tilde{a}_{\perp}^{-2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl'}{\sqrt{2\pi\tilde{a}_{\perp}}} e^{-\frac{1}{2}(l'/\tilde{a}_{\perp})^2} \left(\frac{l'^2}{\tilde{a}_{\perp}^2} - 1 \right) V(l'). \end{aligned} \quad (3.25)$$

3.2.3 Ein Kurzreichweitiges Gauß'sches Potential

Nun soll die Matching-Bedingung (3.25) auf verschiedene Potentiale angewendet werden, um deren kritisches Verhalten zu untersuchen. Als erstes betrachten wir ein kurzreichweitiges Gauß'sches Potential:

$$V(l) = G \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{l}{l_0}\right)^2\right], \quad (3.26)$$

mit $G < 0$. Von unseren Transfer-Matrix Rechnungen in zwei Dimensionen wissen wir schon, daß die Grenzfläche lokalisiert bleibt, solange $G < 0$ ist. Daher schließen wir, daß für jede Dimension $2 \leq d \leq 3$ die Matching-Prozedur benutzt werden kann, da für ansteigende Dimension die Fluktuationen weniger wichtig werden.

Setzen wir also dieses Potential in (3.25) ein, erhalten wir

$$\frac{K}{\xi_{\parallel}^{2n}(b_0)} = b_0^{d-1} b_0^{2\zeta} \tilde{a}_{\perp}^{-2} \left(|G| l_0 \tilde{a}_{\perp}^{-1} + \mathcal{O}(\tilde{a}_{\perp}^{-3}) \right). \quad (3.27)$$

Wenn noch $\tilde{a}_{\perp}$ über (3.24) durch b_0 Terme ausgedrückt wird, führt die Matching Bedingung (3.25) auf

$$\xi_{\parallel} \sim |G|^{-\nu_{\parallel}} \text{ mit } \nu_{\parallel} = 1/[\zeta(\tau - 1)] \quad (3.28)$$

und $\tau = (d - 1)/\zeta$, gültig in allen Dimensionen $2 \leq d \leq 3$. Grenzflächen in einem Kasten-Potential haben einen kritischen Exponent $\nu_{\parallel} = 2$ in $d = 1 + 1$, siehe (3.8). Wenn wir die dazugehörigen Werte für $\tau = 2$ und $\zeta = 1/2$ in (3.28) einsetzen, erhalten wir ebenfalls $\nu_{\parallel} = 2$, die lineare RG gibt also das richtige kritische Verhalten. Implizit haben wir bei diesem Vergleich angenommen, daß die beiden Potentiale ein identisches kritisches Verhalten zeigen, da sie beide kurzreichweitig sind. Im nächsten Abschnitt wollen wir die Potentiale bestimmen, die zu dieser *Universalitätsklasse* gehören.

3.2.4 Langreichweitige Potentiale

Wenn wir nun allgemeiner Potentiale der Form

$$V(l) = G[l^2 + l_0^2]^{-\frac{r}{2}} \quad (3.29)$$

mit $G < 0$ und $r > 0$ betrachten, können wir das Matching-Verfahren wieder in allen Dimensionen $2 \leq d \leq 3$ anwenden, da diese Potentiale noch attraktiver als das Gauß'sche Potential sind. Eine asymptotische Analyse von (3.25) mit dem Potential aus (3.29) führt auf:

$$\frac{K}{\xi_{\parallel}^{2n}(b_0)} \approx |G| b_0^{d-1+2\zeta} \tilde{a}_{\perp}^{-2} \left(c_1 l_0^{1-r} \tilde{a}_{\perp}^{-1} + c_r \tilde{a}_{\perp}^{-r} \right), \quad (3.30)$$

wobei c_1 und c_r dimensionslose Koeffizienten sind. Mit demselben Schema wie oben dargestellt erhalten wir nun folgendes kritische Verhalten:

$$\xi_{\parallel} \sim |G|^{-\nu_{\parallel}} \quad \text{mit} \quad \begin{cases} \nu_{\parallel} = \frac{1}{\zeta(\tau-r)} & \text{für } r < 1, \\ \nu_{\parallel} = \frac{1}{\zeta(\tau-1)} & \text{für } r > 1. \end{cases} \quad (3.31)$$

Von (3.31) liest man ab, daß alle Potentiale mit $r > 1$ den Exponenten $\nu_{\parallel}$ des Gauß'schen Potentials haben und deshalb das gleiche *universelle* Verhalten zeigen. Die Grenze liegt bei $r = 1$: für $r < 1$ hängen die Exponenten von r ab.

3.2.5 Störungen um den trivialen Fixpunkt

In den letzten Abschnitten benutzten wir ein Matching-Verfahren, um den Exponenten $\nu_{\parallel}$ zu bestimmen. Alternativ kann man auch Eigenstörungen des RG Flusses um das Fixpunktpotential betrachten. In diesem Zusammenhang werden physikalische Potentiale als Störungen aufgefaßt, deren führender Eigenwert bestimmt werden muß [33].

Zuerst wollen wir ein langreichweitiges Potential betrachten, das sich wieder verhält wie

$$V(l) \approx G|l|^{-r} \quad \text{für große } |l|, \quad (3.32)$$

mit $Gr < 0$. Wenn wir den differentiellen Operator $\mathcal{L}$ aus (3.19) für die lineare RG benutzen, sieht man sofort, daß der potenzabfallende Teil des Potentials in (3.32) wieder auf einen potenzabfallenden Teil $G'|l|^{-r}$ abgebildet wird, der eine renormierter Potentialstärke

$$G' = b^{\lambda_{LR}} G \quad \text{mit} \quad \lambda_{LR} = \zeta(\tau - r) \quad (3.33)$$

hat.

Wenn man dasselbe mit einem kurzreichweitigen Gauß'schen Potential

$$V(l) = G \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{l}{l_0}\right)^2\right] \quad (3.34)$$

mit $G < 0$ macht, erhält man ein neues Gauß'sches Potential mit renormierten Parametern:

$$G' = b^{d-1} G / [(1 + (\tilde{a}_\perp / l_0)^2)^{\frac{1}{2}}] \quad (3.35)$$

und

$$l'_0 = \tilde{a}_\perp [1 + (l_0 / \tilde{a}_\perp)^2]^{\frac{1}{2}} / b^\zeta. \quad (3.36)$$

Für $\zeta > 0$, wird die Längenskala l_0 auf den Fixpunktwert $l_0^* = \tilde{a}_\perp / [b^{2\zeta} - 1]^{\frac{1}{2}}$ nach wenigen Iterationen der RG abgebildet. Wenn dieser Fixpunktwert in (3.35) eingesetzt wird, erhält man für G' eine einfache Rekursion:

$$G' = b^{\lambda_{SR}} G \quad \text{mit} \quad \lambda_{SR} = \zeta(\tau - 1). \quad (3.37)$$

Ein physikalisches Potential mag nun sowohl aus kurzreichweitigen, als auch aus langreichweitigen Teilen bestehen und wenn wir (3.31) mit (3.33) und (3.37) vergleichen, finden wir, daß die Resultate der Matching-Prozedur zu der einfachen Regel $\nu_\parallel = 1/\lambda$ equivalent sind, wenn λ mit $\max(\lambda_{LR}, \lambda_{SR})$ identifiziert wird, wobei $\lambda_{LR} = \zeta(\tau - r)$ und $\lambda_{SR} = \zeta(\tau - 1)$ ist [33].

3.2.6 Wettbewerb zwischen kurzreichweitigen- und langreichweitigen Potentialen

Abschließend wollen wir noch Potentiale der etwas allgemeineren Form betrachten, die durch

$$V(l) = \begin{cases} U & \text{für } |l| < l_0, \\ W/l^r & \text{für } |l| > l_0. \end{cases} \quad (3.38)$$

definiert sind. Für diese Sorte von Potentialen können wir die Tangente zur Phasengrenze in der (W, U) Ebene um den Ursprung bestimmen und die RG Resultate mit den exakten Resultaten in zwei Dimensionen vergleichen. Da die Rechnung hier nichts neues bringt, wurde sie in den Anhang B verschoben. Als Resultat erhält man:

$$\begin{aligned} \frac{K}{\xi_\parallel^{2n}(b_0)} &\sim b_0^{d-1} \left\{ \tilde{a}_\perp^{-1} (-2l_0 U - \frac{2W l_0^{1-r}}{r-1}) \right. \\ &\quad \left. + \tilde{a}_\perp^{-3} (l_0^3 U + \frac{3l_0^{3-r} W}{r-3}) + \mathcal{O}(\tilde{a}_\perp^{-r\zeta}) \right\}, \end{aligned} \quad (3.39)$$

für $r > 3$ mit $r^< = \min(r, 5)$ und

$$\frac{K}{\xi_{\parallel}^{2n}(b_0)} \sim b_0^{d-1} \left\{ \tilde{a}_{\perp}^{-1} (-2l_0 U - \frac{2Wl_0^{1-r}}{r-1}) + \tilde{a}_{\perp}^{-r} W c_r^< + \mathcal{O}(\tilde{a}_{\perp}^{-3}) \right\} \quad (3.40)$$

für $1 < r < 3$ wobei $c_r^<$ ein dimensionsloser Koeffizient ist.

Für $W = 0$, d.h. in Abwesenheit eines langreichweitigen Teils des Potentials, folgt daraus für $\nu_{\parallel} = 1/[\zeta(\tau-1)]$, wie wir es schon für das Gauß'sche Potential gefunden hatten, siehe (3.28). Für $W \neq 0$ bleibt der Exponent $\nu_{\parallel}$ unverändert, solange $r < 1$ ist. Falls $r > 1$ ist, dominiert der langreichweitige Teil des Potentials: $\nu_{\parallel} = 1/[\zeta(\tau-r)]$ und der Übergang findet, in Übereinstimmung mit den Resultaten aus Abschnitt 3.2.4, bei $W = 0$ statt.

Zusätzlich sehen wir, daß die lineare RG für $r > 1$ die Tangente zur Phasengrenze am Ursprung mit

$$U = -\frac{Wl_0^{-r}}{r-1} \quad (3.41)$$

angibt, da dann der führende Term in (3.39), bzw. (3.40) verschwindet. Das ist aber konsistent mit den exakten Resultaten in $d = 2$, da (3.41) $\int dl V(l) = 0$ impliziert.

In der Näherung der linearen RG ist der Exponent $\nu_{\parallel}$ unabhängig vom Ort auf der Übergangslinie und so unabhängig von W . Das ist aber ein Widerspruch zu unserem exakten Resultat für $d = 1 + 1$, wo wir für $\nu_{\parallel}$ nichtuniverselles Verhalten fanden, siehe dazu (3.17). Der Grund ist, daß der linearen RG nur am Gauß'schen Fixpunkt getraut werden darf, also bei $(W, U) = (0, 0)$. Das richtige, nichtuniverselle Verhalten von $\nu_{\parallel}$ entlang der Übergangslinie kann nur mit einer nichtlinearen RG erhalten werden, welche im nächsten Abschnitt angewendet wird.

Eine Betrachtung von (3.39) bzw. (3.40) zeigt, daß ein multikritischer Punkt bei $W_c = U_c = 0$ existiert, wenn (i) $\tau > 3$ oder (ii) $\tau > r$ ist, da dann der $\tilde{a}_{\perp}^{-3}$, bzw. der $\tilde{a}_{\perp}^{-r}$ Term relevant wird. Die entsprechenden Korrekturterme divergieren wie $b_0^{\zeta(\tau-3)}$ bzw. $b_0^{\zeta(\tau-r)}$ für große $b_0 \sim \xi_{\parallel}$.

Für $\tau = 2$ und $1 < r < 2$ deutet dies ein 'weak-fluktuation' Regime an, mit Phasenübergängen erster Ordnung im Bereich des Phasendiagramms mit $W < 0$. Wenn τ größer als $\tau = 3$ ist, werden wir ebenfalls Phasenübergänge erster Ordnung und nichtuniverselles Verhalten finden, wie sich im nächsten Abschnitt zeigen wird.

3.3 Nichtlineare Renormierung von symmetrischen Potentialen

3.3.1 Flußgleichungen und Randbedingungen für Aufrauungsübergänge

Grenzflächen rauhen in einem symmetrischen Potential bei Potentialstärke $G^* = 0$ auf, falls das Potential außer einem Minimum bei Null keine weiteren Extrema hat. Aus dem vorherigen Abschnitt wissen wir aber, daß auch nichttriviale Phasengrenzen möglich sind, falls das Potential mehrere Extrema hat. Die Transfer-Matrix Rechnung für Grenzflächen in $d = 1 + 1$ zeigte ebenfalls nichttriviale Phasengrenzen, mit nichtuniversellen kritischen Exponenten. Die Transfer-Matrix Rechnung soll nun in diesem Abschnitt von $d = 1 + 1$, bzw. $\tau = 2$ auf beliebige τ erweitert werden. Dazu können wir die lineare RG nicht mehr benutzen. Statt dessen wird die approximative nichtlineare Hard-Cutoff RG herangezogen, die wir in Kapitel 2 benutzt haben.

Für diese RG lautet im Limes der infinitesimalen Reskalierung die Flußgleichung:

$$\frac{\partial U}{\partial s} = \tau U + y U'(y) + \ln(1 + U'') \quad (3.42)$$

mit den reskalierten Variablen $U \sim V$ und $y \sim l$, wobei $\partial U / \partial y$ mit U' bezeichnet wird und $\tau = (d - 1) / \zeta$ gilt.

Wir brauchen wieder die Fixpunkte $U^*(y)$ und die Eigenstörungen $f_\lambda(y)$ für diesen RG Fluß, um das kritische Verhalten zu erhalten. Die Fixpunkte genügen:

$$0 = \tau U^* + y U^{*'} + \ln(1 + U^{*''}) \quad (3.43)$$

und die Eigenstörungen folgen aus

$$0 = (\tau - \lambda / \zeta) f_\lambda + y f_\lambda' + \frac{f_\lambda''}{1 + U^{*''}} \quad (3.44)$$

Die Gleichungen sind identisch zu denen in Kapitel 2 besprochenen und wurden nur der Übersichtlichkeit halber noch einmal aufgeführt. Die dazugehörigen Randbedingungen müssen aber an das physikalische System angepaßt werden und da wir hier an symmetrischen Potentialen interessiert sind, wählen wir:

$$\Sigma \equiv U^*(0) \quad \text{und} \quad U^{*'}(0) = 0. \quad (3.45)$$

Die Bedingung, daß $U^*(y)$ für große $|y|$ nach Null abfällt, soll auch für die Aufrauung erfüllt sein, was die beiden linear unabhängigen Lösungen:

$$U^*(y) \approx \rho_L |y|^{-\tau} + \rho_S |y|^{\tau-1} \exp(-y^2/2) \quad \text{für große } |y| \quad (3.46)$$

impliziert. Sie haben die Amplituden $\rho_L(\Sigma)$ und $\rho_S(\Sigma)$. Wir finden also auch für Aufrauungsübergänge eine *Line von Fixpunkten*, die durch Σ parametrisiert wird.

Die linearen Eigenstörungen $f_\lambda(y)$ für jede Fixpunktlösung U^* werden auch als symmetrisch angenommen: $f_\lambda(0) = 1$, $f'_\lambda(0) = 0$. Für große $|y|$ verhalten sich die Eigenstörungen wie

$$f_\lambda \approx C_f |y|^{-\tau+\lambda/\zeta} + D_f |y|^{\tau-1-\lambda/\zeta} \exp(-y^2/2). \quad (3.47)$$

Die Amplituden C_f, D_f hängen von Σ und von λ/ζ ab. Wie für Entbindungsphänomene führt die Forderung, daß die Eigenstörungen f_λ nicht die Fixpunkte U^* dominieren sollen, zu der Bedingung

$$C_f(\Sigma, \lambda/\zeta) = 0. \quad (3.48)$$

Diese Bedingung selektiert eine unendliche Anzahl diskreter Eigenwerte λ . Die Linie von Fixpunkten und die Eigenstörungen sollen nun numerisch bestimmt werden.

3.3.2 Der Fall $\tau = 2$

Abb. 3.2 zeigt die Amplitude $\rho_L(\Sigma)$ und die relevanteste Eigenstörung λ_1/ζ für $\tau = 2$ als Funktion von Σ , also für Grenzflächen in $d = 2$ Dimensionen oder für fluide Membranen in $d = 3$. Beim Minimum der Funktion $\rho_L(\Sigma)$ geht der Eigenwert λ_1 durch Null und die Eigenstörung ist marginal. Der Eigenwert dieser Störung wächst mit abnehmendem Σ an. Daher haben wir zwei korrespondierende Fixpunktpotentiale, $U_{TR}^*(y)$ und $U_{S0}^*(y)$, die schneller als y^{-2} abfallen: den trivialen, $U_{TR}^*(y) \equiv 0$, mit einer relevanten Eigenstörung und einen nichttrivialen, $U_{S0}^*(y)$, bei positivem Σ ohne relevante Eigenstörung. Sie repräsentieren jeweils die kritische und die rauhe Phase.

Die Eigenschaft, daß die Funktion $\rho_L(\Sigma)$ durch den Ursprung $\Sigma = 0$ geht, muß für *alle* τ gelten, da $U_{TR}^*(y) \equiv 0$ immer eine Lösung von (3.43) ist und nun, im Gegensatz zum Entbindungsfall, wo wir die Bedingung einer harten Wand erfüllen müssen, kompatibel mit den Randbedingungen der Aufrauung ist. Am trivialen Fixpunkt $U_{TR}^* \equiv 0$, erfüllt λ_1 die Beziehung: $\lambda_1/\zeta = \tau - 1 = 1$ für $\tau = 2$. Da der linearisierte Fluß um $U_{TR}^* \equiv 0$ equivalent zur linearen RG ist, reproduziert man hier den Wert für λ/ζ , wie wir ihn mit dem linearen Schema erhalten haben. Auf der Linie von Fixpunkten ist der Punkt $\Sigma = 0$ der einzige Fixpunkt mit einer relevanten Eigenstörung, die schneller als y^{-2} abfällt. Daher ist der Aufrauungsübergang für *alle* Potentiale, die schneller als y^{-2} abfallen, durch diesen Fixpunkt bestimmt. Für alle diese Potentiale gilt,

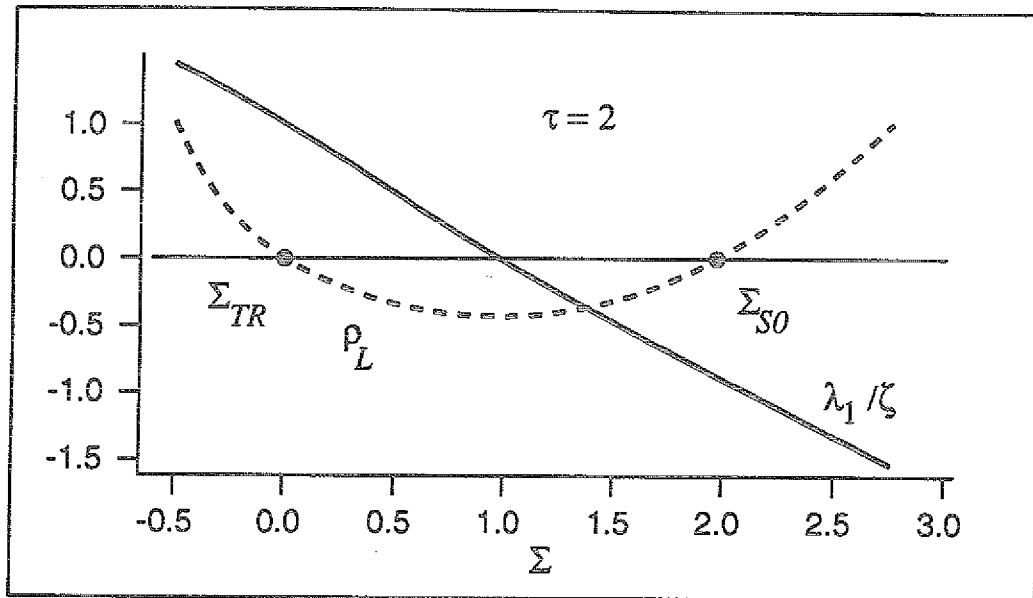


Abbildung 3.2: Line von Fixpunkten parametrisiert durch ρ_L und der größte Eigenwert λ_1/ζ als eine Funktion von $\Sigma = U^*(0)$ für $\tau = 2$. Die Funktion ρ_L hat zwei Nullstellen, die zwei kurzreichweitigen Fixpunkten entsprechen: der triviale- und ein nichttriviale Fixpunkt, mit jeweils einer bzw. keiner relevanten Eigenstörung

daß ihre kritische Potentialstärke $G^* = 0$ und der kritische Exponent $\nu_{||} = 2$ ist.

Das aus Bild 3.2 folgende Phasendiagramm ist in Bild 3.3 gezeichnet. Man sieht, daß das Phasendiagramm, welches die nichtlineare RG liefert, dieselbe Topologie hat wie das Phasendiagramm, welches aus der Transfer-Matrix Rechnung erhalten wurde. Dazu ist die Amplitude Σ gegen den Teil der Funktion ρ_L aufgetragen, der eine relevante Eigenstörung mit positivem Eigenwert λ_1/ζ hat.

Für $\tau = 2$ ergibt sich folgendes Gesamtbild: Alle Potentiale, die nur ein Minimum bei $l = 0$ haben und wie $V(y) \sim y^{-\tau}$ mit einem Exponent $\tau > 1$ abfallen, rauhen bei $U(0) = 0$ auf. Falls sie schneller als y^{-2} abfallen, ist die Einschränkung auf ein Extremum nicht notwendig. Falls sie jedoch mehr Extrema haben und langsamer als y^{-2} und schneller als y^{-1} abfallen, erwartet man ebenfalls nichttriviale Phasengrenzen wie im marginalen Fall $\tau = 2$, aber im Gegensatz zu diesem ist für Potentiale mit einer langreichweitigen Amplitude $W < 0$ der Übergang von erster Ordnung. Falls das Potential schließlich langsamer als y^{-1} abfällt, bestimmt der langreichweitige Teil des Potentials das kritische Verhalten und die Phasengrenze liegt bei $W = 0$.

Potentiale, mit mehreren Extrema und einem Abfall wie y^{-2} , zeigen nicht-

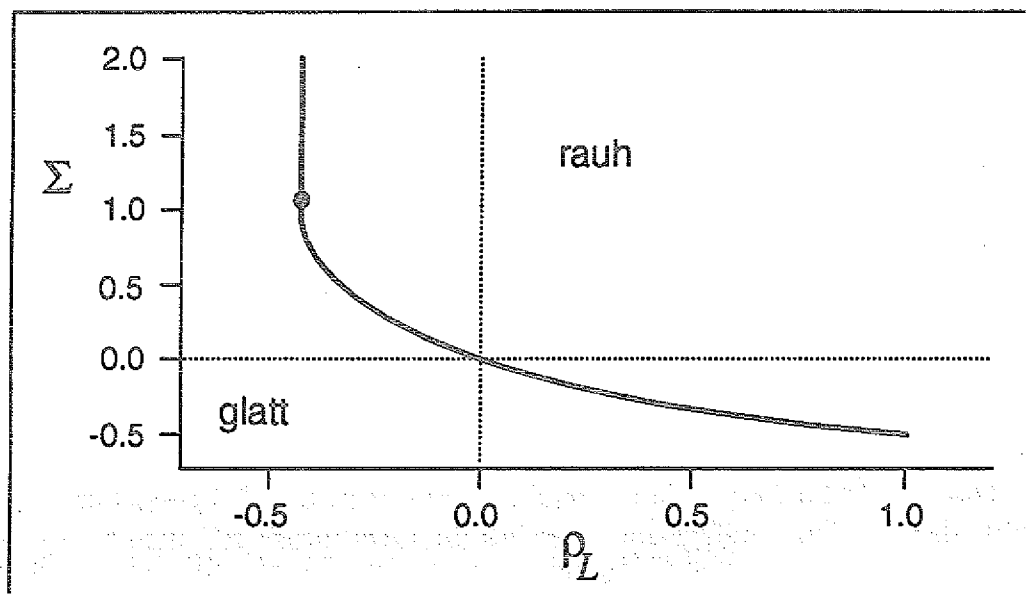


Abbildung 3.3: Phasendiagramm der Aufrauhung für $\tau = 2$, abgeleitet aus Bild (3.2). Die Amplitude Σ ist gegen den Zweig von ρ_L aufgetragen, der eine relevante Eigenstörung hat. Ein Vergleich mit Bild (3.1) zeigt, daß Σ und ρ_L jeweils mit u und w korrespondieren.

universelles Verhalten mit w -abhängigen Exponenten, siehe Bild 3.2. Die Topologie dieses Phasendiagramms sollte für einen Bereich von τ Gültigkeit behalten, bis die Funktion $\rho_L(\Sigma)$ mehr Struktur entwickelt.

3.3.3 Bifurkationen von Fixpunkten

Der Wert von τ soll nun vergrößert werden, um (i) den Aufrauungsübergang von polymerisierten Membranen zu untersuchen. Dieser Membrantyp ist im Rahmen des effektiven Hamiltonians (1.17) durch den Wert $\tau \simeq 4$ charakterisiert [62] und (ii) um das Verhalten von Grenzflächen in $d = 3$ zu untersuchen, was $\tau = \infty$ entspricht. Da für große $|y|$ die Fixpunktpotentiale wieder durch die lineare Fixpunktgleichung bestimmt sind, haben wir in Analogie zum Entbindungsübergang für $\tau = \infty$, bzw. $\zeta = 0$ wieder keine nichttrivialen Fixpunktgleichungen, die mit den Randbedingungen kompatibel sind, da die Lösung der linearen Fixpunktgleichung dann oszillierendes Verhalten zeigt.

Die Funktion $\rho_L(\Sigma)$ selbst entwickelt für größer werdendes τ eine immer komplexere Struktur. Das sieht man ein, wenn man die Eigenstörungen f_λ am trivialen Fixpunkt U_{TR}^* betrachtet, welche durch (3.44) mit $U^*(y)'' \equiv 0$ gegeben sind. Die beiden unabhängigen Lösungen können nun explizit für alle y angegeben werden. Die eine Lösung ist gegeben durch

$$f_\lambda^{(1)}(y) = \exp(-y^2/4) D_{\tau-\lambda/\zeta-1}(y) / D_{\tau-\lambda/\zeta-1}(0). \quad (3.49)$$

wobei $D_\mu(y)$ die parabolische Zylinderfunktion ist und $D_{\tau-\lambda/\zeta-1}(0)$ ein Faktor, der die Normierung $f_\lambda^{(1)}(0) = 1$ sicherstellt: $D_\mu(0) = \Gamma(1/2) 2^{\mu/2} / \Gamma([1-\mu]/2)$, Ref. [4]. Die zweite Lösung ist dann durch

$$f_\lambda^{(2)}(y) = \frac{1}{N} f_\lambda^{(1)}(y) \int_{y_0}^y dx e^{-\frac{1}{2}x^2} / [f_\lambda^{(1)}(x)]^2 \quad (3.50)$$

gegeben, wobei N ein Normierungsfaktor ist.

Für große $|y|$ hat man $f_\lambda^{(1)}(y) \sim |y|^{\tau-1-\lambda/\zeta} e^{-y^2/2}$, vergl. (3.47). Es folgt dann von (3.50), daß $f_\lambda^{(2)}(y) \sim |y|^{-\tau+\lambda/\zeta}$, was wir aber gerade durch die Bedingung $C_f = 0$ in (3.48) ausgeschlossen haben. Weiter sollen alle Eigenstörungen symmetrisch um den Ursprung sein, was equivalent zu $\partial f_\lambda(y)/\partial y|_0 = 0$ ist. Für die Eigenfunktion $f_\lambda^{(1)}(y)$ gegeben durch (3.49), folgt:

$$\partial f_\lambda^{(1)}(y)/\partial y|_0 = D'_{\tau-\lambda/\zeta-1}(0) / D_{\tau-\lambda/\zeta-1}(0) \quad (3.51)$$

mit $D'_\mu(0) = \Gamma(-1/2) 2^{(\mu-1)/2} / \Gamma(-\mu/2)$, Ref. [4] und $\mu = \tau - \lambda/\zeta - 1$. Das heißt, $\partial f_\lambda^{(1)}(y)/\partial y|_0 = 0$ ist an den Polen von $\Gamma(-\mu/2)$ erfüllt, was gleichbedeutend mit

$$\tau - \lambda/\zeta - 1 = 2k \quad (3.52)$$

ist, wobei k eine beliebige natürliche Zahl $k \geq 0$ ist. In diesem Fall ist die Parabolische Zylinderfunktion von gerader Ordnung und kann durch das Hermite-Polynom $H_n(y)$ ausgedrückt werden:

$$f_\lambda^{(1)}(y) = \exp(-y^2/2) H_{2k}(y/\sqrt{2}) / H_{2k}(0). \quad (3.53)$$

Der größte Eigenwert $\lambda/\zeta = \tau - 1$ entspricht $k = 0$, was wir auch numerisch, vergl. Bild 3.2, und von der Matching-Prozedur in Abschnitt 3.2.3 gefunden hatten.

Wenn nun τ größer wird, werden weitere Eigenstörungen relevant bei

$$\tau_{k+1} = 2k + 1 \quad \text{mit} \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (3.54)$$

Bei $\tau = \tau_2 = 3$ hat man $\lambda_1/\zeta = \tau_2 - 1 = 2$ und $\lambda_2/\zeta = \tau_2 - 1 - 2 = 0$. Es gibt also eine zusätzliche marginale Eigenstörung, die für $\tau > \tau_2$ relevant wird. Bei $\tau = \tau_3 = 5$, wird ein weiterer Eigenwert λ_3/ζ relevant und man hat $\lambda_1/\zeta = 4$, $\lambda_2/\zeta = 2$ und $\lambda_3/\zeta = 0$. Allgemein hat man k relevante Eigenstörungen für $\tau > \tau_{k+1}$. Dieses Resultat ist exakt, da alle Eigenstörungen am trivialen Fixpunkt U_{TR}^* untersucht wurden, wo die RG in erster Ordnung in U exakt ist.

Das Verhalten der Eigenstörungen als eine Funktion von τ steht in einem direktem Zusammenhang zu der Fixpunktfunktion $\rho_L(\Sigma)$. Die lineare RG hat zwei linear unabhängige Lösungen, eine von ihnen ist:

$$U_{lin}^*(y) = \exp(-y^2/4) D_{\tau-1}(y). \quad (3.55)$$

Für $\tau - 1 = 2k$, mit k einer natürlichen Zahl $k \geq 0$, ist die Funktion $U_{lin}^*(y)$ gegeben durch (3.55) gerade und dadurch kompatibel mit den Randbedingungen der Aufrauhung. Die Lösung (3.55) sollte in einer *Umgebung* um den Ursprung $\Sigma = 0$ eine gute Approximation an die Lösung der Fixpunktgleichung sein. Da aber $U_{lin}^*(y)$ keinen langreichweitigen Potenzabfall hat, folgt dann, daß die Funktion $\rho_L(\Sigma)$ in dieser Umgebung um den Ursprung identisch verschwindet, $\rho_L(\Sigma)$ also einen *Sattelpunkt* besitzt, wenn $\tau = \tau_{k+1}$, mit $k = 1, 2, 3, \dots$ ist (der Fall $\tau = 1$ wird im nächsten Abschnitt diskutiert). Man sieht, daß bei denselben τ_k -Werten die Sattelpunkte erscheinen, bei denen die neuen λ_k/ζ relevant werden.

Das ergibt folgendes Bifurkationsszenario: Aus jedem Sattelpunkt bifurkiert ein neues Paar von Extrema und ein dazugehöriges Paar von Nullstellen der Funktion $\rho_L(\Sigma)$ am Ursprung $\Sigma = 0$ heraus. Die Extrema und die Nullstellen wandern auseinander, wenn τ größere Werte annimmt. Die Nullstellen der Funktion $\rho_L(\Sigma)$ entsprechen kurzreichweitigen Fixpunkten. Zwischen

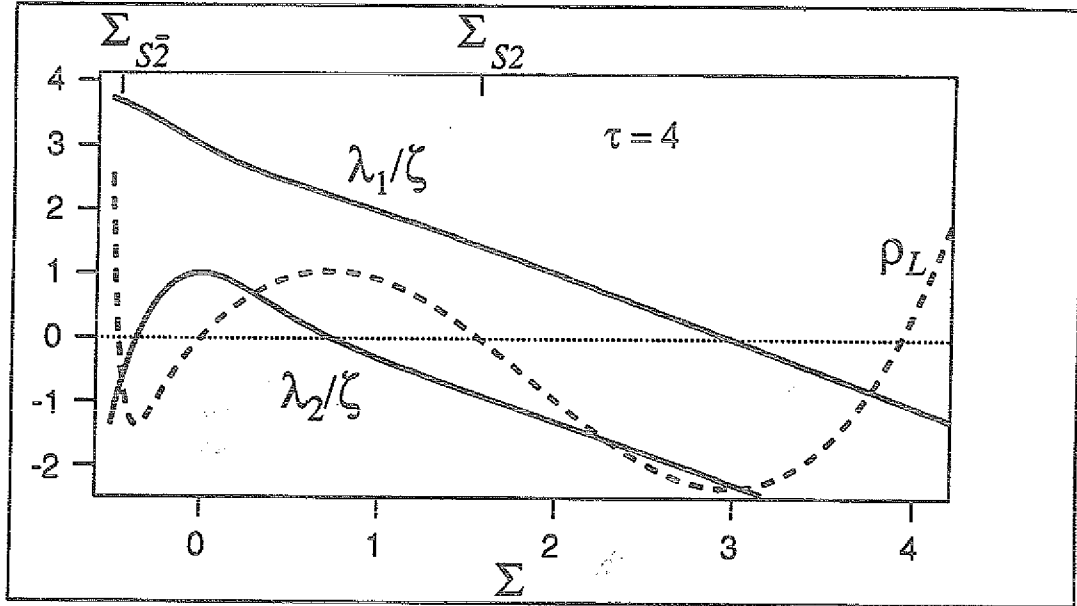


Abbildung 3.4: Die Funktion $\rho_L = \rho_L(\Sigma)$ und die ersten beiden relevanten Eigenwerte für $\tau = 4$. Im Vergleich zu $\tau = 2$ hat die Funktion ρ_L ein neues Paar von Extrema, das bei $\tau = 3$ aus dem trivialen Fixpunkt herausbifurkiert ist. Zwischen diesen Extrema ist ein zusätzlicher Eigenwert relevant. Zwei neue kurzreichweitige Fixpunkte $U_{S_2}^*(y)$ und $U_{S_2}^*(y)$ mit Amplituden Σ_{S_2} und Σ_{S_2} haben jeweils beide eine relevante Eigenstörung.

solch einem Paar von Extrema –und daher auch zwischen den kurzreichweitigen Fixpunkten– erscheint am Ursprung wieder ein Sattelpunkt, wenn τ die nächste ungerade natürliche Zahl erreicht hat. Wenn τ nach Unendlich geht wiederholt sich das ganze unendlich oft. Zu jedem Paar von Extrema gehört ein Eigenwert, der im Intervall zwischen den Extrema relevant und sonst irrelevant ist.

Das ist aber genau dieselbe Art von Bifurkationsstruktur, wie wir sie im Entbindungsfall gefunden hatten, lediglich der Ort, wo die Bifurkation auftritt, ist bei Aufrauungsphänomenen immer auf den trivialen Fixpunkt festgelegt.

Die Bifurkationsstruktur soll nun für den Fall $\tau = 4$ illustriert werden, der polymerisierten Membranen entspricht. Die Funktion $\rho_L(\Sigma)$ ist in Bild 3.4 aufgetragen. Man sieht ein Paar von Extrema welches aus dem Sattelpunkt bei $\tau = \tau_2 = 3$ herausbifurkiert ist. Es gibt dazu zwei neue kurzreichweitige Fixpunkte, $U_{S_2}^*(y)$ und $U_{S_2}^*(y)$, mit einem $\Sigma = \Sigma_{S_2}$ und $\Sigma = \Sigma_{S_2}$. Diese

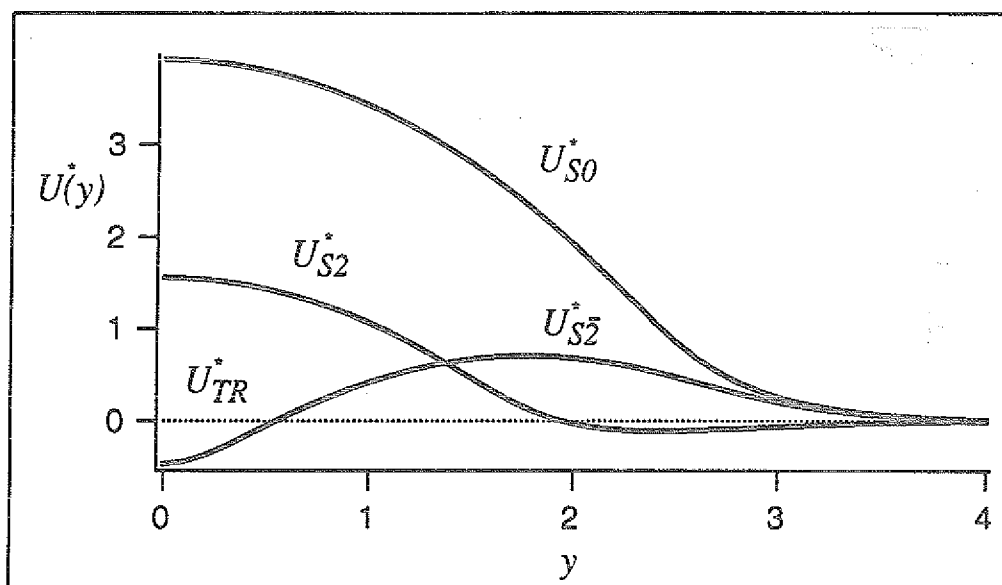


Abbildung 3.5: Die vier kurzreichweitigen Fixpunkte bei $\tau = 4$. Gezeigt wird nur der Teil mit $y > 0$. Der Fixpunkt U_{S0}^* ist rein repulsiv und hat keine relevante Eigenstörung. Er repräsentiert die rauhen Phase. Die Fixpunkte $U_{S2}^*(y)$ und $U_{S2}^*(y)$ haben eine relevante Eigenstörung; U_{S2}^* repräsentiert einen Phasenübergang erster Ordnung.

Fixpunktpotentiale sind in Bild 3.5 dargestellt. Sie haben beide jeweils nur eine relevante Eigenstörung. Der triviale Fixpunkt U_{TR}^* hat zwei relevante Eigenstörungen und entspricht einem multikritischen Punkt. Er trennt zwei Familien von Wechselwirkungen, die ein kritisches Verhalten zeigen, das jeweils von U_{S2}^* und U_{S2}^* beherrscht wird. Die Form des Potentials U_{S2}^* und der Wert $\lambda_1/\zeta \simeq \tau$ an diesem Fixpunkt implizieren, daß U_{S2}^* einen Phasenübergang erster Ordnung repräsentiert. Der andere Fixpunkt repräsentiert einen Phasenübergang zweiter Ordnung und Potentiale, deren kritisches Verhalten durch diesen Fixpunkt bestimmt sind, haben mindestens ein Minimum bei $y > 0$ und ein Maximum bei $y = 0$. Flächen in solchen Potentialen rauhen bei einer endlichen Stärke des Potentialminimums auf. Das ist eine zweite Klasse von Aufrauungsübergängen von polymerisierten Membranen mit $\tau \simeq 4$ in kurzreichweitigen Potentialen (vergl. dazu die Universalität für Flächen mit $\tau = 2$: Alle kurzreichweitigen Potentiale rauhen bei einer Potentialstärke $U(0) = 0$ auf).

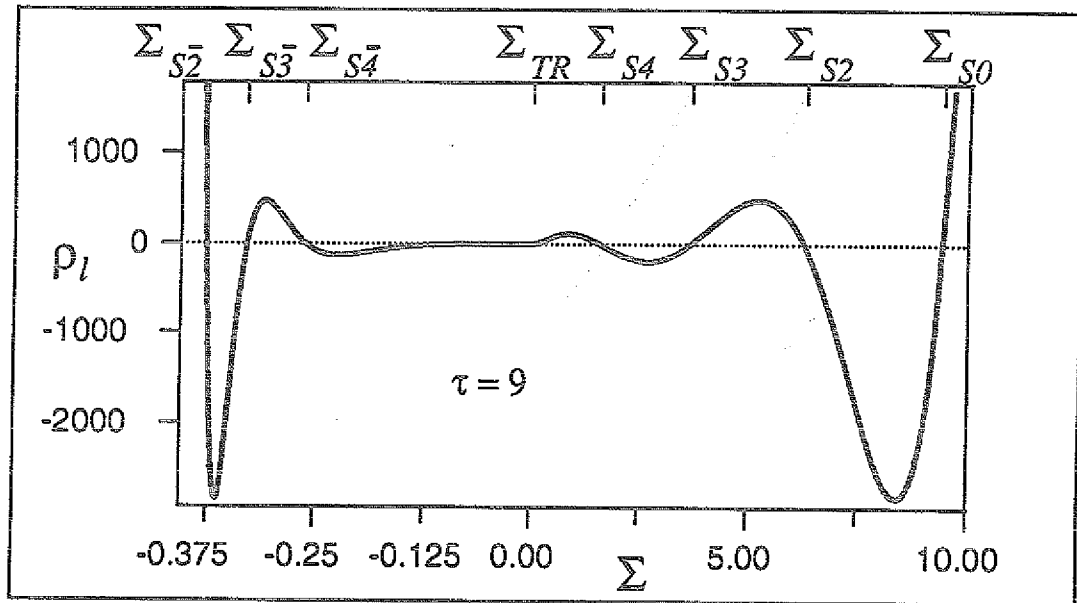


Abbildung 3.6: Die Funktion $\rho_L = \rho_L(\Sigma)$ bei $\tau = 9$. Man beachte, daß für $\Sigma < 0$ die Skala mit einem Faktor 10 vergrößert wurde. Da τ ungerade ist, existiert am Ursprung ein Sattelpunkt. Man hat drei Paare von Extrema mit den korrespondierenden Nullstellen von $\rho_L(\Sigma)$, die aus dem Ursprung jeweils bei $\tau = 3, 5, 7$ herausbifurkiert sind. Der triviale Fixpunkt hat jetzt vier relevante Eigenstörungen.

Der triviale Fixpunkt U_{TR}^* bestimmt jedoch noch immer das kritische Verhalten von allen Potentialen mit nur einem Minimum bei $y = 0$, obwohl er die größte Anzahl relevanter Eigenstörungen von allen kurzreichweitigen Fixpunkten besitzt. Für $\tau = 9$ gilt zum Beispiel: U_{TR}^* hat vier relevante Eigenstörungen und es gibt zusätzlich drei Paare von kurzreichweitigen Fixpunkten, siehe auch Bild 3.6 für die ganze Funktion $\rho_L(\Sigma)$. Der Grund dafür ist, daß sowohl U_{S2}^* als auch U_{S2}^* und alle anderen kurzreichweitigen neuen Fixpunkte, die bei größeren τ -Werten auftreten, immer mehr als ein Extremum haben.

Man hat jedoch im allgemeinen eine Klasse von kurzreichweitigen Fixpunkten, die einen Aufrauungsübergang erster Ordnung beschreiben und eine andere Klasse von Potentialen, die multikritisches Verhalten zeigen, welches jeweils von der Anzahl ihrer Extrema abhängt.

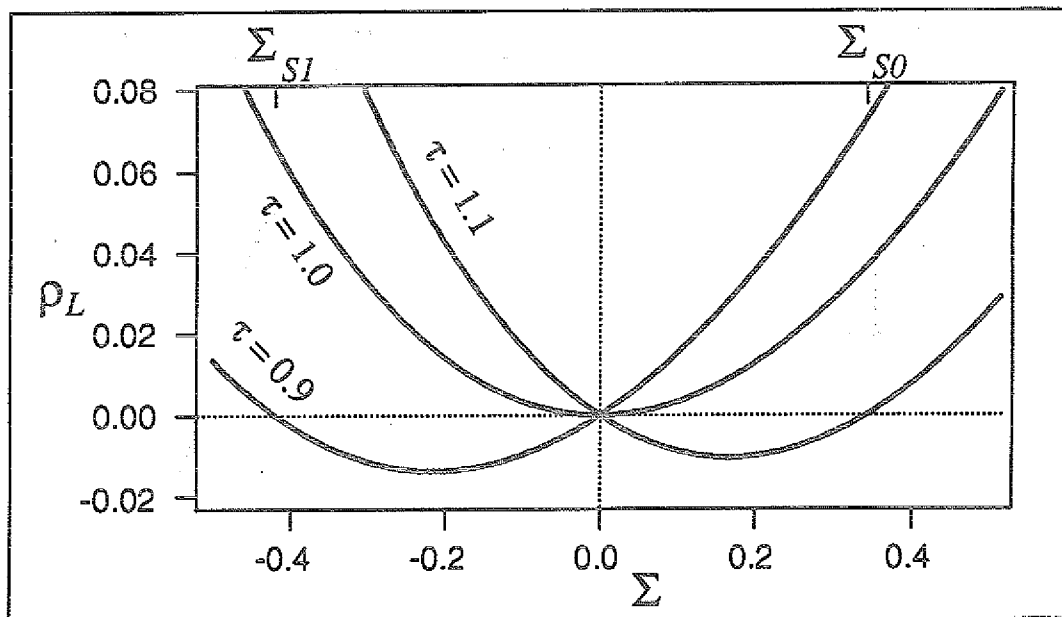


Abbildung 3.7: Die Funktion $\rho_L = \rho_L(\Sigma)$ für $\tau \simeq 1$. Das Minimum von ρ_L ist jeweils bei $\Sigma > 0$, $\Sigma = 0$ und $\Sigma < 0$ für $\tau > 1$, $\tau = 1$ und $\tau < 1$. Ein relevanter Eigenwert existiert nur für $\Sigma < \Sigma_{min}$, daher hat man einen nichttrivialen kurzreichweitigen Fixpunkt mit einer relevanten Eigenstörung nur für $\tau < 1$.

3.3.4 Der Limes kleiner Werte von τ

Es ist interessant zu sehen, wie eine Reduzierung der lateralen Dimension oder, was gleichbedeutend ist, des Parameters τ das kritische Verhalten verändert. Allgemein gesprochen hat man ein Anwachsen der thermischen Fluktuationen, die gegen ein attraktives Potential arbeiten.

Abb. 3.7 zeigt die Funktion $\rho_L(\Sigma)$ für verschiedene Werte von τ , mit $\tau < 2$. Man sieht eine Verschiebung des Minimums und der Nullstellen von $\rho_L(\Sigma)$ zu kleineren Σ . Bei $\tau = \tau_1 = 1$, hat das Minimum den Ursprung erreicht. Für $\tau < 1$ bewegt sich das Minimum von $\rho_L(\Sigma)$ weiter zu negativen Σ -Werten und man hat wieder zwei kurzreichweitige Fixpunktpotentiale. Für $\tau < 1$ gibt es einen nichttrivialen kurzreichweitigen Fixpunkt bei $\Sigma = \Sigma_{S1} < 0$, der mit $U_{S1}^*(y)$ bezeichnet wird. Dieser Fixpunkt repräsentiert nun die kritische Phase bei einem Aufrauungsübergang, während U_{TR}^* jetzt der rauhen Phase entspricht: Die Rolle der beiden Fixpunkte ist vertauscht. Man sieht das ebenfalls ein,

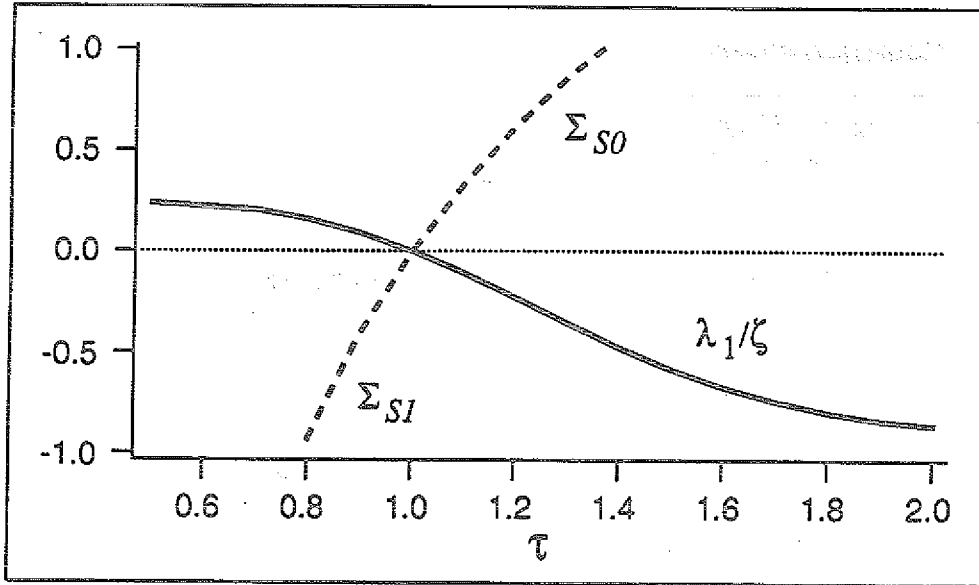


Abbildung 3.8: Größter Eigenwert λ_1/ζ und Amplitude Σ des nichttrivialen Fixpunktes mit $\rho_L = 0$ als eine Funktion von τ . Dieser Fixpunkt, bezeichnet mit $U_{S1}(y)$ und $U_{S0}(y)$, hat die Amplituden Σ_{S1} und Σ_{S0} für $\tau < 1$ und $\tau > 1$, vgl. auch 3.7.

wenn man die führenden Eigenwerte dieser kurzreichweitigen Fixpunktpotentiale betrachtet. Für den nichttrivialen, der mit $U_{S1}^*(y)$ und $U_{S0}^*(y)$ jeweils für $\tau < 1$ und $\tau > 1$ bezeichnet wurde, ist der Eigenwert λ_1/ζ als Funktion von τ in Bild 3.8 dargestellt. Bei $\tau = 1$ wechselt der Eigenwert λ_1/ζ sein Vorzeichen und wird relevant für kleinere τ . Die τ -Abhängigkeit von λ_1/ζ für den trivialen Fixpunkt ist einfach durch $\lambda_1/\zeta = \tau - 1$ gegeben, wie aus (3.52), mit $k = 0$ folgt. Der Eigenwert λ_1/ζ für den trivialen Fixpunkt zeigt also ebenfalls einen Vorzeichenwechsel bei $\tau = 1$, wobei allerdings jetzt der Eigenwert λ_1/ζ für $\tau < 1$ irrelevant wird. Der Grenzwert $\tau = 1$ kann einfach aus der Tatsache erhalten werden, daß die Eigenstörung f_{λ_1} des trivialen Fixpunktes marginal bei $\tau = 1$ und irrelevant für $\tau < 1$ ist [38, 44]. Wir schließen also, daß Systeme mit $\tau < 1$ einen Aufrauungsübergang bei nichttrivialen Potentialstärken haben können, auch wenn die Wechselwirkung rein attraktiv ist.

3.4 Aufrauhung von Grenzflächen in drei Dimensionen

Die Aufrauhung von Grenzflächen in $d = 3$ ist von besonderem Interesse. Man muß dazu, wie auch im Fall von Entbindungsübergängen, den Limes $d \rightarrow 3$, bzw. $\tau \rightarrow \infty$ der RG betrachten, denn in $d = 3$ selbst gibt es, in Analogie zu den Entbindungsübergängen, keine nichttrivialen Fixpunktlösungen, die für große Werte der Abstandskoordinate y abfallen. Zusätzlich aber ist es bei der Aufrauhung möglich, daß im Abschnitt 3.2.2 besprochene Matching-Verfahren auch in der marginalen Dimension $d = 3$, bzw. $\tau = \infty$ anzuwenden. Als physikalische Realisierung betrachte man ein dreidimensionales System, welches einen planaren Defekt enthält, wie etwa das dreidimensionale Ising Modell mit einer Ebene von schwachen Kopplungen. Wenn die Temperatur T über der Rauigkeitstemperatur ist, ist die Grenzfläche rau und das periodische Gitterpotential ist irrelevant [7]. In dieser Situation rührt das effektive Potential für die Grenzfläche nur von der Defektebene her und ist kurzreichweitig, wenn das Ising Modell nur kurzreichweitige Kopplungen hat.

Für $d < 3$ ist der Rauigkeitsexponent $\zeta = (3 - d)/2$ und $\tau = (d - 1)/\zeta = 2(d - 1)/(3 - d)$. Wenn $d = 3$ von unten erreicht wird, geht der Rauigkeitsexponent ζ nach Null und τ nach Unendlich. In diesem Limes erscheinen unendlich viele kurzreichweitige Fixpunktpotentiale um den trivialen Fixpunkt, wie wir es im Abschnitt 3.3.3 diskutiert haben, die relevanteste Störung jedoch, mit Eigenwert λ_1 hat einen endlichen Limes für $d = 3$, da $\lambda_1 = \zeta(\tau - 1) = 2 - 3\epsilon/2$ für $d = 3 - \epsilon$. Das impliziert den kritischen Exponent

$$\nu_{\parallel} = 1/\lambda_1 = 1/2 \quad \text{für } d = 3. \quad (3.56)$$

Wir erhalten so den Mean-Field Wert, der in allen Dimensionen $d > 3$ richtig sein sollte, da dann Fluktuationen unwichtig sind. In $d = 3$ erwartet man jedoch das Auftreten von konfluenten logarithmischen Singularitäten.

Die Art dieser logarithmischen Terme kann durch eine geeignete Modifikation der Matching-Prozedur, wie sie in Abschnitt 3.2.2 besprochen wurde, erhalten werden. Anstelle von (3.23) und (3.24), hat man nun

$$\tilde{a}_{\perp}^2 \sim \ln(b_0) \sim \ln \xi_{\parallel}. \quad (3.57)$$

Die Matching-Bedingung lautet folglich :

$$\frac{K}{\xi_{\parallel}^2(b_0)} \sim b_0^2 \tilde{a}_{\perp}^{-2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}u^2} (u^2 - 1) V(\tilde{a}_{\perp} u). \quad (3.58)$$

Wenn wir nun das Potential, welches wir in (3.29) definiert hatten:

$$V(l) = G[l^2 + l_0^2]^{-\frac{r}{2}} \quad (3.59)$$

in die Matching-Bedingung einsetzen führt das über (3.58) auf:

$$\frac{K}{\xi_{\parallel}^2(b_0)} \approx |G|b_0^2 \left(c_1 \ln(b_0)^{-\frac{3}{2}} + \ln(b_0)^{-(1+\frac{r}{2})} \right), \quad (3.60)$$

wobei c_1 unabhängig von b_0 ist. Es folgt dann, daß die Divergenz von $\xi_{\parallel}$ gegeben ist durch:

$$\xi_{\parallel} \sim \begin{cases} |G|^{-\frac{1}{2}} [\ln(1/|G|)]^{\frac{3}{4}}, & \text{für } r > 1; \\ |G|^{-\frac{1}{2}} [\ln(1/|G|)]^{\frac{r}{4} + \frac{1}{2}}, & \text{für } r < 1. \end{cases} \quad (3.61)$$

Die logarithmischen Korrekturen zum führenden Verhalten $|G|^{-\frac{1}{2}}$ hängen also von r ab.

4 Ausblick/Zusammenfassung

Phasenübergänge von Grenzflächen, Membranen und Polymeren in äußeren Potentialen wurden untersucht.

Bei *Entbindungsphänomenen* enthält das äußere Potential eine harte Wand bei Abstand $l = 0$, die im Rahmen einer Renormierungs-Rechnung nichtperturbativ berücksichtigt werden kann. Zwei approximative, nichtlineare Renormierungsgruppen wurden auf den Entbindungsübergang angewendet und zeigen konsistente Resultate. Die approximativen Renormierungsgruppen (RG) enthalten als einzigen Parameter den Exponenten $\tau = d_{\parallel}/\zeta$, der an die verschiedenen Systeme angepaßt werden muß. Potentiale, die schneller als $1/l^{\tau}$ abfallen, gehören in das Regime starker Fluktuationen (SFL Regime). Es zeigte sich, daß das universelle Verhalten des SFL Regimes bei $\tau = 2$ für größere Werte von τ modifiziert wird, da die Fixpunktstruktur der RG für zunehmendes τ eine komplexe Bifurkationsstruktur aufweist.

Für einen Wert von $\tau > \tau_{S1} = 4.6 \pm 0.2$ sind auch im SFL Regime Phasenübergänge erster Ordnung möglich. Polymerisierte Membranen sind durch den Exponenten $\tau = 4$ charakterisiert und entbinden folglich im SFL Regime immer kontinuierlich. Eine unabhängige Überprüfung der Bifurkationsstruktur durch ein Modell, das exakt lösbar ist oder simuliert werden kann, wäre interessant. Dabei müßte das Modell durch einen Parameter τ charakterisiert sein, der größer als $\tau \approx 4.8$ ist. Eine Membran mit lateral langreichweitigen Kräften ist ein möglicher Kandidat für so ein Modell.

Grenzflächen in $d = 2 + 1$ und Membranen unter lateraler Spannung sind im freien Zustand nur marginal rau, was $\tau = \infty$ entspricht. Die RG zeigt ein nichtanalytisches Verhalten im Limes großer τ : Für $\tau = \infty$ gibt es keine Fixpunkte, die kompatibel mit der Randbedingung einer harten Wand sind. Für großes aber endliches τ driften die Fixpunkte linear in τ nach unendlich. Eine Reskalierung der Flußgleichungen führt auf das Konzept der "driftenden Fixpunkte", die für $\tau = \infty$ anstelle der ursprünglichen Fixpunkte treten. Die kurzreichweitigen Fixpunkte können an einen driftenden Fixpunkt angepaßt werden und für kontinuierliche Übergänge verhalten sich die dazugehörigen

Exponenten ψ und $\nu_{\parallel}$ wie: $\psi \sim \tau^{-1/3}$ und $\nu_{\parallel} \sim \tau^{2/3}$. Im Limes $\tau = \infty$ folgt dann $\psi = 0$ und $\nu_{\parallel} = \infty$.

Die lineare RG für $\tau = \infty$, die die harte Wand unsystematisch berücksichtigt, sagt drei Regimes voraus, von denen allerdings keines dabei ist, welches diese Exponenten besitzt. Es wäre wünschenswert, die Voraussagen der nicht-linearen RG durch eine Simulation zu überprüfen und insbesondere damit auch das Szenario der driftenden Fixpunkte zu verifizieren.

Aufrauungsphänomene von Flächen in symmetrischen Potentialen wurden für verschiedene Typen von Flächen in beliebigen Dimensionen untersucht. Für Grenzflächen in $d = 1 + 1$ kann das kritische Verhalten mit Transfer-Matrix Rechnungen exakt erhalten werden. Für Potentiale $V(l)$, die wie $W/|l|^2$ für große $|l|$ abfallen, findet man ein komplexes Phasendiagramm, das dieselbe Topologie hat, wie das entsprechende für Benetzungsübergänge. In dieser Arbeit wurde in der gebundenen Phase eine Symmetriebrechung ausgeschlossen, eine einfache Verallgemeinerung der Rechnung auf Potentiale, welche die Symmetrie explizit brechen, ist möglich und gibt dann Einsicht über die Symmetrieeigenschaften der aufgerauhten Phase.

Das kritische Verhalten von Potentialen, die lediglich ein globales Minimum bei $l = 0$ haben, kann mit Hilfe einer linearen RG exakt bestimmt werden. Für diese Potentiale wird universelles Verhalten gefunden, wenn sie schneller als $1/|l|$ abfallen, und der kritische Exponent $\nu_{\parallel}$ ist gegeben durch $\nu_{\parallel} = 1/[\zeta(\tau-1)]$.

Potentiale mit mehreren Minima können mit Hilfe einer approximativen RG behandelt werden. Die Transfer-Matrix Rechnungen in $d = 1 + 1$ dienen dabei als Test für die approximative RG, welche ein analoges Phasendiagramm liefert. Man findet bei Aufrauungsübergängen eine entsprechende Sequenz von Bifurkationen wie beim Entbindungsübergang. Im Gegensatz zur Entbindung ist jedoch der triviale Fixpunkt $U_{tr}^* \equiv 0$ immer eine erlaubte Lösung der Fixpunktgleichungen, da er kompatibel mit den Randbedingungen von Aufrauung ist. Aus diesem Fixpunkt bifurkieren bei ungeraden Werten von τ neue kurzreichweitige Fixpunkte heraus. Gleichzeitig erscheinen neue relevante Eigenstörungen, die am trivialen Fixpunkt analytisch berechnet werden können.

Eine Störungstheorie, die die Bifurkation analytisch behandelt, sollte möglich sein, da eine kleine Differenz von τ zur nächsten ungeraden Zahl ein geeigneter kleiner Parameter ist, nachdem entwickelt werden kann. Weiter sind Computer Simulationen von polymerisierten Membranen in kurzreichweitigen, symmetrischen Potentialen ein definitiver Test der gefundenen Bifurkationsstruktur. Diese Sorte von Membranen haben einen Parameter $\tau = 4$, für diesen τ -Wert ist schon eine Bifurkation aufgetreten und man erwartet in Abhängigkeit des Potentials Aufrauungsübergänge von erster- und zweiter Ordnung.

Der kritische Exponent $\nu_{\parallel}$ des trivialen Fixpunktes ist analytisch im Limes großer τ und erreicht den Mean-Field Wert $\nu_{\parallel} = 1/2$, der ebenfalls für $\tau = \infty$ mit Hilfe der linearen RG gefunden wurde. Für $\tau = \infty$ erwartet man das Auftreten konfluenter logarithmischer Singularitäten, die ebenfalls in Computer Simulationen des dreidimensionalen Ising Modells zu sehen sein sollten.

Ein weiterer interessanter Aspekt von Aufrauhungsphänomenen ist das Verhalten für $\tau < 2$. In diesem Fall erwartet man universelles Verhalten für kurzreichweitige Potentiale $V(l)$, die schneller als $1/|l|^{\tau}$ abfallen. Für $\tau > 1$ ist deren kritisches Verhalten durch den trivialen Fixpunkt bestimmt, während für $\tau < 1$ die Grenzfläche oder Membran bei einer endlichen, negativen Potentialstärke aufrauhrt. Es wäre auch hier interessant ein Modell zu finden, das dieses Resultat bestätigt.

A Anhang: Potentiale mit $1/l^2$ Abfall in $d = 2$ Dimensionen

In diesem Anhang soll für das Potential:

$$V(l) = \begin{cases} U & \text{for } -l_0 < l < l_0, \\ W/l^2 & \text{for } |l| \geq l_0, \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

die Phasengrenze bestimmt werden. Um die Notation zu vereinfachen ist es üblich, die reskalierten Variablen: $y = l/l_0$, $u = 2Kl_0^2 U/T^2$, $w = 2KW/T^2$ und die reskalierten Energien: $e_n = 2Kl_0^2 E_n/T^2$ einzuführen. Die Schrödinger-Typ Gleichung schreibt sich dann:

$$-\phi_n'' + v(y)\phi_n = e_n\phi_n \text{ mit} \quad (\text{A.2})$$

$$v(y) = \begin{cases} u & -1 < |y| < 1 \\ w/y^2 & |y| \geq 1. \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

Der Aufrauung von Grenzflächen entspricht im Transfer-Matrix Formulismus dem Übergang von einem gebundenem Zustand zu einem Streuzustand [55]. Für den gebundenen Zustand hat man: $e_0 = -|e_0| \equiv -q^2$. Wir sind daher an dem Limes $q^2 \rightarrow 0^+$ interessiert. In dem Intervall $-1 < y < 1$ hat ϕ_0 die Form:

$$\phi_0 = C \cosh(\sqrt{u + q^2}y) \text{ für } u > 0, \quad (\text{A.4})$$

$$\phi_0 = C \cos(\sqrt{|u| - q^2}y) \text{ für } u < 0. \quad (\text{A.5})$$

Falls $|y| \geq 1$ hat man

$$\phi_0 = C' \sqrt{y} K_\mu(qy) \quad (\text{A.6})$$

mit $\mu = \sqrt{\frac{1}{4} + w}$, und $K_\mu(qy)$ ist eine modifizierte Besselfunktion in Standard Notation. Die Stetigkeitsbedingung von ϕ_0 und ϕ_0' bei $|y| = 1$ führt auf:

$$\sqrt{u + q^2} \tanh(\sqrt{u + q^2}) - \frac{1}{2} = L_\mu(q), \quad (\text{A.7})$$

$$-\sqrt{|u| - q^2} \tan(\sqrt{|u| - q^2}) - \frac{1}{2} = L_\mu(q), \quad (\text{A.8})$$

jeweils für $u > 0$ bzw. $u < 0$ und

$$L_\mu(q) = q \frac{\partial K_\mu / \partial q}{K_\mu(q)}. \quad (\text{A.9})$$

Diese Gleichungen bestimmen $q^2 = -e_0$ als eine Funktion der Parameter u und w . Hier soll nur der Fall $w \geq \frac{1}{4}$ (d.h. $\mu \geq 0$) betrachtet werden. Wenn man das asymptotische Verhalten von $K_\mu(x)$ für $q \rightarrow 0^+$ einsetzt, erhält man die Phasengrenze für den Aufrauungsübergang aus:

$$\sqrt{u_c} \tanh \sqrt{u_c} - \frac{1}{2} = -\sqrt{\frac{1}{4} + w_c}, \quad (\text{A.10})$$

$$-\sqrt{|u_c|} \tan \sqrt{|u_c|} - \frac{1}{2} = -\sqrt{\frac{1}{4} + w_c} \quad (\text{A.11})$$

wieder für $u > 0$ bzw. $u < 0$. Die Lösung dieser Gleichung wird in Bild 3.1 gezeigt. Der Fall $w \leq \frac{1}{4}$ verlangt ein Umschreiben der Stetigkeitsbedingung (A.7), wie es in Ref. [55] für Benetzungsübergänge im Detail vorgerechnet wird und soll daher hier nicht wiederholt werden. Wie in Bild 3.1 gezeigt wird, ist die Phasengrenze für $u \geq u_c = 0.595$ eine Gerade bei $w = -\frac{1}{4}$.

B Anhang: Matching Prozedur für ein langreichweitiges Potential mit zwei Parametern

Die Matching-Prozedur für das Potential aus (3.29) soll hier detaillierter dargestellt werden, damit man sieht, wie mit diesem Verfahren die kritischen Exponenten erhalten werden. Wir starten mit V aus (3.38):

$$V(l) = \begin{cases} U & |l| < l_0 \\ W/l^r & |l| > l_0 \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

Im Abschnitt 3.2.2 leiteten wir folgenden allgemeinen Ausdruck

$$\frac{K}{\xi_{\parallel}^{2n}(b_0)} = b_0^{d-1} b_0^{2\zeta} \tilde{a}_{\perp}^{-2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl'}{\sqrt{2\pi} \tilde{a}_{\perp}} e^{-\frac{1}{2} l'^2 / \tilde{a}_{\perp}^2} \left(\frac{l'^2}{\tilde{a}_{\perp}^2} - 1 \right) V(l'). \quad (\text{B.2})$$

für die Matching-Prozedur her, siehe (3.25). Die Variablensubstitution , $u \equiv l/\tilde{a}_{\perp}$, führt auf

$$\frac{K}{\xi_{\parallel}^{2n}(b_0)} \sim b_0^{d-1} \int_0^{\infty} du e^{-\frac{1}{2} u^2} (u^2 - 1) V(\tilde{a}_{\perp} u). \quad (\text{B.3})$$

wobei die Beziehung $\tilde{a}_{\perp} \sim b_0^{\zeta}$ aus (3.24) benutzt wurde. Das Integral in (B.3) wird in

$$I_S = 2U \int_0^{l_0/\tilde{a}_{\perp}} du e^{-\frac{1}{2} u^2} (u^2 - 1) \quad (\text{B.4})$$

und

$$I_L = 2W \int_{l_0/\tilde{a}_{\perp}}^{\infty} du e^{-\frac{1}{2} u^2} (u^2 - 1) u^{-r} \tilde{a}_{\perp}^{-r} \quad (\text{B.5})$$

aufgeteilt. Für I_S erhält man:

$$I_S = U \left\{ -2l_0/\tilde{a}_{\perp} + (l_0/\tilde{a}_{\perp})^{-3} + \mathcal{O}(\tilde{a}_{\perp}^{-5}) \right\}. \quad (\text{B.6})$$

Weiter hat I_L eine Singularität von der unteren Grenze, an der $\exp[-\frac{1}{2}u^2](u^2 - 1)$ um $u = 0$ entwickelt werden kann. Damit wir den führenden Term erhalten, teilen wir I_L weiter in

$$I_{L1} = -2W \int_{l_0/\tilde{a}_\perp}^{\infty} du u^{-r} \tilde{a}_\perp^{-r}, \quad (\text{B.7})$$

und

$$I_{L2} = 2W \int_{l_0/\tilde{a}_\perp}^{\infty} du [e^{-\frac{1}{2}u^2}(u^2 - 1) + 1] u^{-r} \tilde{a}_\perp^{-r}, \quad (\text{B.8})$$

auf. Im Fall $r > 1$ erhält man dann:

$$I_{L1} = -2W \frac{l_0^{1-r} \tilde{a}_\perp^{-1}}{r-1}. \quad (\text{B.9})$$

Damit man den nächsten Ordnungs Term von I_{L2} erhält, muß man zwei Fälle unterscheiden: Als erstes soll angenommen werden, daß I_{L2} eine Singularität an der unteren Grenze hat, dann ist der nächste Term:

$$I_{L2} = 3W \int_{l_0/\tilde{a}_\perp}^{\infty} du [u^2 + \mathcal{O}(u^4)] u^{-r} \tilde{a}_\perp^{-r} = 3W \frac{l_0^{3-r} \tilde{a}_\perp^{-3}}{r-3} + \mathcal{O}(\tilde{a}_\perp^{-r^<}), \quad (\text{B.10})$$

mit $r^< \equiv \min(r, 5)$, gültig für $r > 3$.

Im anderen Fall, $1 < r < 3$, hat man keine Singularität in I_{L2} und man erhält:

$$I_{L2} = 3W \int_0^{\infty} du [e^{-\frac{1}{2}u^2}(u^2 - 1) + 1] u^{-r} \tilde{a}_\perp^{-r} + \mathcal{O}(\tilde{a}_\perp^{-3}) \equiv W c_r^< \tilde{a}_\perp^{-r} + \mathcal{O}(\tilde{a}_\perp^{-3}). \quad (\text{B.11})$$

Zusammengefaßt ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{K}{\xi_{\parallel}^{2n}(b_0)} &\sim b_0^{d-1} \left\{ \tilde{a}_\perp^{-1} (-2l_0 U - \frac{2W l_0^{1-r}}{r-1}) \right. \\ &\quad \left. + \tilde{a}_\perp^{-3} (l_0^3 U + \frac{3l_0^{3-r} W}{r-3}) + \mathcal{O}(\tilde{a}_\perp^{-r^<}) \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

$$\frac{K}{\xi_{\parallel}^{2n}(b_0)} \sim b_0^{d-1} \left\{ \tilde{a}_\perp^{-1} (-2l_0 U - \frac{2W l_0^{1-r}}{r-1}) + \tilde{a}_\perp^{-r} W c_r^< + \mathcal{O}(\tilde{a}_\perp^{-3}) \right\}, \quad (\text{B.13})$$

für jeweils $r > 3$ bzw. $1 < r < 3$.

Der führende Term in (B.12) und (B.13) ist:

$$\frac{K}{\xi_{\parallel}^{2n}(b_0)} \sim b_0^{d-1} \tilde{a}_\perp^{-1} (-U - \frac{W l_0^{-r}}{r-1}) \sim b_0^{d-1-\zeta} (-U - \frac{W l_0^{-r}}{r-1}). \quad (\text{B.14})$$

Der Reskalierungs Faktor b_0 wird so gewählt, daß $\xi_{||} = b_0 a$, siehe (3.23), und von (B.14) hat man:

$$\xi_{||} \sim \left(\frac{-W l_0^{-r}}{r-1} - U \right)^{-\nu_{||}}, \quad (\text{B.15})$$

mit

$$\nu_{||} = \frac{1}{d-1-\zeta} = \frac{1}{\zeta(\tau-1)}. \quad (\text{B.16})$$

Literaturverzeichnis

- [1] D. Abraham, Phys. Rev. Lett. 44, 1165 (1980); und in *Phase transitions and Critical Phenomena*, Vol. 10, ed. by C. Domb and J. Lebowitz (Academic Press, London, 1986), S.1.
- [2] F.F Abraham , W.E. Rudge und M. Plischke, Phys. Rev. Lett. 62, 1757 (1989).
- [3] E.V. Albano, K. Binder, D. Heermann und W. Paul, Surface Sci. 223, 151 (1989).
- [4] M. Abramowitz, I.A. Stegun, Handbook of mathematical functions (Dover Publications, New York, 1972)
- [5] R.Z. Bariev, Sov. Phys. JETP 50, 613 (1979).
- [6] H. Bateman, *Higher Transcendental Functions*, Vol.II (McGraw-Hill, 1953).
- [7] H. van Beijeren und I. Nolden, in *Structure and Dynamics of Surfaces II* ed. by W. Schommers und P. von Blanckenhagen (Springer-Verlag, 1987).
- [8] K. Berndl, J. Käs, R. Lipowsky und E. Sackmann, Europhys. Lett. 13 (7), 659 (1990); und Udo Seifert, K. Berndl und R. Lipowsky, Phys. Rev. A 44, 1182 (1990).
- [9] K. Binder und D.P. Landau, Phys. Rev. B 37, 1745 (1988).
- [10] R. Blankenbecler, M.L. Goldberger und B. Simon, Ann.Phys (N.Y.) 108, 69 (1977).
- [11] E. Brézin, I. Halperin und S. Leibler, Phys. Rev. Lett. 50, 1387 (1983).
- [12] F. Brochard und J. F. Lennon, J. Phys. Paris 36, 1035 (1975).
- [13] T.W. Burkhardt, J. Phys. A 14, L63 (1981).

- [14] J. Cook-Röder und R. Lipowsky, *Europhys. Lett.*, im Druck, 1992.
- [15] B.M. McCoy und J.H.H. Perk, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 840 (1980).
- [16] F. David und S. Leibler, *Phys. Rev. B* **41**, 12926 (1990).
- [17] E. Eisenriegler, K. Kremer und K. Binder, *J. Chem. Phys.* **77**, 6296 (1982).
- [18] R.P. Feynman und A.R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, New York, 1965).
- [19] D. S. Fisher und D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **32**, 247 (1985).
- [20] M.E. Fisher, in *Statistical mechanics of membranes and surfaces*, ed. von D. Nelson, T. Piran und S. Weinberg (World Scientific, 1989), S. 19.
- [21] G. Forgacs, R. Lipowsky und T.M. Nieuwenhuizen, *Phase transitions and Critical Phenomena*, Vol.13, ed von C.Domb and J. Lebowitz (Academic Press, London, 1991).
- [22] P.-G. de Gennes und C. Taupin, *J. Phys. Chem* **88**, 2294 (1982).
- [23] P.-G. de Gennes, *Scaling Concepts in Polymer Physics* (Cornell University Press, New York 1979).
- [24] M. Girardet und R. Lipowsky, in 'Dynamics of membranes', Les Houches Februar 1991.
- [25] M. Girardet, Doktorarbeit, Universität München, 1992.
- [26] G.R. Gollner und E.K. Riedel, *Phys. Rev. Lett.* **34**, 856 (1975).
- [27] G. Gompper und T.W. Burkhard, *Phys. Rev. A* **40**, 6124 (1989).
- [28] G. Gompper und D.M. Kroll, *Phys. Rev. B* **37**, 3821 (1988).
- [29] G. Gompper und D.M. Kroll, *Europhysics Lett.* **9(1)**, 59 (1989).
- [30] G. Gompper, D.M. Kroll und R. Lipowsky, *Phys. Rev. B* **42**, 961 (1990).
- [31] S. Grothans und R. Lipowsky, *Phys. Rev. A* **41**, 4574 (1990).
- [32] S. Grothans und R. Lipowsky, in 'Dynamics of membranes', Les Houches, 1991.

- [33] S. Grotehan und R. Lipowsky, Phys. Rev. A **45**, im Druck (1992).
- [34] W. Helfrich, Z. Naturforsch. **28c**, 693 (1973).
- [35] W. Helfrich, Z. Naturforsch. **33a**, 305 (1978).
- [36] W. Helfrich und M. Mutz in *Random Fluctuation and Pattern Growth*, ed. von H.E. Stanley und N. Ostrowsky (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht 1988).
- [37] W. Helfrich und R.M. Servuss, Nuovo Cimento D **3**, 137 (1984).
- [38] D.A. Huse und C.L. Henley, Phys. Rev. Lett. **54**, 2708 (1985).
- [39] J.-S. Ho und A. Baumgärtner, Phys. Rev. Lett. **63**, 1324 (1989).
- [40] J.N. Israelachvili, *Intermolecular and Surface Forces* (Academic, Orlando, Florida, 1985).
- [41] F. Jülicher, R. Lipowsky und H. Müller-Krumbhaar, Europhys. Lett. **11**, 657 (1990).
- [42] Y. Kantor, M. Kardar und D.R. Nelson, Phys. Rev. A **35**, 3056 (1987).
- [43] Y. Kantor und D.R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **58**, 2774 (1987).
- [44] D.M. Kroll und R. Lipowsky, Phys. Rev. B **26**, 5289 (1982).
- [45] D.M. Kroll und R. Lipowsky, Phys. Rev. B **28**, 5273 (1983).
- [46] D.M. Kroll und G. Gompper, Phys. Rev. B **39**, 433 (1989).
- [47] L.D. Landau und E.M. Lifshitz, *Elastizitätstheorie* (Akademie Verlag 1975).
- [48] S. Leibler und A. Maggs, Phys. Rev. Lett. **63**, 406 (1989).
- [49] R. Lipowsky, D.M. Kroll und R.K.P. Zia, Phys. Rev. B **27**, 4499 (1983).
- [50] R. Lipowsky, J. Phys A **18**, L585 (1985).
- [51] R. Lipowsky und M.E. Fisher, Phys. Rev. Lett. **57**, 2411 (1986) und Phys. Rev. B **36**, 2126 (1987).
- [52] R. Lipowsky und S. Leibler, Phys. Rev. Lett. **56**, 2541 (1986) und **59**, 1983(E) (1987).

- [53] R. Lipowsky, Habilitationsschrift an der Ludwig Maximilians Universität München (1987), publiziert durch die Kernforschungs Anlage Jülich als: Jül-Spez-438)
- [54] R. Lipowsky, in *Random Fluctuations and Growth*, ed. by H.E. Stanley and N. Ostrowsky (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1988).
- [55] R. Lipowsky und T. Nieuwenhuizen, J. Phys. A 21, L89 (1988).
- [56] R. Lipowsky, Europhys. Lett. 7, 255 (1988).
- [57] R. Lipowsky, Phys. Rev. Lett. 62, 704 (1989).
- [58] R. Lipowsky und A. Baumgärtner, Phys. Rev. A 40, 2078 (1989).
- [59] R. Lipowsky und B. Zielinska, Phys. Rev. Lett. 62, 1572 (1989).
- [60] R. Lipowsky, in *Fundamental problems in statistical mechanics VII*, ed. von H. van Beijeren (North-Holland, Amsterdam, 1990).
- [61] R. Lipowsky, Physica Scripta T 29, 259 (1989).
- [62] R. Lipowsky und M. Girardet, Phys. Rev. Lett. 65, 2893 (1990).
- [63] R. Lipowsky, Nature 349, 475 (1991).
- [64] S.K. Ma., Modern Theory of Critical Phenomena (Benjamin 1976).
- [65] W. Magnus, F. Oberhettinger und R. P. Soni, *Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics* (Springer, New York, 1966).
- [66] Siehe z.B. *Physics of Amphiphilic Layers*, ed. von J. Meunier, D. Langevin und N. Boccaro, Springer Proc. in Physics, Vol. 21 (Springer-Verlag, 1987).
- [67] M. Mutz und W. Helfrich, Phys. Rev. Lett. 62, 2881 (1989).
- [68] D.R. Nelson und L. Peliti, J. Physique 48, 1085 (1987).
- [69] Siehe Reviews in *Statistical Mechanics of membranes and Surfaces* ed. von D.R. Nelson, T. Piran und S. Weinberg (World Scientific, 1989).
- [70] J.F. Nicoll, T.S. Chang und H.E. Stanley, Phys. Rev. A 13, 1251 (1976).
- [71] V.A. Parsegian und B.W. Ninham, J.theor. Biol 38, 101 (1973).

- [72] R.P. Rand, Ann. Rev. Biophys. Bioeng. 10, 277 (1981).
- [73] J.S. Rowlinson und B. Widom, *Molecular Theory of Capillarity* (Clarendon Press, Oxford 1982).
- [74] E. Sackmann, in *Biophysics*, ed. von W. Hoppe, W. Lohmann, H. Markl und H. Ziegler (Springer Verlag, 1982).
- [75] D.J. Scalapino und M. Sears, Phys. Rev. B 6, 3409 (1972).
- [76] S. Scheidl, Diplomarbeit, Universität München, 1989.
- [77] H. Spohn, Europhys. Lett. 14, 689 (1991).
- [78] G. Szegő, *Orthogonal Polynomials* (American Mathematical Society, New York, 1939).
- [79] F. J. Wegner und A. Houghton, Phys. Rev. A 8, 401 (1973).
- [80] F.J. Wegner, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 6, ed. von L. Domb und M.S. Green (Academic Press, 1976).
- [81] Siehe z.B. H. Wennerström, in [66], S. 171.
- [82] K.G. Wilson, Phys. Rev. B 4, 3184 (1971).
- [83] K.G. Wilson und M.E. Fisher, Phys. Rev. Lett. 28, 240 (1972).
- [84] K.G. Wilson und J.B. Kogut, Phys. Reports 12C, 75 (1974).
- [85] A. Zilker, H. Engelhardt und E. Sackmann, J.Phys. France 48, 2139 (1987).

Danksagung

Herrn Prof. Dr. R. Lipowsky danke ich sehr für die sehr interessante Aufgabenstellung und die intensive Betreuung. Die vielen Diskussionen mit ihm haben wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen. Weiter bin ich R. Lipowsky zu Dank verpflichtet, da ich quasi mit auf seinen Koffern von München nach Jülich umziehen durfte.

Herrn Prof. Dr. Herbert Wagner verdanke ich viel. Er förderte mich in München, wo ich an seinem Lehrstuhl Doktorand sein durfte; ausgesprochen großzügig zeigte er sich, als er meinem Wunsch nachkam, "biologisch inspirierte" Physik zu betreiben, in dem er mich kurzer Hand an R. Lipowsky auslieh. Weiter ermöglichte H. Wagner einen für mich sehr wichtigen Forschungsaufenthalt in Santa Barbara, Kalifornien.

Allen Mitgliedern des Lehrstuhls Wagner möchte ich für die angenehme, anregende Atmosphäre danken, ich bin immer sehr gerne ins Institut gekommen; besonders gedankt seien hier noch Gerhard Gompper, Michael Schwägerl und Joachim Krug.

Gedankt sei auch noch Stefan Scheidel, der mir die 'Soft-Cutoff' Renormierung nahe gebracht hat.

Den Leuten der Theorie 2, des Instituts für Festkörperforschung des Forschungszentrums Jülich möchte ich hier sehr herzlich für die kollegiale Atmosphäre und ihre Hilfsbereitschaft danken. Es war spannend zu sehen, wie innerhalb eines Jahres eine ganz neue Gruppe entstanden ist, und ich bin sehr optimistisch, daß wir noch viel von der Theorie 2 hören werden.

Frank Jülicher sei hier noch einmal ausdrücklich gedankt, sein stetes Interesse an meinem Thema war sehr anregend. Weiter unterstützte er mich auch sehr in dem Aufbau und der Betreuung des UNIX Clusters der Theorie 2; er hielt mir immer im Streit mit dem DEC Imperium den Rücken frei.

Diese Arbeit wurde in München vom BFMT unter 03WALMU5 finanziert, sowie von der KFA-Jülich, wo ich als Nachwuchswissenschaftler beschäftigt bin.

REPORT

1. The first part of the report is a summary of the work done during the year.

2. The second part is a detailed account of the work done during the year, and is divided into two sections: (a) the work done during the first half of the year, and (b) the work done during the second half of the year.

3. The third part is a summary of the results of the work done during the year, and is divided into two sections: (a) the results of the work done during the first half of the year, and (b) the results of the work done during the second half of the year.

4. The fourth part is a summary of the conclusions drawn from the work done during the year, and is divided into two sections: (a) the conclusions drawn from the work done during the first half of the year, and (b) the conclusions drawn from the work done during the second half of the year.

5. The fifth part is a summary of the recommendations made during the year, and is divided into two sections: (a) the recommendations made during the first half of the year, and (b) the recommendations made during the second half of the year.

6. The sixth part is a summary of the work done during the year, and is divided into two sections: (a) the work done during the first half of the year, and (b) the work done during the second half of the year.

7. The seventh part is a summary of the results of the work done during the year, and is divided into two sections: (a) the results of the work done during the first half of the year, and (b) the results of the work done during the second half of the year.

8. The eighth part is a summary of the conclusions drawn from the work done during the year, and is divided into two sections: (a) the conclusions drawn from the work done during the first half of the year, and (b) the conclusions drawn from the work done during the second half of the year.

9. The ninth part is a summary of the recommendations made during the year, and is divided into two sections: (a) the recommendations made during the first half of the year, and (b) the recommendations made during the second half of the year.

Handwritten text at the top of the page, possibly a header or title, which is mostly illegible due to blurring.

Vertical text on the right margin, likely a page number or reference, which is mostly illegible due to blurring.

JÜI-2672
September 1992
ISSN 0366-0885