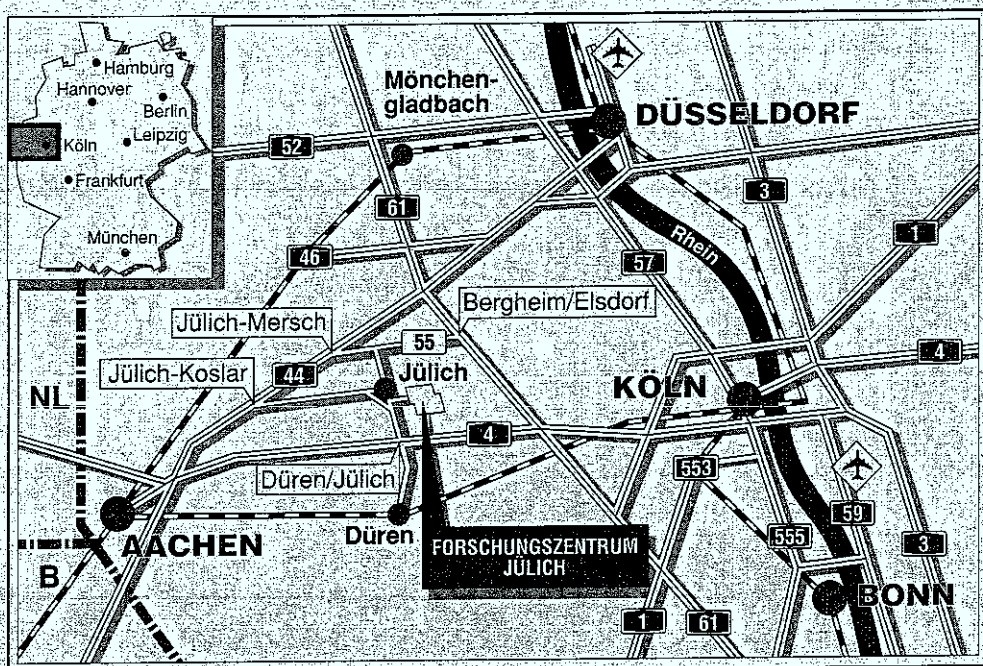


Institut für Festkörperforschung

Membranstapel und Fadenbündel

Roland Netz



Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 2876

ISSN 0944-2952

Institut für Festkörperforschung Jülich-2876

D 38 (Diss. Universität Köln)

Zu beziehen durch : Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek

D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland

Telefon : 02461 / 61 - 61 02 · Telefax : 02461 / 61 - 61 03 · Telex : 833556-70 kfa d

Membranenstapel und Fadenbündel

Roland Netz

Summary

Membranes and strings are non-crossing manifolds, which can, under suitable conditions and if interacting via sufficiently attractive potentials, undergo adhesion transitions. At low temperatures or strong attraction, the manifolds are tightly bound together; at high temperatures or weak attraction, they are completely separated. At the adhesion transition, the separation between the manifolds diverges, which leads to critical phenomena characterized by critical exponents.

In this work, the adhesion behavior of stacks of more than two manifolds is studied. Corresponding experiments are performed on multimembrane systems. Functional renormalization predicts the adhesion behavior of membrane stacks and string bundles to be completely analogous, as indeed confirmed by the detailed results presented here. The considered interactions include short-ranged potentials, represented by square-wells, as well as long-ranged potentials. Experimentally, these potential forms correspond to the van der Waals attraction and to an external pressure.

For vanishing external pressure, the adhesion is caused by the short-ranged attraction alone and shows the following behavior: In the case of a stack consisting of identical manifolds, the manifolds unbind simultaneously at a temperature T_c^s which does not depend on the number of manifolds. The effective exponents do depend on this number over the numerically accessible length scales. In the case where the stack is bound to a flat substrate (where the potential between the substrate and the lowest manifold is identical to the potentials acting between the manifolds) the manifolds unbind separately at different temperatures. The topmost manifold of a semi-infinite stack on a flat substrate unbinds at the same temperature T_c^s as free stacks. The critical exponents characterizing these single-manifold adhesion transitions are universal and the same as the critical exponents for the adhesion of two manifolds.

An infinitesimally small pressure P suffices to bind the manifolds; the adhesion takes place at $P = 0$. The distance between manifolds is determined by the balance of the external pressure and the effective repulsion due to thermal undulations of the manifolds. The strength of this repulsion, which has been determined experimentally, depends only very weakly on the number of manifolds, as demonstrated for free and adsorbed stacks. An additional short-ranged attraction between the manifolds is irrelevant, if it is not sufficiently strong to bind the manifolds by itself. In the case where the attraction is of critical strength, the amplitude of the fluctuation-induced repulsion decreases by a factor of about 12.

For the potentials considered, the different length scales such as the distance between the manifolds, the parallel and the perpendicular correlation length, are related by universal amplitude ratios.

Zusammenfassung

Membranen und Fäden sind flexible Flächen, die sich nicht durchdringen und Adhäsionsübergänge aufweisen: bei tiefen Temperaturen oder stark attraktiven Wechselwirkungen sind die Flächen fest aneinander gebunden, bei hohen Temperaturen oder schwacher Attraktion sind die Flächen beliebig weit voneinander entfernt. Am Adhäsionsübergang divergiert der Abstand zwischen den Flächen, was zu kritischen Phänomenen führt, die durch kritische Exponenten charakterisiert sind.

In dieser Arbeit wird das Adhäsionsverhalten von Stapeln aus mehr als zwei Flächen untersucht, wie es experimentell zum Beispiel für Multimembransysteme beobachtbar ist. Aus der funktionalen Renormierung folgt, daß das Adhäsionsverhalten von Membranstapeln und planaren Fadenbündeln analog sein sollte, wie durch die hier vorgestellten detaillierten Ergebnisse bestätigt wird. Es werden sowohl kurzreichweitige Wechselwirkungspotentiale, repräsentiert durch Kastenpotentiale, als auch langreichweitige Wechselwirkungen behandelt. Experimentell entsprechen diese Potentiale der Van der Waals Attraktion und einem äußeren Druck.

Für verschwindenden äußeren Druck, hier wird die Adhäsion nur durch die kurzreichweitigen Kräfte zwischen den Flächen bewirkt, beobachtet man folgendes Verhalten: Im Falle von freien Stapeln aus identischen Flächen gibt es eine von der Anzahl der Flächen unabhängige Adhäsionstemperatur T_c^s , bei der alle Flächen gleichzeitig entbinden. Die effektiven Exponenten weisen auf den numerisch zugänglichen Längenskalen eine Abhängigkeit von der Anzahl der Flächen auf. Wenn der Stapel an ein flaches Substrat gebunden ist (wobei das Potential zwischen dem Substrat und der untersten Fläche gleich dem zwischen den Flächen wirkenden Potential ist) entbinden die Flächen einzeln bei verschiedenen Temperaturen; die oberste Fläche eines halibunendlichen Stapels entbindet bei der gleichen Temperatur T_c^s wie ein freier Stapel. Die kritischen Exponenten sind nun universell und entsprechen den Exponenten der Entbindung von zwei Flächen.

Ein infinitesimal kleiner Druck P bindet die Flächen aneinander; der Adhäsionsübergang findet bei $P = 0$ statt. Der Gleichgewichtsabstand ist bestimmt durch die Stärke des Druckes und die durch die Undulationen der Flächen hervorgerufene effektive Fluktuationsabstoßung. Die Stärke dieser Repulsion, welche experimentell bestimmt wurde, hängt nur unwesentlich von der Anzahl der Flächen ab, wie für freie und am Substrat gebundene Stapel gezeigt wird. Eine zusätzlich wirkende kurzreichweitige Anziehung zwischen den Flächen ist irrelevant, solange sie selber nicht bindend ist; für den Fall der kritischen Stärke dieser Anziehung ist die Fluktuationsabstoßung etwa um den Faktor 12 verkleinert.

Für die betrachteten Potentiale sind die verschiedenen Längenskalen (Abstand der Flächen voneinander, parallele und senkrechte Korrelationslänge) jeweils durch universelle Amplitudenverhältnisse miteinander verknüpft.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	3
2	Grundlagen	9
2.1	Benetzungsübergänge	10
2.2	Kontinuumsmodelle für Flächen	12
2.2.1	Elastischer Anteil	12
2.2.2	Effektiver Hamiltonian	13
2.2.3	Direkte Wechselwirkung	14
2.2.4	Rauhigkeit freier Flächen	15
2.2.5	Gebundene Flächen	16
2.3	Entbindungsregimes für zwei Fäden	18
2.4	Ausblick	21
3	Adhäsion für kurzreichweitige Potentiale	23
3.1	Effektiver Hamiltonian für drei Flächen	24
3.2	Analogie von Fäden und Membranen	26
3.3	Schrödinger Gleichung für drei Fäden	27
3.4	Transfer Matrix für drei Fäden	31
3.4.1	Das Necklace Modell	36
3.4.2	Der symmetrische Fall	38
3.4.3	Asymptotische Datenanalyse	47
3.4.4	Der unsymmetrische Fall	48
3.5	Wechselwirkung zwischen übernächsten Nachbarn	55
3.5.1	Wechselwirkung zweier Fäden durch eine harte Wand	57
3.5.2	Relevanz für Lipidmembranen	59
3.6	Vier Flächen	62
3.6.1	Monte Carlo Algorithmus für Membranen	63
3.6.2	Identische Flächen	64
3.6.3	Flächen an einem flachen Substrat	70
3.7	Diskussion	74

4	Adhäsion durch äußeren Druck	76
4.1	Zwei Fäden	77
4.2	Identische Membranen	79
4.3	Membranen an einem flachen Substrat	87
4.4	Peristaltische Fluktuationen von gequollenen Membranen	92
4.5	Gaußsche Membranen	94
4.6	Vergleich mit Experimenten	96
5	Zusammenspiel von Wechselwirkung und Druck	99
5.1	Zwei Fäden	99
5.1.1	Repulsive Wechselwirkung	101
5.1.2	Attraktive Wechselwirkung	101
5.2	Zwei Membranen	104
5.3	Korrelationsfunktionen	107
5.4	Universelle Amplitudenverhältnisse	110
6	Zusammenfassung, experimentelle Realisierungen und Ausblick	112
A	Schrödingergleichung	119
A.1	Herleitung	119
A.2	Kastenpotential	121
B	Orthogonaltransformation	122
C	RSOS Modell in einer Dimension	123
D	Störungsrechnung	125
D.1	Drei Fäden	125
D.2	Wechselwirkung zwischen übernächsten Nachbarn	126
	Literaturverzeichnis	128
	Danksagung	

Kapitel 1

Einführung

Membranen und Fäden sind niedrigdimensionale Objekte, die Veränderungen ihrer äußeren Gestalt relativ geringen Widerstand entgegensetzen; sie zeichnen sich durch ein hohes Maß an Flexibilität aus und können deshalb eine Vielzahl von thermisch angeregten Formen annehmen.

Die Motivation für die Beschäftigung mit Membranen kommt unter anderem aus der Zellbiologie, in der Membranen nicht nur die Zelle selbst und die Zellorganellen umschließen, sondern auch in fast allen Zellvorgängen eine aktive und bestimmende Rolle spielen.[103]

Abb. 1.1 zeigt einen Stapel von Membranenpaaren, wie er in dem sogenannten granulären endoplasmatischen Reticulum (ER) vorkommt. Diese Lamellenformation des ER findet man in vielen Zellarten; sie dient der Proteinsynthese, die sich lokal an den Ribosomen vollzieht, welche als dunkle Körner erkennbar sind. Die dicht gestapelten Membranenpaare, welche Cysternen genannt werden, liegen parallel zu den die Zellen begrenzenden Plasmamembranen, die durch drei Pfeile angedeutet sind. Die Abstände zwischen den Cysternen sind ziemlich konstant und betragen etwa 2000 – 3000 Å, wobei die Dicke der Membranen selber ungefähr bei 100 Å liegt.

Biologische Membranen bestehen primär aus einer dünnen, äußerst flexiblen Schicht von amphiphilen Lipidmolekülen; das Kopfende dieser Moleküle bevorzugt wässrige Umgebung, ist also hydrophil, das Ende mit den beiden Alkanketten dagegen meidet Wasser und bevorzugt ölige Umgebung, ist also hydrophob beziehungsweise lipophil. Diese widerstrebenden Tendenzen führen zur Ausbildung einer Doppelschichtstruktur, in der die wasserliebenden Köpfe nach außen zeigen und somit die wasserabstoßenden Enden im Inneren vor dem umgebenden Zellwasser abschirmen. Zusätzlich sind Proteine und andere Makromoleküle in diese fluide Doppelschicht eingelagert, und der Cortex des Cytoskeletts ist über spezielle Proteine mit der Doppelschicht verbunden. Diese komplexe molekulare Struktur macht ein systematisches Studium von biologischen Membranen schwierig. Man benutzt deshalb für Experimente bevorzugt Modellmembranen, die aus synthetischem oder

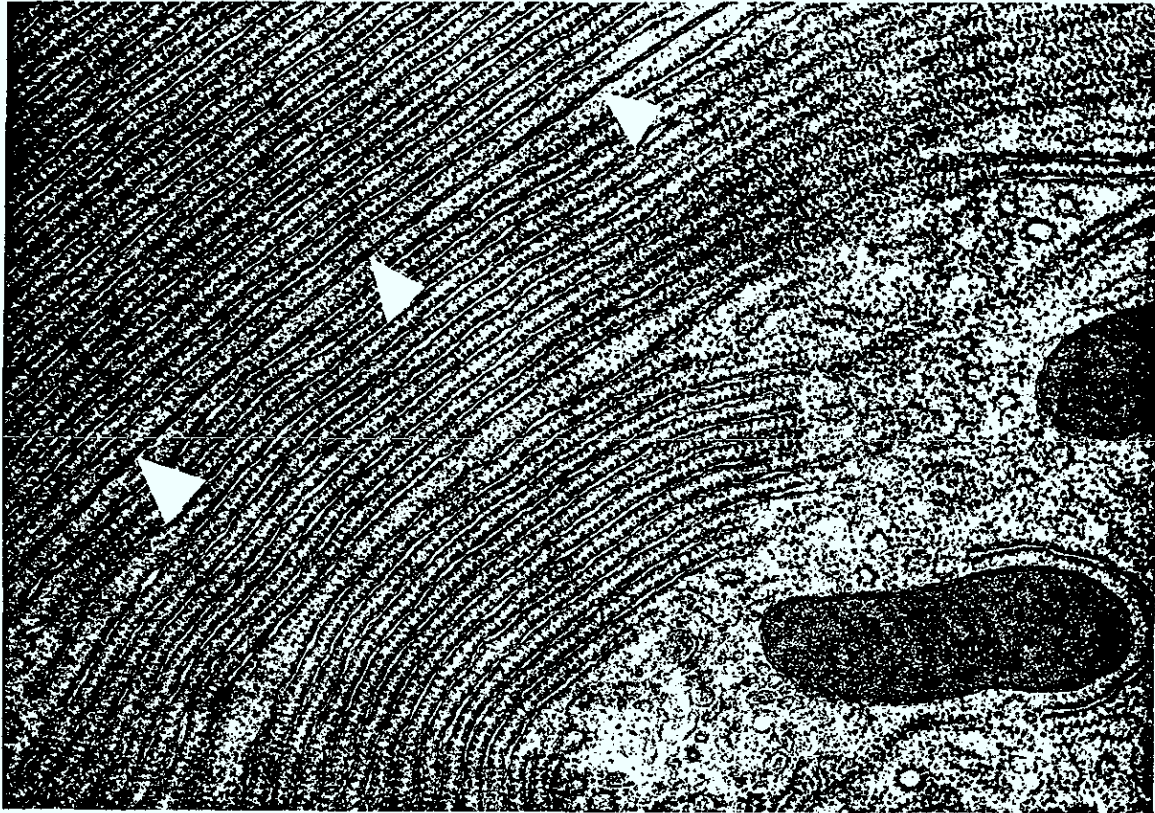


Abbildung 1.1: Elektronenmikroskopische Aufnahme des granulären oder rauhen endoplasmatischen Reticulums (ER) der Bauchspeicheldrüse einer Fledermaus in 23000facher Vergrößerung.[19] Zu sehen ist ein Querschnitt durch eine Anzahl von Membranenpaaren, den sogenannten Cysternen, die in den peripheren Bereichen der Zelle dicht gestapelt sind und parallel zur Zelloberfläche verlaufen. Die Cysternen sind außen dicht mit Ribosomen besetzt, die hier als dunkle Körner zu erkennen sind. Diese Art des ER kommt in vielen Zellarten vor und ist in Drüsenzellen, die ein proteinreiches Sekret produzieren, am stärksten entwickelt. Die Proteinsynthese vollzieht sich an den Ribosomen. Die Membranen des ER bilden ein zusammenhängendes intrazelluläres Kompartiment für die Abtrennung und den Transport des Syntheseproduktes. Die im oberen linken Quadranten erkennbaren Plasmamembranen benachbarter Zellen (siehe Pfeile) lassen sich von Membranenpaaren, die die Cysternen des Reticulums begrenzen, durch ihren geringeren Abstand voneinander und durch das Fehlen zugeordneter Ribosomen unterscheiden.

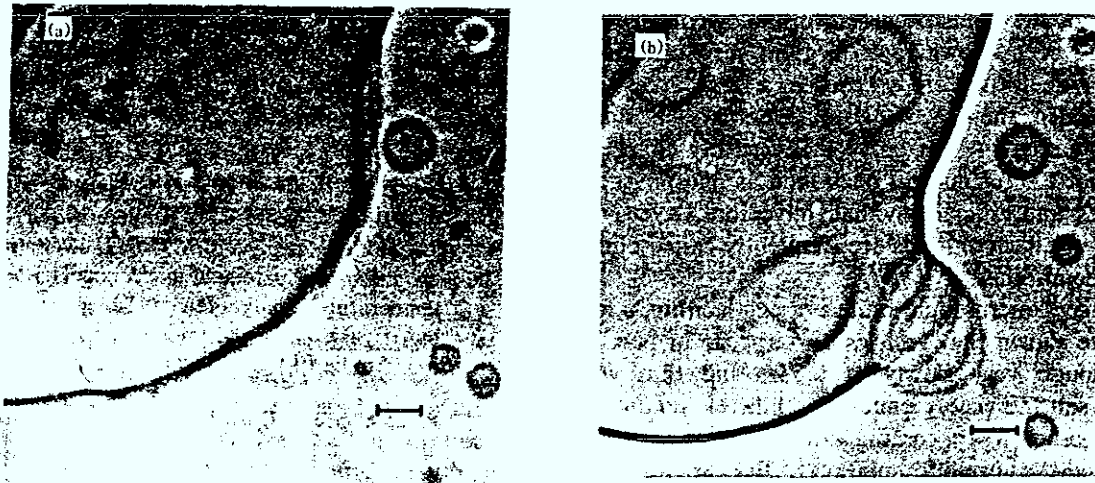


Abbildung 1.2: Phasenkontrastaufnahme eines Querschnitts durch einen Stapel aus acht künstlichen Membranen in einer 0.1M NaCl Lösung bei (a) $T = 22.8^{\circ}\text{C}$ und bei (b) $T = 22.1^{\circ}\text{C}$. Bei der hohen Temperatur sind die Membranen voneinander getrennt und zeigen thermisch angeregte Undulationen. Bei der tiefen Temperatur hängen sie lokal zusammen, wobei das zwischen den Membranen befindliche Wasser in fast sphärische Taschen gepreßt wird. Zwischen den beiden Temperaturen findet ein Adhäsions- oder Entbindungsübergang statt, der durch Temperaturänderung reversibel mehrfach durchfahren werden kann.[34]

aus extrahiertem biologischen Lipidmaterial künstlich im Labor hergestellt werden. Für Temperaturen oberhalb der sogenannten Hauptumwandlung können die Lipidmoleküle lateral frei in der Membran diffundieren, und die Doppelschicht hat einen verschwindenden Schermodul. Für Dimyristoylphosphatidylcholine (DMPC), ein für Experimente häufig benutztes Phospholipid, beträgt die Diffusionskonstante ungefähr $3 \times 10^{-8} \text{cm}^2/\text{s}$ bei einer Temperatur von 25°C , wobei die Hauptumwandlungstemperatur ungefähr bei 24°C liegt.[103]

Lipid-Membranen wurden in den letzten Jahren mit einer Vielzahl von experimentellen Methoden untersucht, siehe zum Beispiel [68, 59]. Die Form der Membranen läßt sich direkt im Lichtmikroskop beobachten. Abb. 1.2 zeigt Phasenkontrastaufnahmen eines Systems von acht Modellmembranen aus Digalactosyldiacylglycerol (DGDG) in einer verdünnten NaCl Lösung. Zur Herstellung von solchen Membranstrukturen wird eine kleine Menge des pulverisierten Lipids mit der Salzlösung beträufelt und bei Zimmertemperatur gequollen. Nach einer Weile bilden sich spontan multilamellare Strukturen wie in Abb. 1.2. In diesen Systemen beobachtet man die reversible *Entbindung* und *Adhäsion* von Membranenstapeln: bei tiefen Temperaturen sind die Membranen fest aneinander gebunden. In Abb. 1.2(b) zeichnen

sich die Membranen in scharfem Kontrast von dem umgebenden Wasser ab. Das ursprünglich zwischen den Membranen befindliche Wasser wird dabei in fast sphärische Taschen gepreßt, da das Wasser auf der Zeitskala des Experimentes nicht durch die Membranen entweichen kann. Bei hohen Temperaturen undulieren die Membranen einzeln, in Abb. 1.2(a) erscheint der Membranenstapel als Ganzes unscharf, wobei einzelne Membranen stellenweise erkennbar sind. Da die Membranen Teil eines großen Liposoms sind, wird eine größere Separation der Membranen durch die Geometrie verhindert.

Bei der Adhäsionstemperatur, die hier ungefähr bei 22.5°C liegt, gehen die Membranen von einem gebundenen in einen ungebundenen Zustand über. Der Grund für dieses Übergangsverhalten liegt in einem Wettstreit zwischen der attraktiven Van-der-Waals Wechselwirkung zwischen den Membranen, die einen gebundenen Zustand anstrebt, und der Tendenz, eine große Anzahl von verschiedenen Formen anzunehmen, oder, anders ausgedrückt, die Entropie zu erhöhen, welche ein Maß für die Anzahl der möglichen Formen ist. Wegen der Nichtdurchdringbarkeit der Membranen ist die Entropie im gebundenen Zustand stark vermindert, woraus eine effektive Abstoßung der Membranen resultiert. Fluktuationen der Form, sogenannte Undulationen, werden durch erhöhte Temperaturen begünstigt, da sie thermischen Anregungen der flachen Membran entsprechen. Prinzipiell gibt es auch andere Arten von thermisch angeregten Fluktuationen; die in dieser Arbeit behandelten Biegemoden jedoch dominieren für große Entfernungen zwischen den Membranen. In jedem Fall tritt der entbundene Zustand bei hohen Temperaturen auf, und der gebundene Zustand bei tiefen Temperaturen (vgl. Abb. 1.2). Im Prinzip kann ein Adhäsionsübergang auch durch eine Änderung der Stärke der attraktiven Wechselwirkung oder der Flexibilität der Membranen induziert werden.

Eine andere Art der Adhäsion von Membranstapeln wird beobachtet, wenn man die Membranen durch einen äußeren Druck bindet (und nicht durch eine gegenseitige Anziehung). Dies kann zum Beispiel dadurch erreicht werden, daß man das Wasser osmotisch oder mechanisch aus dem Stapel herauszieht. In diesem Fall reicht ein endlicher Druck aus, um die Membranen bei allen Temperaturen aneinander zu binden. Der Adhäsionsübergang findet hier bei verschwindendem Druck statt.

Der Adhäsionsübergang konstituiert ein typisches Beispiel eines Phasenüberganges, hervorgerufen durch konkurrierende entropische und energetische Effekte, wobei der Ordnungsparameter hier der Abstand zwischen benachbarten Membranen ist. Am Adhäsionsübergang divergiert der Ordnungsparameter, der Abstand steigt von einem endlichen auf einen unendlich hohen Wert (in einem beliebig großen experimentellen System).

Durch eine geeignete modellhafte Beschreibung von Membranen und deren Wechselwirkungen kann das Adhäsionsverhalten mit Methoden der statistischen Physik untersucht werden, wobei natürlich viele spezifische Details vernachlässigt werden. Dabei interessieren universelle Eigenschaften, die unabhängig von diesen Details

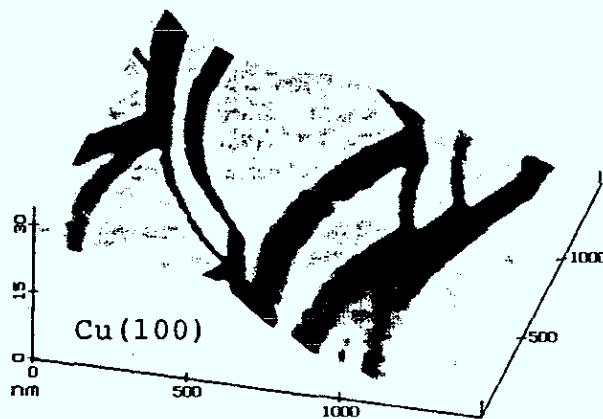


Abbildung 1.3: Monoatomare Stufen auf einer Kupferoberfläche, mit einem Rastertunnelmikroskop sichtbar gemacht. Die Stufen entsprechen, von oben gesehen, eindimensionalen Fäden, die sich nicht durchdringen können und auf eine Ebene eingeschränkt sind. Deutlich erkennbar ist die unregelmäßige Bildung von multiplen Stufen, die einem lokal gebundenen Zustand der Fäden entsprechen.[94]

sind, wie zum Beispiel die den Adhäsionsübergang charakterisierenden kritischen Exponenten. Aber auch nichtuniverselle Eigenschaften, wie zum Beispiel Vorhersagen für den Wert der Adhäsionstemperatur, sind von Bedeutung.

Für den Fall von zwei wechselwirkenden Membranen wurden bereits umfangreiche theoretische Untersuchungen durchgeführt.[57, 52] Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, das Adhäsionsverhalten von Membranenstapeln, also von Systemen aus mehr als zwei Membranen, theoretisch aufzuklären. Dabei werden sowohl Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Membranen, äußerer Druck, als auch das Zusammenspiel von Wechselwirkungen und äußerem Druck betrachtet. Die Beschäftigung mit Membranenstapeln ist experimentell motiviert; tatsächlich werden fast alle Membranenexperimente an Multischichten (und nicht an zwei Membranen) durchgeführt, und die meisten der in dieser Arbeit beschriebenen Resultate sollten experimentell an diesen Systemen nachprüfbar sein.

Auf direktem Wege werden Membranenstapel in dieser Arbeit in erster Linie mit numerischen Simulationsmethoden untersucht. Auf indirekte Weise wird die aus der Funktionalrenormierung gefolgerte Analogie von Membranenstapeln und planaren Fadenbündeln benutzt. Für Fadenbündel nämlich ist der Einsatz von sehr effizienten Transfer-Matrix Methoden möglich, die die Simulationsergebnisse für Membranen in allen Aspekten bestätigen und ergänzen.

Aber abgesehen von der Analogie zu Membranenstapeln stellen planare Bündel aus eindimensionalen Fäden auch für sich eine wichtige Klasse von Systemen dar und bieten interessante Beispiele für Phasenübergänge in zweidimensionalen Systeme-

men.[22] Sie beschreiben zum Beispiel adsorbierte gerichtete Polymere, Stufen auf Kristalloberflächen und Vortexlinien in geschichteten Typ-II-Supraleitern.[73] Fadenbündel in $d = 1 + 2$ Dimensionen dagegen beschreiben gerichtete Polymere[83] und Vortexlinien in drei-dimensionalen Typ-II-Supraleitern, und werden in der vorliegenden Arbeit nicht betrachtet. Abb. 1.3 zeigt eine Rastertunnelmikroskopaufnahme einer Kupfer (100) Oberfläche. Deutlich sind die flachen Terrassen zu erkennen, die durch teilweise vereinigte monoatomare Stufen voneinander getrennt sind. Die Stufen können sich nicht durchdringen, da Überhänge energetisch extrem ungünstig sind. Es ist aber durchaus möglich, daß sich diese Stufen anziehen;[87] dann sollten Entbindungsübergänge auch in diesen Systemen experimentell beobachtbar sein.

Im weiteren bezeichnen wir Membranen und Fäden zusammenfassend als "Flächen". Ergebnisse für beide Klassen von Systemen werden zusammenhängend präsentiert; sie bestätigen und ergänzen einander. Von experimenteller Relevanz sind aber vor allem die Vorhersagen für multilamellare Membranensysteme. In Kapitel 2 stellen wir die für das Folgende wichtigen Grundlagen der Physik von Zufallsflächen zusammen. In Kapitel 3 behandeln wir Stapel von Flächen, zwischen denen Potentiale kurzer Reichweite wirken; wie in Abschnitt 2.3 gezeigt wird, entspricht dies Membranenstapeln, die nur unter der Wirkung von Van-der-Waals Kräften stehen. In Kapitel 4 untersuchen wir den Effekt von äußerem Druck auf einen Stapel von Flächen; das experimentelle Pendant ist ein Membranenstapel, der mechanisch oder osmotisch gepreßt wird, oder bei dem die Konzentration von Lipid und Wasser festgelegt ist. In Kapitel 5 behandeln wir den wechselseitigen Einfluß von kurzreichweitigen Potentialen und äußerem Druck für den Fall von zwei Flächen. Kapitel 6 enthält neben der Zusammenfassung und einem Ausblick die detaillierte Beschreibung von möglichen experimentellen Realisierungen der verschiedenen, in dieser Arbeit besprochenen kooperativen Phänomene.

Kapitel 2

Grundlagen

Der Adhäsionsübergang von Flächen ist ein Beispiel für einen thermodynamischen Phasenübergang, definiert durch nicht-analytisches Verhalten der freien Energie. Im allgemeinen ist damit eine singuläre Änderung eines die geordnete Phase charakterisierenden Ordnungsparameters verbunden; für Adhäsionsübergänge ist dies der mittlere Abstand zwischen den Flächen, der von einem endlichen Wert in der gebundenen Phase auf einen unendlichen Wert am Übergang ansteigt. Der Abstand kann dabei ein kontinuierliches oder ein diskontinuierliches Verhalten zeigen.

Die Theorie der kritischen Phänomene zeigt, daß das Verhalten an einem kontinuierlichen Phasenübergang, charakterisiert durch die Exponenten mit denen die verschiedenen thermodynamischen Größen divergieren, weitestgehend unabhängig von den mikroskopischen Details des betrachteten Systems ist; scheinbar disparate Systeme weisen identisches kritisches Verhalten auf und werden in sogenannten Universalitätsklassen zusammengefaßt.[80]

Für eine thermodynamische Beschreibung eines Systems muß man zuerst die relevanten lokalen Freiheitsgrade $\{u\}$ identifizieren, und dann die Konfigurations-Energie durch einen effektiven 'Hamiltonian' $\mathcal{H}(\{u\})$ in Abhängigkeit dieser Freiheitsgrade ausdrücken. Die gesamte Thermodynamik des Systems wird beschrieben durch die Zustandssumme,

$$Z = \int \mathcal{D}\{u\} e^{-\mathcal{H}(\{u\})/T}, \quad (2.1)$$

wobei das Integral ein Funktionalintegral über alle möglichen kombinierten Zustände der lokalen Freiheitsgrade ist. Aus der über $f = -T \log Z$ definierten freien Energie können dann alle interessierenden Größen berechnet werden.

Die Behandlung von Adhäsionsübergängen von Membranen mit Methoden der statistischen Physik stellt also ein dreistufiges Problem dar: (a) eine geeignete Parametrisierung der Membranenkonfigurationen muß gefunden werden, (b) die Konfigurations-Energie $\mathcal{H}$ muß formuliert werden, und (c) die Summation über alle

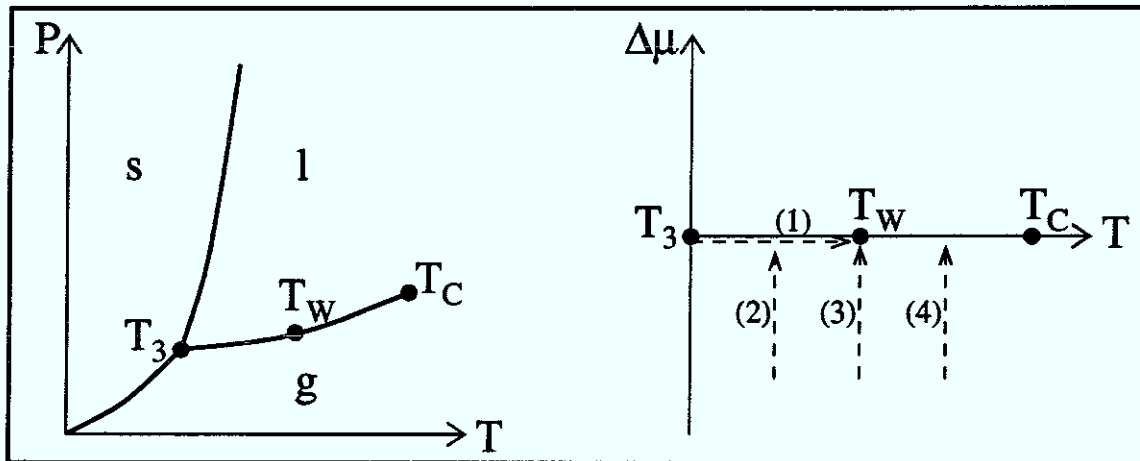


Abbildung 2.1: Allgemeines Phasendiagramm für ein Ein-Komponenten-System in Abhängigkeit von Druck und Temperatur (zur Linken). Die feste (s), flüssige (l) und gasförmige Phase (g) koexistieren am Tripelpunkt (T_3). Die Koexistenzlinie zwischen der flüssigen und der gasförmigen Phase endet am kritischen Punkt (T_C) und weist einen Benetzungsübergang (T_W) auf, an dem ein flüssiger Film an einem geeigneten Substrat gerade makroskopische Dicke erreicht. Im rechten Diagramm mißt das chemische Potential $\Delta\mu$ den Abstand von der flüssig/gasförmigen Koexistenzlinie, dann geben die verschiedenen Pfade die möglichen Benetzungsszenarien im Falle kurzreichweitiger Anziehung der flüssigen Phase durch das Substrat an: (1) kritische Benetzung, (2) unvollständige Benetzung, (3) und (4) vollständige Benetzung.

möglichen Zustände muß durchgeführt werden, was für Membranen natürlich ein enormes mathematisches Problem darstellt.[74]

2.1 Benetzungsübergänge

Historisch wurden viele der in dieser Arbeit benutzten Konzepte und Methoden im Zusammenhang mit Benetzungsübergängen entwickelt. Deshalb ist es angebracht, die Grundlagen der Benetzungstheorie hier vorzustellen.

Man betrachte das allgemeine Phasendiagramm für ein Einkomponenten-System in Abb. 2.1, (links). Entlang der flüssig/gasförmigen Koexistenzlinie verhält sich die freie Energie der flüssig/gasförmigen Grenzfläche wie

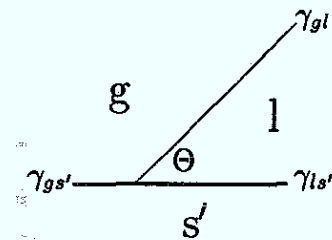
$$\gamma_{gl} \sim t^\mu, \quad (2.2)$$

wobei $t \equiv |(T - T_c)/T_c|$ und $\mu = (d - 1)\nu$. [42] Der Exponent der Korrelationslänge, ν , ist gegeben durch $\nu \simeq 0.63$ in drei Dimensionen ($d = 3$). Nun betrachtet man den

Einfluß eines festen inerten Substrates, s' , das die flüssige Phase vor der gasförmigen Phase bevorzugt und kurzreichweitig anzieht. Einem Argument Cahns folgend,[8] sollte die Differenz der freien Energien der Grenzfläche zwischen der Gasphase und dem Substrat, $\gamma_{gs'}$, und der Grenzfläche zwischen der Flüssigkeit und dem Substrat, $\gamma_{ls'}$, gegeben sein durch die Flüssigkeitsdichte am Substrat,

$$\gamma_{gs'} - \gamma_{ls'} \sim t^{\beta_1}, \quad (2.3)$$

wobei β_1 der Oberflächenexponent des Ordnungsparameters ist.[79]



Die Youngsche Formel setzt den Kontaktwinkel Θ zwischen der flüssig/festen und der flüssig/gasförmigen Grenzfläche an einer Kontaktlinie aller drei Grenzflächen im Kräftegleichgewicht mit den freien Energien in Beziehung:

$$\gamma_{gl} \cos(\Theta) + \gamma_{ls'} = \gamma_{gs'} \quad (2.4)$$

Wir können damit formal die Gleichung für den Kontaktwinkel herleiten,

$$\cos(\Theta) \sim t^{\beta_1 - \mu}. \quad (2.5)$$

Für $t \rightarrow 0$ geht dieser Ausdruck gegen unendlich, da $\beta_1 - \mu \simeq -0.5$ in drei Dimensionen. Für nicht verschwindenden Kontaktwinkel, also $\cos(\Theta) < 1$, sind einzelne Tröpfchen von flüssigem Material an das Substrat gebunden, und man spricht von unvollständiger Benetzung. Bei einem Benetzungsübergang geht der Kontaktwinkel gegen Null, also $\cos(\Theta) \rightarrow 1$, und die Dicke des Flüssigkeitsfilms wird makroskopisch. Der Ausdruck (2.5) deutet darauf hin, daß dies bei einer reduzierten Temperatur $t > 0$ geschieht, also $T_W \neq T_C$. Dies ist das auf Cahn zurückgehende, erste theoretische Argument für die Existenz eines Benetzungsüberganges, der einem Entbindungsübergang einer zweidimensionalen Grenzfläche von einem festen Substrat entspricht.

Im rechten Teil von Abb. 2.1 zeigen wir den Teil des Phasendiagramms mit der flüssig/gasförmigen Koexistenzlinie im großkanonischen Ensemble, wo das chemische Potential die Rolle des Druckes spielt. Die Variable $\Delta\mu$ mißt dabei den Abstand von der Koexistenzlinie. Die Energie eines Flüssigkeitsfilms der Dicke l ist proportional zu $\Delta\mu l$. Die kurzreichweitige Anziehung des Flüssigkeitsfilms durch das Substrat führt für schwach negatives $\Delta\mu$ und $T < T_W$ zu einer unvollständig benetzten Situation, Pfad (2). Für $T > T_W$ und verschwindendes $\Delta\mu$ wächst der Film makroskopisch an und man erhält vollständige Benetzung des Substrates, Pfad (3) und Pfad (4). Pfad (1) beschreibt die kritische Benetzung.

Die gesamte Physik steckt in dem Verhalten der flüssig/gasförmigen Grenzfläche; daher reicht es aus, diese Grenzfläche geeignet zu parametrisieren und einen effektiven Hamiltonian zu konstruieren, der nur von der Form dieser Fläche abhängt. Die Hauptschwierigkeit liegt darin, die bestehenden Wechselwirkungen zwischen den Volumenphasen auf eine Wechselwirkung zu reduzieren, die nur noch eine Funktion der

Grenzflächenform ist. Der erhaltene Energieausdruck läßt sich dann aber nicht nur auf Grenzflächen anwenden, sondern auch auf Membranen oder auf Flächen generell.

2.2 Kontinuumsmodelle für Flächen

Um das Problem von Flächen mit den Methoden der statistischen Mechanik behandeln zu können, muß das System zuerst geeignet definiert und parametrisiert werden. Wie in der Einführung beschrieben, sind wir an den Fällen interessiert, wo die Dimension der Fläche, $d_{||}$, (dies kann eine Membran oder ein Faden sein) um eins gegenüber der Dimension des einbettenden Raumes, d , vermindert ist, also $d_{||} + 1 = d$. Wenn man nun die möglichen Formen der Flächen einschränkt, insbesondere Überhänge und Blasen ausschließt, also im Mittel eine Orientierung der Fläche voraussetzt, kann die Form durch den lokalen Abstand l von einer $d_{||}$ -dimensionalen Referenzfläche beschrieben werden. Dabei ist die Fläche durch die $d_{||}$ -dimensionalen Koordinaten $\{\mathbf{x}\}$ parametrisiert und $l = l(\mathbf{x})$ ist eine eindeutige Funktion. Der Hamiltonian ist dann also als ein Funktional von $l(\mathbf{x})$ anzusetzen.

2.2.1 Elastischer Anteil

Die lokale elastische Energie einer Fläche im Falle von Grenzflächen zwischen zwei verschiedenen Phasen oder gerichteten Polymeren und Flußfäden ist gegeben durch das Produkt aus der Oberflächenspannung $\Sigma(\theta)$, die von der Orientierung θ der Grenzfläche abhängen kann, und dem lokalen Flächenelement $\sqrt{1 + (\nabla l)^2}$. Der Ausdruck für die Oberflächenspannung läßt sich um das lokale Minimum bei $\theta = 0$ entwickeln und man erhält für kleine Winkel die integrierte Oberflächenenergie

$$\begin{aligned} & \int d^{d_{||}}x \sqrt{1 + (\nabla l)^2} \left(\Sigma(0) + \frac{1}{2} \frac{d^2 \Sigma}{d\theta^2} \Big|_{\theta=0} (\nabla l)^2 + \dots \right) \\ & \simeq \text{const} + \int d^{d_{||}}x \frac{\tilde{\Sigma}}{2} (\nabla l)^2, \end{aligned} \quad (2.6)$$

wobei die Steifigkeit der Grenzfläche definiert ist als

$$\tilde{\Sigma} = \Sigma(0) + \frac{d^2 \Sigma}{d\theta^2} \Big|_{\theta=0}. \quad (2.7)$$

Bei der Beschränkung auf die erste Ordnung in $(\nabla l)^2$ benutzt man die bereits gemachte Einschränkung auf kleine Winkel, ohne die die Vernachlässigung von Überhängen nicht sinnvoll ist. Tatsächlich lassen sich diese Näherungen bei Grenzflächen durch Skalenbetrachtungen rechtfertigen, siehe Abschnitt 2.2.4.

Membranen bestehen aus einer Doppelschicht von Lipidmolekülen, die, anders als bei Grenzflächen, nicht notwendigerweise zwei verschiedene Volumenphasen trennt.

Die Oberflächenspannung wird hier bestimmt durch die laterale Wechselwirkung der Lipidmoleküle miteinander und hängt empfindlich von der zur Verfügung stehenden Oberfläche pro Lipidmolekül ab. Tatsächlich stellt sich in Membranen die für ein Lipidmolekül zur Verfügung stehende Oberfläche auf den optimalen Wert ein, und Formfluktuationen werden vor allem durch die Biegesteifigkeit κ kontrolliert. Dabei stellt man sich vor, daß die für die Formfluktuationen erforderliche Exzeßfläche aus einem Reservoir bezogen wird, ohne Arbeit gegen die Oberflächenspannung zu leisten.[16, 27] Die elastische Energie hängt dann quadratisch von der mittleren Krümmung $(1/R_1 + 1/R_2)$ ab, wobei R_1 und R_2 die beiden Hauptkrümmungsradien sind. Die lokale Krümmungsenergie ist gegeben durch $\kappa(1/R_1 + 1/R_2)^2 \simeq \kappa(\nabla^2 l(\mathbf{x}))^2$, wobei die gleiche Parametrisierung wie im Falle der Grenzflächen gewählt wird.[33] Die Gaußsche Krümmung kann bei den hier betrachteten Phänomenen außer Acht gelassen werden, da sie eine topologische Konstante ist und sich bei Adhäsionsvorgängen nicht ändert.

2.2.2 Effektiver Hamiltonian

Der allgemeine Fall zweier miteinander wechselwirkender Flächen wird durch den folgenden Hamiltonian beschrieben:

$$\mathcal{H}\{l_1, l_2\} = \int d^d x \left\{ \frac{K_1}{2} (\nabla^s l_1)^2 + \frac{K_2}{2} (\nabla^s l_2)^2 + V(l_1 - l_2) \right\}, \quad (2.8)$$

wobei der elastische Anteil für $s = 1$ einer Oberflächenspannung und für $s = 2$ der Biegesteifigkeit entspricht. Die elastischen Konstanten werden durchweg mit K_i bezeichnet. Der Wechselwirkungsterm wirkt hier lokal zwischen den beiden $d_{\parallel}$ -dimensionalen Flächen und entspricht somit dem auf die projizierte Fläche bezogenen Wechselwirkungspotential zweier ebener Flächen.

Durch die Transformation der Variablen auf Abstandsvariable, $l \equiv l_1 - l_2$, und Schwerpunktvariable, $\bar{l} \equiv K_1 l_1 + K_2 l_2$, erhält man den Hamiltonian für die Abstandsvariable

$$\mathcal{H}\{l\} = \int d^d x \left\{ \frac{K'}{2} (\nabla^s l)^2 + V(l) \right\}, \quad (2.9)$$

mit

$$K' = \frac{K_1 K_2}{K_1 + K_2}, \quad (2.10)$$

wobei die Schwerpunktkoordinate $\bar{l}$ frei diffundiert und nicht betrachtet zu werden braucht; die elastische Konstante dieser Koordinate ist gegeben durch $\bar{K} = 1/(K_1 + K_2)$. Zwei fluktuierende und miteinander wechselwirkende Flächen, die sich nicht durchdringen können, entsprechen also einer Fläche an einer harten Wand mit einer elastischen Konstante gegeben durch (2.10). Insbesondere gilt für den Fall von zwei identischen Flächen, $K \equiv K_1 = K_2$, daß $K' = K/2$ ist; die elastische Konstante der Abstandsvariable ist genau halb so groß wie die der Flächen selber.

2.2.3 Direkte Wechselwirkung

Die direkte Wechselwirkung $V(l)$ kann in attraktive und repulsive Anteile separiert werden,

$$V(l) = V_R(l) + V_A(l). \quad (2.11)$$

Der repulsive Anteil wird in erster Linie durch die Nichtdurchdringbarkeit der Flächen (im Falle von Membranen oder Stufen auf Kristalloberflächen) erzeugt, und entspricht einer harten Wand bei $l = 0$, also $V(l) = \infty$ für $l < 0$.

Fällt die Bedingung der Nichtdurchdringbarkeit weg, beschreibt man das Phänomen der Delokalisierung oder Aufräuhung; dort ist das Potential $V(l)$ im allgemeinen symmetrisch. Anwendungsbeispiele umfassen Grenzflächen zwischen zwei Volumenphasen im Gravitationsfeld oder in Anwesenheit eines planaren oder linearen Defekts. Diese Klasse von Systemen wird in dieser Arbeit nicht betrachtet.

Für Membranen kommt noch die exponentiell abfallende, extrem kurzreichweitige und abstoßende Hydrationswechselwirkung hinzu,

$$V_H(l) = B_H e^{-l/\lambda_H}, \quad (2.12)$$

die zuerst einem Entropieverlust des die Lipidköpfe umgebenden Wassers zugeordnet wurde und auf einer Längenskala von $\lambda_H \simeq 3 \text{ \AA}$ zerfällt; diese Länge entspricht ungefähr dem Durchmesser eines Wassermoleküls. Erst kürzlich wurde gezeigt, daß eine ganz ähnliche Wechselwirkung auch aus der sterischen Wechselwirkung von einzelnen Lipidmolekülen, die leicht aus der Membran herausragen, folgen kann.[39, 55] Eine weitere exponentielle Abstoßung folgt aus der abgeschirmten elektrostatischen Wechselwirkung geladener Membranen in der Gegenwart von freien Ionen, wobei ein zu (2.12) analoges Gesetz gilt. Die Zerfallskonstante ist dann die sogenannte Debyelänge, welche umgekehrt proportional zu der Wurzel der Ionenkonzentration ist. Eine Einführung in die Theorie der Wechselwirkung zwischen Flächen wird in [38] gegeben.

Attraktion wird bei Membranen durch die Van-der-Waals Wechselwirkung erzeugt,

$$V_{dW}(l) = -\frac{W}{12\pi} \left(\frac{1}{l^2} - \frac{2}{(l+\delta)^2} + \frac{1}{(l+2\delta)^2} \right), \quad (2.13)$$

die durch den Unterschied in der Polarisierbarkeit der Membranen und des umgebenden wässrigen Mediums hervorgerufen wird.[62] Die Hamakerkonstante W hat einen Wert von $W \simeq 10^{-22} - 10^{-21} \text{ J}$ für Lipidmembranen;[63] der Parameter δ bezeichnet die Dicke der Membranen und liegt in der Größenordnung von $\delta \simeq 40 \text{ \AA}$. Die resultierende Anziehung zwischen Lipidmembranen ist im allgemeinen stark genug, um stabile gebundene Zustände mit Abständen in der Größenordnung von $20 - 60 \text{ \AA}$ zu erzeugen.[61] Für $l \gg \delta$ erhält man

$$V_{dW}(l) \simeq -\frac{W\delta^2}{2\pi l^4}. \quad (2.14)$$

Retardierungseffekte treten erst bei $l \approx 500 \text{ \AA}$ auf und führen dann zu $V_{VdW}(l) \sim 1/l^5$.

Für Stufen auf Kristall-Oberflächen gibt es verschiedene Mechanismen, die eine attraktive Wechselwirkung zwischen Stufen erzeugen.[25, 87] Dipolmomente an den Stufen können zu einem attraktiven Potential proportional zu $1/l^2$ führen, Abschirmungseffekte der Leitungselektronen führen zu einem attraktiven Potential mit $1/l^{9/2}$; beide Effekte werden für Metalloberflächen vorhergesagt. Man sollte also erwarten, daß auch bei Stufen auf Oberflächen bei tiefen Temperaturen gebundene Zustände vorliegen, die dann bei höheren Temperaturen entbinden könnten.

2.2.4 Rauigkeit freier Flächen

Eine freie Fläche der linearen horizontalen Ausdehnung $L_{\parallel}$ hat eine typische vertikale Rauigkeit $L_{\perp}$. Wir beziehen uns hier auf den konkreten Fall einer durch den Hamiltonian (2.9) beschriebenen Fläche, wobei das Potential für eine freie Fläche gegeben ist durch $V(l) = 0$. Zwischen diesen beiden Längenskalen besteht die Skalenrelation

$$L_{\perp} \sim L_{\parallel}^{\zeta}, \quad (2.15)$$

wobei der Rauigkeitsexponent ζ von der Dimension $d_{\parallel}$ der Fläche und dem elastischen Term abhängt.[51, 24] Aus der Skalenrelation folgt, daß eine typische Konfiguration unter der Skalentransformation

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}/b \quad l \rightarrow l/b^{\zeta} \quad (2.16)$$

auf eine andere für das System typische Konfiguration abgebildet wird; die Fläche ist selbstähnlich unter der in (2.16) definierten Transformation. Der elastische Anteil des Hamiltonians (2.9) transformiert sich wie folgt,

$$\frac{K}{2} \int dx^{d_{\parallel}} \left(\frac{d^s l}{dx^s} \right)^2 \rightarrow \frac{K}{2} \int d(x/b)^{d_{\parallel}} \left(\frac{d^s l/b^{\zeta}}{d(\mathbf{x}/b)^s} \right)^2. \quad (2.17)$$

Der Exponent ζ kann bestimmt werden, indem man fordert, daß der Hamiltonian invariant unter dieser Skalentransformation sei. Das bedeutet, daß $b^{2s-2\zeta-d_{\parallel}} = 1$ ist, und damit gilt die allgemeine Beziehung

$$\boxed{\zeta = s - d_{\parallel}/2.} \quad (2.18)$$

Diese Formel kann auch direkt ohne Zuhilfenahme von Skalenargumenten aus dem Hamiltonian (2.9) hergeleitet werden. Für Fäden mit $d_{\parallel} = 1$ und $s = 1$ erhält man $\zeta = 1/2$. Dies bedeutet anschaulich, daß ein Faden nach Verdoppelung seiner Länge nur um den Faktor $\sqrt{2}$ an Rauigkeit zunimmt. Auf sehr großen Skalen erscheint

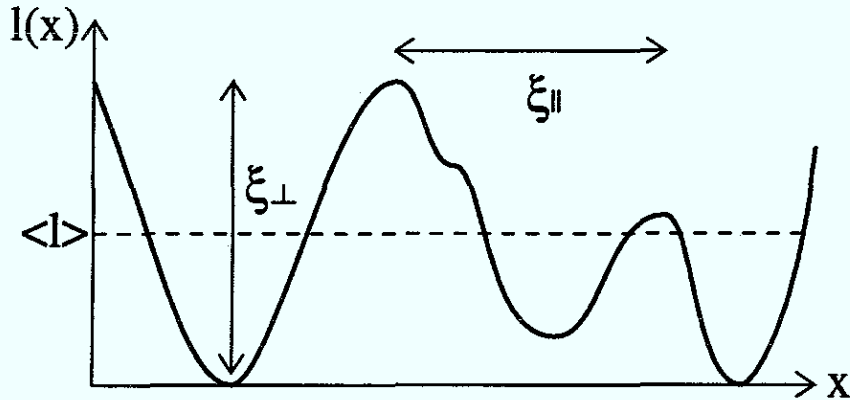


Abbildung 2.2: Schnitt durch eine Fläche, die durch ein attraktives Potential im mittleren Abstand $\langle l \rangle$ an eine Wand gebunden ist. Die Fläche besitzt dann eine endliche parallele Korrelationslänge $\xi_{\parallel}$ und eine endliche senkrechte Korrelationslänge $\xi_{\perp}$.

ein Faden deshalb flach, was konsistent mit den gemachten Näherungen bei der Aufstellung von (2.6) ist. Für Membranen mit $d_{\parallel} = 2$ und $s = 2$ erhält man $\zeta = 1$, was bedeutet, daß eine Membran auf sehr großen Skalen eine beliebige Rauigkeit annimmt. Dies ist mit dem Konzept einer orientierten Fläche nicht verträglich. Tatsächlich kann man aber zeigen, daß Membranen für lineare Dimensionen kleiner als die Persistenzlänge ξ_p orientiert sind, wobei $\xi_p = a \exp(2\pi K/T)$ ist und a eine mikroskopische Länge darstellt, die durch die Molekülgröße bestimmt wird.[26]¹ Für reale Membranen mit $K \simeq 20T$ bedeutet dies, daß sie sich auf experimentell relevanten Längenskalen wie orientierte Flächen verhalten; die Näherungen die im Fall von Membranen zu (2.9) führten sind also für nicht zu große Längenskalen sinnvoll.

2.2.5 Gebundene Flächen

In einem äußeren Potential $V(l)$ mit einer harten Wand bei $l = 0$ und einem attraktiven Teil, welcher stark genug ist, ist die Fläche gebunden; dies bedeutet daß der mittlere Abstand von der harten Wand, $\langle l \rangle$, endlich ist, siehe Abb. 2.2.[54] Damit wird eine Längenskala in das Problem eingeführt, und die Skalenrelation (2.15) gilt nur bis zu einer oberen Grenze, die durch die Korrelationslängen gegeben ist:

$$L_{\parallel} \lesssim \xi_{\parallel} \quad L_{\perp} \lesssim \xi_{\perp}. \quad (2.19)$$

¹Die Temperatur wird durchgehend in Einheiten der Boltzmannkonstanten k_B gemessen.

Für die beiden Korrelationslängen selber gilt die Skalenrelation natürlich weiterhin, also

$$\xi_{\perp} \simeq (T/K)^{1/2} \xi_{\parallel}^{\zeta}; \quad (2.20)$$

der Faktor $(T/K)^{1/2}$ folgt aus Dimensionsgründen.

Die beiden Korrelationslängen werden am einfachsten mit Hilfe der Korrelationsfunktion $C(\mathbf{x})$ definiert:

$$C(\mathbf{x}) = \langle [l(\mathbf{x}) - \langle l \rangle][l(\mathbf{0}) - \langle l \rangle] \rangle, \quad (2.21)$$

welche im Falle von Fäden für $d_{\parallel} = 1$ und großes x geht wie

$$C(x) \sim \exp(-x/\xi_{\parallel}). \quad (2.22)$$

Für Membranen mit $d_{\parallel} = 2$ gilt ein ähnlicher Zusammenhang, siehe Abschnitt 5.3. Die Rauigkeit oder senkrechte Korrelationslänge ist gegeben durch

$$\xi_{\perp} \equiv \sqrt{C(0)} = [(\langle l^2 \rangle - \langle l \rangle^2)]^{1/2}. \quad (2.23)$$

Die Fläche ist also in der vertikalen Richtung im Mittel beschränkt auf

$$\langle l \rangle - \xi_{\perp} \lesssim l \lesssim \langle l \rangle + \xi_{\perp}. \quad (2.24)$$

In einer projizierten Fläche von $\xi_{\parallel}^{d_{\parallel}}$ erreicht die Fläche im Durchschnitt einmal diese Grenzen und erleidet dabei einen Entropieverlust von 1 (in Einheiten von k_B) gegenüber der freien Fläche.[51] Der entropische Beitrag zur freien Energie pro projizierter Fläche ist damit gegeben durch

$$V_{Ent} = -T\Delta s \simeq T\xi_{\parallel}^{-d_{\parallel}}. \quad (2.25)$$

Der elastische Anteil an der freien Energie kann durch Einsetzen der Skalenrelation (2.20) in den elastischen Teil des Hamiltonians (2.9) abgeschätzt werden und ergibt sich zu

$$V_{Ela} \approx -K \left(\frac{\xi_{\perp}}{\xi_{\parallel}^s} \right)^2 \simeq -T\xi_{\parallel}^{2\zeta-2s} = -T\xi_{\parallel}^{-d_{\parallel}}. \quad (2.26)$$

Die beiden durch die Fluktuationen hervorgerufenen Anteile zur freien Energie haben also die gleiche Form, aber entgegengesetztes Vorzeichen. Der abstoßende entropische Effekt überwiegt aber, so daß der Fluktuationsbeitrag zur freien Energie positiv ist und lautet:

$$V_{Fl}(l) = V_{Ent} + V_{Ela} \sim T\xi_{\parallel}^{-d_{\parallel}} \simeq T(T/K)^{\tau/2} \xi_{\perp}^{-\tau} \simeq c_{Fl} T(T/K)^{\tau/2} l^{-\tau}, \quad (2.27)$$

mit

$$\tau \equiv d_{\parallel}/\zeta. \quad (2.28)$$

In dem letzten Schritt haben wir $l \simeq \xi_{\perp}$ gesetzt; tatsächlich gilt dies für eine sehr umfassende Klasse von direkten Wechselwirkungen, wie im nächsten Abschnitt erläutert wird (siehe auch Abschnitt A.2).

Die asymptotische Form dieses durch Fluktuationen erzeugten Beitrages zur freien Energie dient im nächsten Abschnitt zur Klassifizierung der direkten Wechselwirkungspotentiale. Interessanterweise gilt $\tau = 2$ sowohl für Membranen als auch für Fäden, was als anschauliche Erklärung für das analoge Verhalten dieser beiden Systeme dienen kann. Die Amplitude dieses Fluktuationsbeitrages, c_{Fl} , wird in Kapitel 4 und 5 für verschiedene Wechselwirkungspotentiale bestimmt.

2.3 Entbindungsregimes für zwei Fäden

Eine Klassifizierung der direkten Wechselwirkungen ist möglich mit Hilfe der in dem letzten Abschnitt heuristisch hergeleiteten fluktuationsinduzierten Wechselwirkung $V_{Fl}(l)$. Dazu betrachtet man die aus einem attraktiven und repulsiven Anteil bestehende allgemeine direkte Wechselwirkung

$$V(l) = -U/l^{\rho} + W/l^{\sigma}. \quad (2.29)$$

Durch Vergleich des repulsiven Anteils $V_R = Wl^{-\sigma}$ und des attraktiven Anteils $V_A = -Ul^{-\rho}$ mit der fluktuationsinduzierten Wechselwirkung $V_{Fl} \sim l^{-\tau}$ erhält man die folgenden Bereiche:[54]

Mean-Field Bereich

Hier gilt

$$V_R(l) \gg V_{Fl}(l) \quad \text{für große } l, \quad (2.30)$$

also $\sigma < \tau$. Die Fluktuationen sind dann im gebundenen Zustand hinreichend klein, $\xi_{\perp} \ll \langle l \rangle$, und können vernachlässigt werden. Der Erwartungswert von l ist durch das Minimum von (2.29) gegeben, Phasengrenzen und kritische Exponenten folgen korrekt aus dem Verhalten von dem so ermittelten Erwartungswert $\langle l \rangle$.

Bereich schwacher Fluktuationen

Hier gilt

$$V_R(l) \ll V_{Fl}(l) \ll V_A(l) \quad \text{für große } l, \quad (2.31)$$

also $\sigma > \tau > \rho$. Hier werden die Fluktuationen nicht durch den abstoßenden Teil eingeschränkt und man erhält $\xi_{\perp} \sim \langle l \rangle$. Das Verhalten von $\langle l \rangle$ in diesem Regime wird korrekt durch das Minimum der Superposition von $V(l)$ und $V_{Fl}(l)$ beschrieben.

Bereich starker Fluktuationen

Hier gilt

$$V(l) \ll V_{Fl}(l) \quad \text{für große } l, \quad (2.32)$$

also $\sigma, \rho > \tau$. Der simple Superpositionsansatz sagt in diesem Regime einen Entbindungsübergang erster Ordnung voraus, der aber tatsächlich kontinuierlich und von universellen Exponenten bestimmt ist, siehe Abschnitt A.2.

Intermediärer Bereich

Hier gilt

$$V(l) \sim V_{Fl}(l) \quad \text{für große } l, \quad (2.33)$$

also $\sigma, \rho = \tau$. Dieses Regime, wo die direkte Wechselwirkung mit der fluktuationsinduzierten Wechselwirkung konkurriert, zeigt komplexes kritisches Verhalten und ist selber wieder in drei Unterregimes aufgeteilt. Hier hängen die kritischen Exponenten von der Amplitude des langreichweitigen Teils der direkten Wechselwirkung ab und zeigen somit nichtuniverselles Verhalten. Dies wird im folgenden kurz für einen Faden in $d_{||} = 1$ gezeigt.

Wir wählen folgende Kombination eines Kastenpotentials mit einem langreichweitigen Potential $\sim 1/l^2$:

$$V(l) = \begin{cases} \infty & \text{für } l \leq 0 \\ V^o & \text{für } 0 < l < l^o \quad \text{Fall I} \\ V^o + W/l^2 & \text{für } 0 < l < l^o \quad \text{Fall II} \\ W/l^2 & \text{für } l^o \leq l, \end{cases} \quad (2.34)$$

Im Fall I ist das langreichweitige Potential bei $l = l^o$ abgeschnitten,[58], im Fall II besteht das Potential für $l < l^o$ aus einer Überlagerung des langreichweitigen Potentials und eines Kastenpotentials. Wenn der langreichweitige Potentialanteil verschwindet, also für $W = 0$, ist man in dem Bereich starker Fluktuationen. Wie im Anhang A beschrieben, kann das durch (2.34) definierte Problem für einen Faden in $d = 1 + 1$ Dimensionen in eine Schrödingergleichung überführt werden, die für beide Fälle exakt lösbar ist.

Das kritische Verhalten läßt sich mit den Längenskalen

$$\xi_m \equiv \langle (l - \langle l \rangle)^m \rangle^{1/m} \quad (2.35)$$

charakterisieren, wobei m positiv und eine ganze Zahl ist. Die senkrechte Korrelationslänge ist gegeben durch $\xi_1 = \xi_2$. Mit den Definitionen $v \equiv -V^o K(l^o/T)^2$ und $w \equiv W K(l^o/T)^2$ unterscheidet man die folgenden Bereiche, die für Fall I und II übereinstimmen:

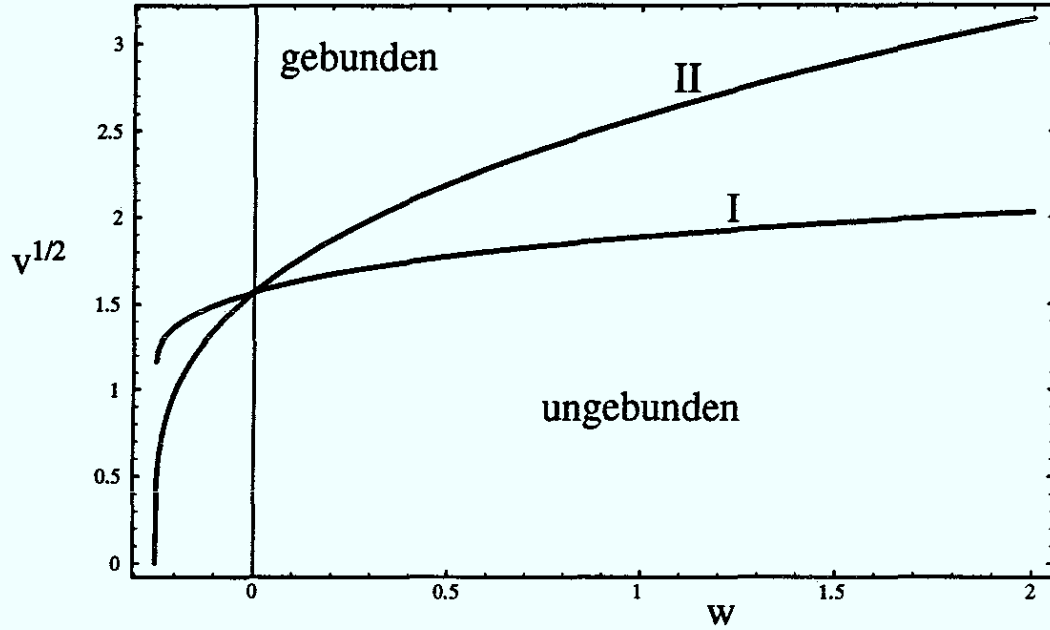


Abbildung 2.3: Phasengrenzen für die durch (2.34) definierten Modelle I und II als Funktion von v und w ; für $w < -1/4$ ist der Faden immer gebunden.

Im Unterregime (B) mit $-1/4 < w < 3/4$ erhält man nichtuniverselles kritisches Verhalten mit einer parallelen Korrelationslänge, die divergiert wie

$$\xi_{\parallel} \sim (v - v_c)^{-\nu_{\parallel}} \quad (2.36)$$

mit

$$\nu_{\parallel} = (1/4 + w)^{-1/2}. \quad (2.37)$$

In diesem Unterregime befriedigen alle Längenskalen die Skalenrelation

$$\langle z \rangle \sim \xi_{\perp} \sim (T/K)^{1/2} \xi_{\parallel}^{\zeta} \quad (2.38)$$

mit $\zeta = 1/2$.

Im Unterregime (C) mit $w > 3/4$ erhält man $\nu_{\parallel} = 1$, aber für die senkrechten Längenskalen gilt

$$\xi_m \sim (v - v_c)^{-\nu_m} \quad (2.39)$$

mit

$$\boxed{\nu_m = \frac{1}{m} \left(\frac{m+2}{2} - (1/4 + w)^{1/2} \right)} \quad (2.40)$$

für $m > (1 + 4w)^{1/2} - 2 > 0$.

Die Phasengrenzen für die beiden Modelle werden in Abb. 2.3 gezeigt. Im Fall I ist sie durch

$$-\sqrt{v_c} \cot(\sqrt{v_c}) + \frac{1}{2} = \sqrt{\frac{1}{4} + w} \quad (2.41)$$

gegeben. Der Übergang für $w = -1/4$ findet bei $\sqrt{v_c} \simeq 1.165$ statt. Im Fall II ist die Phasengrenze durch

$$-\sqrt{v_c} \frac{\partial \mathcal{J}_\mu(\sqrt{v_c}) / \partial \sqrt{v_c}}{\mathcal{J}_\mu(\sqrt{v_c})} = \sqrt{\frac{1}{4} + w} \equiv \mu \quad (2.42)$$

bestimmt, wobei $\mathcal{J}_\mu$ eine Besselfunktion in Standardnotation ist. Der Übergang für $w = -1/4$ findet nun bei $v_c = 0$ statt.[10]

2.4 Ausblick

In den folgenden drei Kapiteln untersuchen wir das Adhäsionsverhalten von Membranstapeln und Fadenbündeln unter der Wirkung von kurzreichweitigen Wechselwirkungen und äußerem Druck.

Zuerst zeigen wir mit einem Argument aus der funktionalen Renormierung, daß die Adhäsion von Fäden und Membranen tatsächlich analog verlaufen sollte.

Dann behandeln wir den Fall von Adhäsion durch kurzreichweitige Wechselwirkungen zwischen den Flächen, die wir durch attraktive Kastenpotentiale darstellen. Transfer-Matrix Ergebnisse für Bündel von bis zu vier Fäden und Monte-Carlo Ergebnisse für Stapel von bis zu drei Membranen weisen die folgenden grundlegenden Strukturen auf: Im Falle von N Flächen mit identischen elastischen Eigenschaften geschieht die Entbindung gleichzeitig bei einer reduzierten Temperatur, die nicht von der Anzahl N abhängt. Die Exponenten weisen für $N > 2$ nur eine leichte Abweichung von dem universellen Fall $N = 2$ auf den numerisch zugänglichen Skalen auf. Sind die Flächen an ein flaches Substrat gebunden, entbinden sie nacheinander mit universellen Exponenten, wobei die Entbindungstemperaturen einem einfachen Potenzgesetz folgen.

In Kapitel 4 behandeln wir die Adhäsion unter der Wirkung eines äußeren Druckes, welcher einer linearen und damit langreichweitigen Wechselwirkung zwischen den Flächen entspricht. Der Adhäsionsübergang findet bei verschwindendem Druck statt; die interessierende Größe ist hier die Amplitude des Fluktuationspotentials, c_{FI} , welche aus dem Adhäsionsverhalten bestimmt werden kann und experimentell zugänglich ist. Die Amplitude c_{FI} ist weitgehend unabhängig von N .

In Kapitel 5 untersuchen wir das Wechselspiel von kurzreichweiti-ger Wechselwirkung und äußerem Druck, was im Falle von zwei Fäden exakt im Schrödingerformalismus ausgeführt werden kann. Die kurzeichweitige Wechselwirkung

verändert die Wirkung des äußeren Druckes (also den Wert der Amplitude des Fluktuationspotentials, c_{FI}) nur, wenn sie attraktiv genug ist, die Fäden zu binden. Für schwächere Attraktion oder Repulsion ist sie im Limes verschwindenden Druckes irrelevant. Monte Carlo Ergebnisse für zwei Membranen zeigen analoges Verhalten. Abschließend werden die Amplitudenverhältnisse der verschiedenen Längenskalen (Abstand, Rauigkeit, parallele Korrelationslänge) aufgelistet, wobei quantitative Übereinstimmung zwischen den Resultaten für Fäden und Membranen vorhanden ist.

Im letzten Kapitel werden experimentelle Vorschläge diskutiert, mit denen die hier erarbeiteten Ergebnisse nachgeprüft werden könnten.

Kapitel 3

Adhäsion für kurzreichweitige Potentiale

In diesem Kapitel untersuchen wir Adhäsionsübergänge von Membranenstapeln in drei Dimensionen und von Fadenbündeln in zwei Dimensionen, die durch kurzreichweitige Wechselwirkungen ohne äußeren Druck zusammengehalten werden. Wir behandeln diese Systeme bei konstanter Anzahl N der Flächen. Die Schwerpunktkoordinate, die eine Bewegung des gesamten Systems beschreibt, wird abgetrennt, und wir betrachten nur die verbleibenden Abstandskordinaten. Ein Renormierungsgruppenargument wird formuliert und zeigt, daß Membranenstapel in drei und Fadenbündel in zwei Dimensionen die gleichen kritischen Eigenschaften haben sollten. Zuerst behandeln wir dann ein System von drei Fäden: hier sehen wir, daß das kritische Verhalten empfindlich von der Symmetrie des Problems abhängt: für ein symmetrisches System, bei dem die Steifigkeiten der äußeren Fäden gleich sind, entbinden die Fäden gleichzeitig; die numerischen Ergebnisse weisen hier eine schwache Abhängigkeit der effektiven Exponenten von dem Verhältnis der Steifigkeiten des inneren und der äußeren Fäden auf. Für ein unsymmetrisches System finden wir zwei getrennte Übergänge, die dann universell sind.[75, 76] Danach betrachten wir Fadenbündel und Membranenstapel bestehend aus bis zu vier Flächen, zwischen denen identische Paarpotentiale wirken. Im Falle identischer Flächen entbinden sie gleichzeitig bei einer Temperatur, die nicht von der Anzahl N abhängt; wieder suggerieren die numerischen Daten eine nichtuniverselle Abhängigkeit der Exponenten, diesmal von N . Wenn die Flächen an ein flaches Substrat gebunden sind, entbinden sie nacheinander, wobei die Exponenten hier universell sind. Die einzelnen Übergangstemperaturen werden gut durch ein Potenzgesetz beschrieben.[77, 78]

3.1 Effektiver Hamiltonian für drei Flächen

Hier formulieren wir den Hamiltonian für drei miteinander wechselwirkende Flächen. Dabei ist es möglich, genau wie bei zwei wechselwirkenden Flächen (Abschnitt 2.2.2), die Schwerpunktkoordinate mittels einer Orthogonaltransformation abzutrennen. Der resultierende Hamiltonian hängt dann nur noch von den beiden Abstandsvariablen ab.

Die elastischen Konstanten sind durch K_i , die Positionen der Flächen durch eindeutige Höhenfunktionen $l_i(\mathbf{x})$ mit $i = 1, 2, 3$ gegeben, wobei $\mathbf{x}$ ein $d_{||}$ -dimensionaler Vektor ist; $d_{||} = 1$ für Fäden und $d_{||} = 2$ für Membranen. Die Wechselwirkungen $V_{ij}(l_i - l_j)$ mit $(i, j) = (1, 2)$ und $(2, 3)$ hängen nur von den lokalen Abständen ab und wirken zunächst nur zwischen nächsten Nachbarn. Hier behandeln wir kurzreichweitige Wechselwirkungen, die durch Kastenpotentiale repräsentiert werden können, die wie folgt definiert sind:

$$V_{ij}(l) = \begin{cases} \infty & \text{für } l < 0 \\ V^o & \text{für } 0 < l < l_{ij}^o \\ 0 & \text{für } l_{ij}^o < l \end{cases} . \quad (3.1)$$

Die harten Wänden für $l < 0$ entsprechen der Selbstvermeidung und erzwingen, daß $l_1 > l_2 > l_3$, attraktive Wechselwirkungen sind durch $V_{ij}^o < 0$ definiert. Der effektive Hamiltonian für drei Flächen ist gegeben durch

$$\mathcal{H}\{l_1, l_2, l_3\} = \int d^{d_{||}}x \left\{ \frac{K_1}{2} (\nabla^s l_1)^2 + \frac{K_2}{2} (\nabla^s l_2)^2 + \frac{K_3}{2} (\nabla^s l_3)^2 + V_{12}(l_1 - l_2) + V_{23}(l_2 - l_3) \right\}, \quad (3.2)$$

wobei $s = 1$ für durch Linienspannung kontrollierte Fäden und $s = 2$ für durch Biegesteifigkeit kontrollierte Membranen. Dieser Ausdruck wird enorm vereinfacht durch Abspaltung der Schwerpunktkoordinate, wonach er nur noch von den beiden Abstandsfeldern y_1 und y_2 abhängt (siehe Anhang B).[64, 65, 66] Der Hamiltonian hat dann die Form

$$\mathcal{H}\{y_1, y_2\} = \int d^{d_{||}}x \left\{ \frac{1}{2} (\nabla^s y_1)^2 + \frac{1}{2} (\nabla^s y_2)^2 + V_{12} \left(\sqrt{\frac{1}{K_1} + \frac{1}{K_2}} y_1 \right) + V_{23} \left(\sqrt{\frac{1}{K_2} + \frac{1}{K_3}} (y_2 \sin \theta - y_1 \cos \theta) \right) \right\}, \quad (3.3)$$

und die orthogonalen Abstandsfelder y_1 und y_2 sind mit den lokalen Abständen der Flächen, $(l_1 - l_2)$ und $(l_2 - l_3)$, verknüpft durch

$$y_1 = \left(\frac{K_1 K_2}{K_1 + K_2} \right)^{1/2} (l_1 - l_2) \quad (3.4)$$

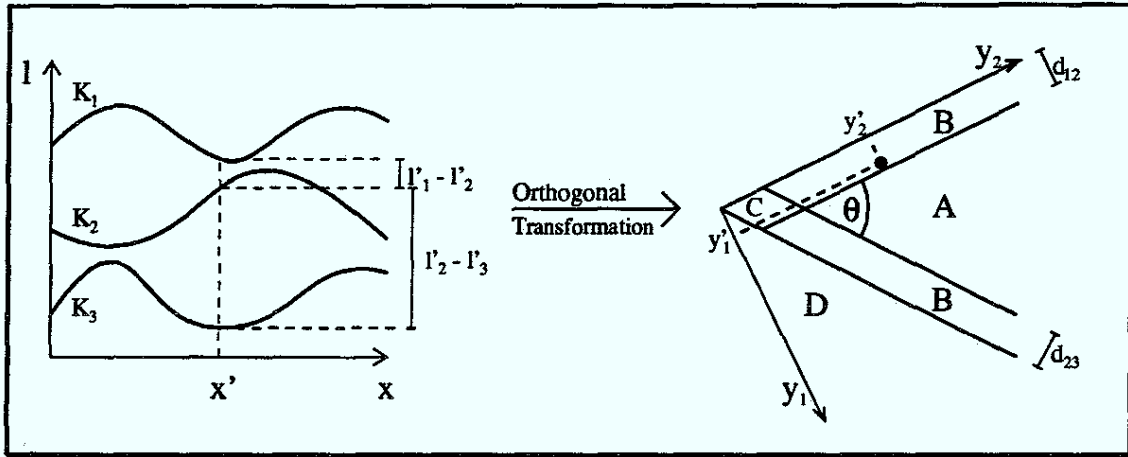


Abbildung 3.1: Orthogonaltransformation für den Fall von drei Fäden mit beliebigen Linienspannungen K_i .

und

$$y_2 = \left(\frac{(K_1 + K_2)K_3}{K_1 + K_2 + K_3} \right)^{1/2} \left[\frac{K_1}{K_1 + K_2} (l_1 - l_2) + l_2 - l_3 \right], \quad (3.5)$$

wobei die Schwerpunktkoordinate schon weggelassen wurde. Die harte Wand für $l_1 = l_2$ entspricht nun $y_1 = 0$; die für $l_2 = l_3$ entspricht $y_1 = [K_2(K_1 + K_2 + K_3)/K_1 K_3]^{1/2} y_2$.

Offensichtlich separiert der Energieausdruck (3.3) nur dann in den orthogonalen Koordinaten y_1 und y_2 , wenn $\theta = \pi/2$ ist. Mit Hilfe der Verhältnisse der elastischen Konstanten,

$$q_1 \equiv K_1/K_2 \quad \text{und} \quad q_3 \equiv K_3/K_2, \quad (3.6)$$

kann der Winkel θ geschrieben werden als

$$\theta = \arctan(\sqrt{1/q_1 + 1/q_1 q_3 + 1/q_3}). \quad (3.7)$$

Abb. 3.1 demonstriert diese Transformation für den Fall von drei Fäden, das heißt für $d_{11} = 1$. Das Problem bestehend aus drei wechselwirkenden Fäden, parametrisiert durch Funktionen $l_i(x)$ (zur Linken), wird transformiert in das Problem von einem Faden in einem dreidimensionalen Keil mit Öffnungswinkel θ und mit den attraktiven Kastenpotentialen an den Wänden. Der Querschnitt dieses Keils ist in Abb. 3.1 zur Rechten gezeigt. In Region A ist das Potential Null. In Region B ist das Potential V_{12}^o oder V_{23}^o , hier sind zwei der drei Fäden gebunden; in Region C sind alle drei Fäden gebunden und das Potential ist $V_{12}^o + V_{23}^o$. Region D enthält die durch Selbstvermeidung verbotenen Konfigurationen, hier ist das Potential unendlich hoch. Die Dicke der beiden Potentialstreifen kann aus (3.3) abgelesen werden

und ist

$$d_{12} = \sqrt{\frac{K_1 K_2}{K_1 + K_2}} l_{12}^0 \quad \text{und} \quad d_{23} = \sqrt{\frac{K_2 K_3}{K_2 + K_3}} l_{23}^0. \quad (3.8)$$

Das Verhältniss der Dicken ist gegeben durch

$$\frac{d_{12}}{d_{23}} = \sqrt{\frac{K_1(K_2 + K_3)}{K_3(K_2 + K_1)}} \frac{l_{12}^0}{l_{23}^0} = \sqrt{\frac{q_1(q_3 + 1)}{q_3(q_1 + 1)}} \frac{l_{12}^0}{l_{23}^0}. \quad (3.9)$$

Der Faden ist im Durchschnitt parallel zur der Keilkante, in Abb. 3.1 zeigen wir die Transformation für einen Wert x' der x -Koordinate. Der Winkel θ ist genau dann $\theta = \pi/2$, wenn der mittlere Faden einer harten Wand entspricht, also für $K_2 = \infty$. Dann separiert der Ausdruck (3.3) gerade in y_1 und y_2 , und das ursprüngliche Problem der drei Fäden zerfällt in die durch die harte Wand getrennten Fäden. Je kleiner K_2 , also je flexibler der mittlere Faden, desto kleiner der Winkel θ . Für den Fall von drei gleichen Fäden erhalten wir $\theta = \pi/3$.

3.2 Analogie von Fäden und Membranen

Um zu zeigen, daß Fäden in zwei Dimensionen und Membranen in drei Dimensionen gleiche kritische Eigenschaften haben sollten, wird die aus der Funktionalrenormierung des direkten Wechselwirkungspotentials folgende Flußgleichung für den allgemeinen Fall formuliert. Dazu betrachtet man den allgemeinen Hamiltonian für N $d_{||}$ -dimensionale Flächen als Funktion von einem $N-1$ dimensionalen Feld y , welches durch eine Orthogonaltransformation analog zu der im letzten Kapitel vorgestellten mit den $N-1$ Abstandsvariablen der N Flächen verknüpft ist:

$$\mathcal{H}\{y(\mathbf{x})\} = \int d^{d_{||}}x \left\{ \sum_{n=0}^{N-2} \frac{1}{2} (\nabla^s y_n)^2 + V^{(0)}(y) \right\}. \quad (3.10)$$

Für den Fall von separablen Wechselwirkungen ist das Potential $V^{(0)}$ einfach die Superposition der Paarwechselwirkungen. Die Renormierungsgruppe, die wir benutzen, ist eine Erweiterung von Wilsons approximativen Rekursionsformeln[101] und wirkt als nichtlineare Transformation im Funktionenraum der direkten Wechselwirkungen $V(y)$, läßt aber den elastischen Teil unverändert.[54, 49, 50] Sie ist exakt in erster Ordnung des Wechselwirkungspotentials.

Die Funktionsweise kann in zwei Schritten unterteilt veranschaulicht werden: (i) Zuerst werden in der Zustandssumme alle Fluktuationen zwischen a (dem unteren Cutoff) und ba ausintegriert, und (ii) danach werden die Längen entsprechend $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}/b$ und $y \rightarrow y/b^{\zeta}$ reskaliert. Offensichtlich ist die Zustandssumme dabei invariant. Der Rauigkeitsexponent ζ ist gegeben durch $\zeta = s - d_{||}/2$. Die resultierende

renormierte Wechselwirkung ist gegeben durch

$$U^{(M+1)}(\mathbf{z}) = -b^{d_{\parallel}} \ln \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^{N-1} z'}{(2\pi)^{(N-1)/2}} \exp \left(-\frac{1}{2} \mathbf{z}'^2 \right) - \frac{1}{2} U^{(M)}(b^{\zeta} \mathbf{z} - \mathbf{z}') - \frac{1}{2} U^{(M)}(b^{\zeta} \mathbf{z} + \mathbf{z}') \right], \quad (3.11)$$

wobei $U \sim V$ und $\mathbf{z} \sim \mathbf{y}$ geeignet reskalierte Größen sind. Nach einer Taylorentwicklung von U um $b^{\zeta} \mathbf{z}$ bis zur zweiten Ordnung erhält man

$$U^{(M+1)}(\mathbf{z}) = -b^{d_{\parallel}} \ln \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^{N-1} z'}{(2\pi)^{(N-1)/2}} \exp \left(-\frac{1}{2} \mathbf{z}'^2 \right) - U^{(M)}(b^{\zeta} \mathbf{z}) - \frac{1}{2} \mathbf{z}'_{\alpha} \mathbf{z}'_{\beta} \partial_{\alpha} \partial_{\beta} U^{(M)}(b^{\zeta} \mathbf{z}) \right], \quad (3.12)$$

wobei $\partial_{\alpha} \equiv \partial/\partial z_{\alpha}$ und die Einsteinsche Summationskonvention gilt. Der Ausdruck (3.12) läßt sich exakt integrieren und ergibt

$$U^{(M+1)}(\mathbf{z}) = b^{d_{\parallel}} \ln \left[\det \left(\delta_{\alpha\beta} + \partial_{\alpha} \partial_{\beta} U^{(M)}(b^{\zeta} \mathbf{z}) \right) \right] / 2 + b^{d_{\parallel}} U^{(M)}(b^{\zeta} \mathbf{z}) / 2. \quad (3.13)$$

Für infinitesimalen Reskalierungsfaktor, $b = 1 + \delta t$, erhält man im Limes $\delta t \rightarrow 0$ daraus die Flußgleichung

$$\frac{1}{\zeta} \frac{\partial U(\mathbf{z})}{\partial t} = \tau U + z_{\alpha} \partial_{\alpha} U(\mathbf{z}) + \ln \det(\delta_{\alpha\beta} + \partial_{\alpha} \partial_{\beta} U(\mathbf{z})), \quad (3.14)$$

mit $\tau \equiv d_{\parallel}/\zeta$. Fixpunkte der Renormierungsgruppe, für die $U^{(M+1)} = U^{(M)} \equiv U^*$ gilt, sind durch $\partial U/\partial t = 0$ bestimmt und hängen dadurch nur von τ ab. Da $\tau = 2$ sowohl für Membranen mit $d_{\parallel} = 2$ und $\zeta = 1$ als auch für Fäden mit $d_{\parallel} = 1$ und $\zeta = 1/2$ gilt, sind die Fixpunkte für diese beiden Systeme identisch; kritische Exponenten für diese beiden Systeme hängen in einer trivialen Weise miteinander zusammen.

Diese Vorhersage, welche wir erhalten, ohne die Fixpunkte explizit zu berechnen, wird in Teilen dieser Arbeit geprüft und läßt sich durch Monte Carlo Ergebnisse für Membranen und Transfer Matrix Resultate für Fäden bestätigen. Um also das Verhalten von Membranstapeln zu bestimmen, kann man zunächst das verhältnismäßig einfachere System von Fadenbündeln untersuchen.

3.3 Schrödinger Gleichung für drei Fäden

Das zweidimensionale Potential für die Entbindung dreier Fäden als Funktion der beiden Abstandsfelder wird in Abb. 3.2(a) gezeigt. Offensichtlich kann das Problem nur für den Fall $\theta = \pi/2$, bei dem der mittlere Faden einer harten Wand entspricht,

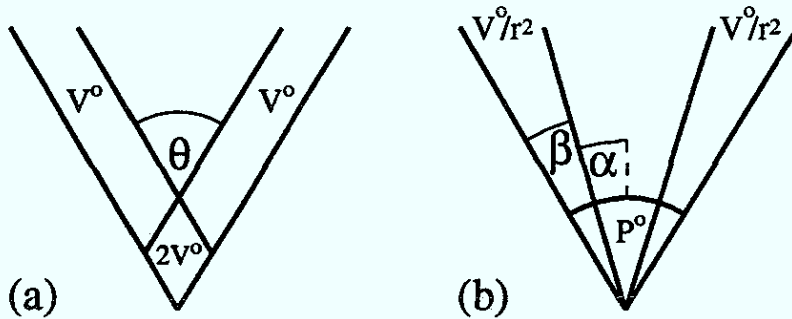


Abbildung 3.2: (a) Das keilförmige Potential für drei Fäden mit Wechselwirkungen zwischen den nächsten Nachbarn, definiert durch Hamiltonian (3.3). (b) Potentialform, die sich in Winkel- und Radiuskoordinate separieren läßt. Hier ist $\theta = 2(\alpha + \beta)$. Die korrespondierende Schrödingergleichung ist lösbar.

in den orthogonalen Koordinaten separiert werden. Ein Potential ähnlicher Form wird in Abb. 3.2(b) gezeigt; dieses ist separabel in den Polarkoordinaten r und ϑ , und die korrespondierende Schrödingergleichung kann gelöst werden. Der Hauptunterschied zwischen den beiden Potentialen liegt in den Streifen, die für das in Abb. 3.2(b) gezeigte Potential linear an Breite zunehmen, je weiter man nach außen geht. Um die Zunahme der Breite gerade zu kompensieren, multipliziert man die Potentialtiefe mit einem Faktor $1/r^2$, da die effektive Stärke des Potentials quadratisch von der Reichweite abhängt (siehe Anhang A.2). In diesem Abschnitt diskutieren wir die Lösung des in Abb. 3.2(b) dargestellten vereinfachten Potentials mit verschiedenen Randbedingungen und ziehen Rückschlüsse auf die Lösungsstruktur des Ausgangsproblems mit der Potentialstruktur in Abb. 3.2(a).

Die Schrödingergleichung in Polarkoordinaten läßt sich schreiben als

$$\left\{ -\frac{T^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} \right) + \tilde{P}(r) + \frac{\tilde{V}(\vartheta)}{r^2} \right\} \Psi(r, \vartheta) = E \Psi(r, \vartheta), \quad (3.15)$$

wobei wir uns immer auf den Grundzustand beziehen. Die Herleitung der Schrödingergleichung wird in Anhang A besprochen. Das Winkelpotential $\tilde{V}(\vartheta)$ ist gegeben durch

$$\tilde{V}(\vartheta) = \begin{cases} V^0 & \text{für } -\alpha - \beta < \vartheta < -\alpha \\ 0 & \text{für } -\alpha < \vartheta < \alpha \\ V^0 & \text{für } \alpha < \vartheta < \alpha + \beta, \end{cases} \quad (3.16)$$

mit $\theta = 2(\alpha + \beta)$; das Radialpotential $\tilde{P}(r)$ hat den Verlauf

$$\tilde{P}(r) = \begin{cases} P^0 & \text{für } 0 < r < r_0 \\ 0 & \text{für } r_0 < r. \end{cases} \quad (3.17)$$

Der Wert von $\tilde{V}(\vartheta)$ für $\vartheta < -\theta/2$ und $\vartheta > \theta/2$ hängt davon ab, ob wir es mit nichtdurchdringenden oder durchdringenden Fäden zu tun haben und bestimmt die Randbedingungen. Mit dem Ansatz

$$\Psi(r, \vartheta) \equiv r^{-1/2} \Phi^{(r)}(r) \Phi^{(\vartheta)}(\vartheta), \quad (3.18)$$

separieren wir (3.15) in zwei Gleichungen für den Winkel- und Radialanteil,

$$\left\{ -\frac{T^2}{2} \frac{d^2}{d\vartheta^2} + \tilde{V}(\vartheta) \right\} \Phi^{(\vartheta)}(\vartheta) = E^{(\vartheta)} \Phi^{(\vartheta)}(\vartheta), \quad (3.19)$$

$$\left\{ -\frac{T^2}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{4r^2} \right) + \frac{E^{(r)}}{r^2} + \tilde{P}(r) \right\} \Phi^{(r)}(r) = E \Phi^{(r)}(r). \quad (3.20)$$

Mit den Variablentransformationen $\varphi = \vartheta/\beta$ und $z = r/r_o$ erhalten wir letztendlich

$$\left\{ -d^2/d\varphi^2 + \tilde{v}(\varphi) \right\} \phi^{(\varphi)}(\varphi) = \varepsilon^{(\varphi)} \phi^{(\varphi)}(\varphi), \quad (3.21)$$

$$\boxed{\left\{ -d^2/dz^2 + w/z^2 + \tilde{p}(z) \right\} \phi^{(z)}(z) = \varepsilon \phi^{(z)}(z)}, \quad (3.22)$$

mit $\varepsilon^{(\varphi)} \equiv 2\beta^2 E^{(\varphi)}/T^2$, $\varepsilon \equiv 2r_o^2 E/T^2$, $\phi^{(\varphi)}(\vartheta/\beta) \equiv \Phi^{(\varphi)}(\varphi)$ und $\phi^{(r)}(r/r_o) \equiv \Phi^{(r)}(r)$, wobei wir die reduzierten Potentiale

$$\tilde{v}(\varphi) = \begin{cases} v^o & \text{für } -1 - \delta < \varphi < -\delta \\ 0 & \text{für } -\delta < \varphi < \delta \\ v^o & \text{für } \delta < \varphi < \delta + 1, \end{cases} \quad (3.23)$$

mit $v^o = 2\beta^2 V^o/T^2$ und $\delta = \alpha/\beta$, und

$$\tilde{p}(z) = \begin{cases} p^o & \text{für } 0 < z < 1 \\ 0 & \text{für } 1 < z, \end{cases} \quad (3.24)$$

mit $p^o = 2r_o^2 P^o/T^2$ benutzen. Die Amplitude des langreichweitigen Potentials w in (3.22) ist gegeben durch

$$\boxed{w = \varepsilon^{(\varphi)}/\beta^2 - 1/4.} \quad (3.25)$$

Das Problem ist also reduziert auf die durch (3.22) definierte Entbindung eines Fadens in 1 + 1 Dimensionen in der Anwesenheit eines langreichweitigen $1/z^2$ Potentials, wofür in Abschnitt 2.3 exakte Lösungen angegeben wurden. Die dort gefundenen Ergebnisse zeigen, daß das kritische Verhalten in nichtuniverseller Weise von der Amplitude w des langreichweitigen Potentials abhängt. Diese Amplitude wiederum hängt vom Winkelpotential $\tilde{v}(\varphi)$ und den Randbedingungen ab, und wird in den folgenden Abschnitten für verschiedene Grenzfälle bestimmt.

Nichtdurchdringende Fäden

Wir beschränken uns hier auf den Fall $v^o < 0$, also attraktive Potentialstreifen, und $\varepsilon^{(\varphi)} > 0$. Die Lösungen der Gleichung (3.21) sind dann gegeben durch

$$\begin{aligned}\phi^{(\varphi)} &= A \cos(\sqrt{\varepsilon^{(\varphi)}}\varphi) & -\delta < \varphi < \delta \\ \phi^{(\varphi)} &= B \cos(\sqrt{\varepsilon^{(\varphi)} - v^o}\varphi \pm C) & \delta < \pm\varphi < \delta + 1.\end{aligned}\quad (3.26)$$

Der Nichtdurchdringbarkeit der Fäden wird durch die Randbedingungen

$$\phi^{(\varphi)}(-1 - \delta) = \phi^{(\varphi)}(1 + \delta) = 0 \quad (3.27)$$

Rechnung getragen, welche zusammen mit den Anschlußbedingungen für $\varphi = \delta$ und $\varphi = -\delta$ die Konstanten A , B und C festlegen und zu der Bestimmungsgleichung von $\varepsilon^{(\varphi)}$ führen:

$$\sqrt{\varepsilon^{(\varphi)}} \tan(-\sqrt{\varepsilon^{(\varphi)}}\delta) = \sqrt{\varepsilon^{(\varphi)} - v^o} \tan(\sqrt{\varepsilon^{(\varphi)} - v^o} - \pi/2). \quad (3.28)$$

Im Falle verschwindenden Potentials, $v^o = 0$, erhalten wir die explizite Lösung $\varepsilon^{(\varphi)} = (\pi/(2\delta + 2))^2$, welche mit (3.25) zu einer expliziten Formel für die Amplitude w führt:[56]

$$w = \pi^2/\theta^2 - 1/4. \quad (3.29)$$

Dieser Fall entspricht verschwindender Wechselwirkung zwischen den benachbarten Fadenpaaren, die Bindung wird hier nur durch eine Wechselwirkung der beiden äußeren Fäden verursacht; dies entspricht dem sogenannten Necklace Modell, welches für die Beschreibung der Adhäsion von Fadenbündeln vorgeschlagen wurde.[21, 23, 53]

Für die kritische Potentialstärke $v^o = -\pi^2/4$ erhält man $\varepsilon^{(\varphi)} = 0$, woraus $w = -1/4$ folgt. Für dazwischenliegende Werte der Potentialstärke v^o interpoliert die Funktion $\varepsilon^{(\varphi)}(v^o)$ kontinuierlich und monoton zwischen den Werten für $v^o = -\pi^2/4$ und $v^o = 0$, in Abhängigkeit von dem Parameter δ .

Diese Ergebnisse für ein lösbares, aber abgeändertes Modell für drei wechselwirkende nichtdurchdringende Fäden zeigen nichtuniverselles Verhalten für drei Fäden in Abhängigkeit von (a) der relativen Steifigkeit der Fäden (über den Winkel θ) und von (b) der relativen Stärke von der Wechselwirkung zwischen den äußeren Fäden (p^o) und benachbarten Fäden (v^o). In den folgenden Abschnitten werden wir mit numerischen Transfer Matrix Methoden diese beiden Fragen für das in Abb. 3.2(a) definierte ursprüngliche Modell für drei Fäden untersuchen.

Durchdringende Fäden

Die Durchdringbarkeit der Fäden wird in einer approximativen Weise durch die (strikt nur für $\theta = \pi/3$ gültige) Randbedingung

$$d\phi^{(\varphi)}(\varphi)/d\varphi|_{\varphi=-1-\delta} = d\phi^{(\varphi)}(\varphi)/d\varphi|_{\varphi=1+\delta} = 0 \quad (3.30)$$

berücksichtigt. Die Lösungen sind für $v^o < 0$ gegeben durch

$$\begin{aligned}\phi^{(\varphi)} &= A \left(e^{-\sqrt{-\varepsilon^{(\varphi)}}\varphi} + e^{\sqrt{-\varepsilon^{(\varphi)}}\varphi} \right) & -\delta < \varphi < \delta \\ \phi^{(\varphi)} &= B \cos(\sqrt{\varepsilon^{(\varphi)} - v^o}\varphi \pm C) & \delta < \pm\varphi < \delta + 1,\end{aligned}\quad (3.31)$$

woraus die Bestimmungsgleichung

$$\sqrt{-\varepsilon^{(\varphi)}} \tanh(\sqrt{-\varepsilon^{(\varphi)}}\delta) = \sqrt{\varepsilon^{(\varphi)} - v^o} \tan(\sqrt{\varepsilon^{(\varphi)} - v^o}) \quad (3.32)$$

folgt. Für $v^o > 0$ bekommt man ganz analog

$$\begin{aligned}\phi^{(\varphi)} &= A \cos(\sqrt{-\varepsilon^{(\varphi)}}\varphi) & -\delta < \varphi < \delta \\ \phi^{(\varphi)} &= B e^{\sqrt{v^o - \varepsilon^{(\varphi)}}\varphi} + C e^{-\sqrt{v^o - \varepsilon^{(\varphi)}}\varphi} & \delta < \pm\varphi < \delta + 1,\end{aligned}\quad (3.33)$$

woraus man

$$\sqrt{\varepsilon^{(\varphi)}} \tan(\sqrt{\varepsilon^{(\varphi)}}\delta) = \sqrt{v^o - \varepsilon^{(\varphi)}} \tanh(\sqrt{v^o - \varepsilon^{(\varphi)}}) \quad (3.34)$$

erhält. Für die Grenzfälle von sehr attraktivem, verschwindendem oder sehr repulsivem Potential erhält man

$$\begin{aligned}\varepsilon^{(\varphi)} &= \pi^2/4 + v^o & v^o \ll 0 \\ \varepsilon^{(\varphi)} &= 0 & v^o = 0 \\ \varepsilon^{(\varphi)} &= \pi^2/(2\delta)^2 & v^o \gg 0.\end{aligned}\quad (3.35)$$

Also auch hier hängt die Amplitude des langreichweitigen Potentials w über (3.25) von dem Winkel und der Potentialstärke v^o ab; das kritische Verhalten in Abhängigkeit von w ist gegeben durch die Gleichungen (2.35-2.39), das Phasendiagramm weicht wegen der Durchdringbarkeit der Fäden allerdings von dem in Abschnitt 2.3 gezeigten ab.

3.4 Transfer Matrix für drei Fäden

Hier führen wir den Transfer Matrix Formalismus ein, der für den Fall von Fadenbündeln (mit $d_{||} = 1$) anwendbar ist. Dazu muß die eindimensionale Koordinate x , die eine der Zeit entsprechende Rolle spielt, diskretisiert werden. Dies geschieht auf Gitterplätzen $\{x_i\}$ und mit einer Gitterkonstanten Δx . Die Fadenkonfiguration ist dann bestimmt durch $y_{\alpha i} \equiv y_{\alpha}(x_i)$ ($\alpha = 1, 2$), und aus dem Hamiltonian (3.3) folgt der Ausdruck

$$\begin{aligned}\mathcal{H}\{y_{1i}, y_{2i}\} &= \sum_i \Delta x \left\{ \frac{1}{2} \frac{(y_{1i} - y_{1i+1})^2}{\Delta x^2} + \frac{1}{2} \frac{(y_{2i} - y_{2i+1})^2}{\Delta x^2} + V_{12} \left(\sqrt{\frac{1}{K_1} + \frac{1}{K_2}} y_{1i} \right) + \right. \\ &\quad \left. V_{23} \left(\sqrt{\frac{1}{K_2} + \frac{1}{K_3}} (y_{2i} \sin \theta - y_{1i} \cos \theta) \right) \right\}.\end{aligned}\quad (3.36)$$

Dieser diskretisierte Energieausdruck wird aufgespalten in

$$\mathcal{H}\{z_{1i}, z_{2i}\}/T = \sum_i H_i(z_{1i}, z_{2i}, z_{1i+1}, z_{2i+1}), \quad (3.37)$$

mit dem lokalen Hamiltonian

$$H_i(z_{1i}, z_{2i}, z_{1i+1}, z_{2i+1}) = \frac{1}{2}(z_{1i} - z_{1i+1})^2 + \frac{1}{2}(z_{2i} - z_{2i+1})^2 + \hat{V}_{12}(z_{1i+1}) + \hat{V}_{23}(z_{2i+1} \sin \theta - z_{1i+1} \cos \theta), \quad (3.38)$$

wobei wir reskalierte Variablen $z_{\alpha i} \equiv y_{\alpha i}/\sqrt{\Delta x T}$, ($\alpha = 1, 2$), und die reduzierten Wechselwirkungen $\hat{V}_{12}(z) \equiv \Delta x V_{12}(\sqrt{\Delta x T(K_1 + K_2)}/K_1 K_2 z)/T$ und $\hat{V}_{23}(z) \equiv \Delta x V_{23}(\sqrt{\Delta x T(K_2 + K_3)}/K_2 K_3 z)/T$ eingeführt haben. Die Potentialtiefen dieser reduzierten Wechselwirkungen sind definiert durch

$$\hat{V}_{12}(z) = -U_{12} \equiv \frac{\Delta x}{T} V_{12}^o \quad \text{für} \quad 0 < z < z_{12}^o \quad (3.39)$$

und

$$\hat{V}_{23}(z) = -U_{23} \equiv \frac{\Delta x}{T} V_{23}^o \quad \text{für} \quad 0 < z < z_{23}^o, \quad (3.40)$$

und die Reichweiten sind gegeben durch

$$z_{12}^o \equiv \frac{d_{12}}{\sqrt{\Delta x T}} \quad \text{und} \quad z_{23}^o \equiv \frac{d_{23}}{\sqrt{\Delta x T}}. \quad (3.41)$$

Das statistische Gewicht $\mathcal{W}(z_{1i+1}, z_{2i+1})$ einer Fadenkonfiguration mit festgehaltenem Ende bei (z_{1i+1}, z_{2i+1}) hängt von der Gewichtsverteilung $\mathcal{W}(z_{1i}, z_{2i})$ rekursiv in folgender Weise ab:

$$\mathcal{W}(z_{1i+1}, z_{2i+1}) = \mathcal{N}^{-1} \int \int dz_{1i} dz_{2i} \exp(-H_i(z_{1i}, z_{2i}, z_{1i+1}, z_{2i+1})) \mathcal{W}(z_{1i}, z_{2i}), \quad (3.42)$$

wobei $\mathcal{N}$ die durch die Normierungsbedingung $\int \int dz_1 dz_2 \mathcal{W}^2(z_1, z_2) = 1$ festgelegte Normierungskonstante ist. Der Integralkern in (3.42) wird die Transfer Matrix genannt. In unserer numerischen Implementierung müssen wir natürlich auch die Abstandsfelder z_{1i} und z_{2i} mit Gitterplätzen $\{z_{1i}^j\}$ und $\{z_{2i}^k\}$ und Gitterkonstanten $\Delta z_1 = \Delta z_2 \equiv \Delta z$ diskretisieren, wodurch das Doppelintegral $\int \int dz_{1i} dz_{2i}$ durch die Doppelsumme $\sum_j \sum_k (\Delta z)^2$ ersetzt wird. Außerdem beschränken wir die Doppelsumme auf nächste Nachbarn, wir benutzen also die sogenannte "restricted solid-on-solid" (RSOS) Näherung. Da unser System homogen in der x -Richtung ist, können wir den Index i fallenlassen und erhalten die endgültige Rekursionsformel

$$\mathcal{W}'(z_1^{j'}, z_2^{k'}) = \mathcal{N}^{-1} (\Delta z)^2 \sum_{j=j'-1}^{j'+1} \sum_{k=k'-1}^{k'+1} \exp(-H(z_1^j, z_2^k, z_1^{j'}, z_2^{k'})) \mathcal{W}(z_1^j, z_2^k). \quad (3.43)$$

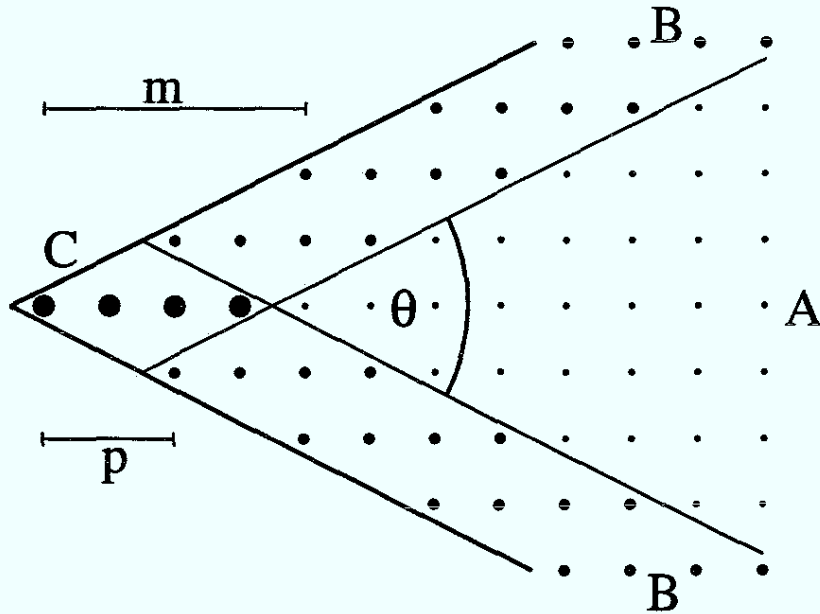


Abbildung 3.3: Diskretisierung des Potentialkeils für $\theta = 2 \arctan(1/2)$. Die abgetrennten Regionen entsprechen Bereichen verschiedener Potentialtiefe; außerhalb des Keils ist das Potential unendlich hoch.

Die benutzte RSOS Näherung vereinfacht das Problem und spart dadurch Rechenzeit, das universelle kritische Verhalten sollte dadurch nicht beeinflusst werden. Das ist bewiesen für den Fall $\theta = \pi/2$. Diese Vermutung wird auch für das Necklace Modell für die Winkel $\theta = \pi, \pi/2, 2 \arctan(1/2)$, und $2 \arctan(1/3)$ überprüft, wo wir tatsächlich gute Übereinstimmung zwischen den numerisch ermittelten Exponenten und den exakt berechneten Exponenten finden (siehe Abschnitt 3.4.1).

Diskretisierung

Bei der Diskretisierung des Hamiltonians (3.38) müssen mehrere Punkte beachtet werden. Zum ersten muß die Diskretisierung die Symmetrie des Problems berücksichtigen. Das heißt, daß die Diskretisierung, wenn das System der drei Fäden invariant gegenüber einem Austausch der beiden äußeren Fäden ist, auch invariant gegenüber einem Austausch der Ausdrücke z_1 und $z_2 \sin \theta - z_1 \cos \theta$ zu sein hat. Dies kann im Falle eines Quadratgitters einfach dadurch erreicht werden, daß man die Winkelhalbierende des Potentialkeils parallel zu einer der Achsen des orthogonalen Gittersystems $\{z_1^j, z_2^k\}$ ausrichtet.

Außerdem muß die Dicke der Potentialstreifen so gewählt werden, daß die Dichte von Gitterpunkten in den verschiedenen Regionen des Potentialkeils konstant ist. Zur Veranschaulichung betrachte man Abb. 3.3, wo wir die benutzte Diskretisierung für

den Fall $\theta = 2 \arctan(1/2)$ zeigen. Der Keilwinkel ist hier dadurch festgelegt, daß die Kante bei jedem vertikalen Schritt um $p = 2$ Schritte in der horizontalen Richtung verschoben wird. Der Winkel ist dann gegeben durch $\theta = 2 \arctan(1/p)$. Die drei Potentialregionen A , B und C haben eine Potentialtiefe von 0, U_{12} oder U_{23} , und $U_{12} + U_{23}$. Die Konstante m mißt die Dicke der Potentialstreifen in horizontaler Richtung.

Die Konstanten p und m müssen nun so eingestellt werden, daß die Dichte von Gitterpunkten in den Regionen B und C gleich sind; das ist nicht automatisch der Fall! Die Dichte $\mathcal{D}(B)$ in Region B ist $\mathcal{D}(B) = 1$ in Einheiten der Gitterkonstante Δz . Die Fläche von Region C ist $\mathcal{A}(C) = m^2/2 \cot(\theta/2)$. Die Anzahl von Gitterpunkten in Region C ist für $m \leq 2p$ gleich m , so daß die Dichte $\mathcal{D}(C) = 2 \cot(\theta/2)/m$ ist. Da $\cot(\theta/2) = p$ gilt, erhalten wir die einfache Bedingung $m = 2p$, die in Abb. 3.3 erfüllt ist und die wir auch in allen übrigen Diskretisierungen eingehalten haben.

Observable

Nach häufiger Iteration der Transfermatrix ist die Verteilung $\mathcal{W}(z_1^j, z_2^k)$ stationär unter der in (3.43) angegebenen Rekursionsformel und man erhält $\mathcal{W}'(\{z_1, z_2\}) = \mathcal{W}(\{z_1, z_2\}) \equiv \mathcal{W}_{st}(\{z_1, z_2\})$. Diese stationäre Verteilung ist dann proportional zu dem Grundzustand der Transfermatrix. Erwartungswerte eines beliebigen Operators $A(\{z_1, z_2\})$ können für periodische Randbedingungen dann mit Hilfe von

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{j,k} \mathcal{W}_{st}^2(z_1^j, z_2^k) A(z_1^j, z_2^k)}{\sum_{j,k} \mathcal{W}_{st}^2(z_1^j, z_2^k)} \quad (3.44)$$

berechnet werden. Nach dieser Methode berechnen wir die Erwartungswerte der Fadenabstände $\langle l_{ij} \rangle$ und höhere Momente,

$$\langle l_{ij}^m \rangle^{1/m}, \quad (3.45)$$

als auch die Rauigkeiten

$$\xi_{\perp ij} = \langle (l_{ij} - \langle l_{ij} \rangle)^2 \rangle^{1/2}, \quad (3.46)$$

wobei die Variablen l_{ij} definiert sind als

$$l_{12} \equiv l_1 - l_2 = \sqrt{\frac{\Delta x T (K_1 + K_2)}{K_1 K_2}} z_1 \quad (3.47)$$

und

$$l_{23} \equiv l_2 - l_3 = \sqrt{\frac{\Delta x T (K_2 + K_3)}{K_2 K_3}} (z_2 \sin \theta - z_1 \cos \theta). \quad (3.48)$$

Die freie Energie pro Länge ist bis auf eine Konstante gegeben durch

$$f_0 = -T \ln \mathcal{N} / \Delta x, \quad (3.49)$$

wobei $\mathcal{N}$ der numerische Eigenwert der Transfermatrix ist. Die parallele Korrelationslänge hat dann den Wert

$$\xi_{\parallel} = T / (f_1 - f_0), \quad (3.50)$$

wobei f_1 die freie Energie des untersten angeregten Zustandes ist; im Formalismus der Schrödinger Gleichung entspricht das dem untersten Streuzustand, für den $f_1 = 0$ gilt. In unserem Fall ist diese freie Energie definiert durch $\exp(-\Delta x f_1 / T) = 1 + 4 \exp(-\Delta z^2 / 2) + 4 \exp(-\Delta z^2)$.

Im Verlauf einer Berechnung variieren wir die Potentialtiefen U_{12} und U_{23} von einem hohen Wert, bei dem die Fäden fest zusammen gebunden sind, bis zu einem niedrigen Wert nahe an der Entbindung. Typischerweise berechnen wir die oben definierten Erwartungswerte für 100 Werte der Potentialtiefen, die selber logarithmisch verteilt sind, um einen guten Fit in doppeltlogarithmischer Auftragung zu ermöglichen. In allen Rechnungen setzen wir die Gitterkonstante auf den Wert $\Delta z = 1$. Alle anderen Parameter gehen in die Rechnungen nur über den Winkel des Keiles, θ , die Tiefen und die Reichweiten der Potentialstreifen ein.

Finite-Size Effekte

Finite-Size Effekte kommen in erster Linie ins Spiel durch die endliche Größe des Systems in der (z_1, z_2) -Ebene; die Länge der Fäden ist proportional zu der Anzahl der Iterationen der Transfermatrix und ist natürlich auch beschränkt.

Wir iterieren die Transfermatrix so lange, bis die Verteilung $\mathcal{W}(z_1^j, z_2^k)$ stationär auf mindestens 8 signifikante Stellen ist; dazu werden nahe am Entbindungsübergang bis zu 100000 Iterationen benötigt. Die erhaltene Verteilung entspricht dann in guter Näherung der für unendlich lange Fäden.

Ein subtiler Punkt betrifft den Bereich der Abstandserwartungswerte, der vernünftig skalen sollte. Es ist klar, daß $\langle l_{ij} \rangle > l_{ij}^0$ gelten sollte, ansonsten sind die Fäden noch zu stark gebunden und Korrekturen zum Skalenverhalten sind wichtig. Da $z_{ij}^0 \sim \Delta z$, ist dann auch gewährleistet, daß Diskretisierungseffekte vernachlässigbar sind. Andererseits darf $\langle l_{ij} \rangle$ auch nicht zu groß sein, da sonst die Systemgrenzen relevant sind. Wir bezeichnen $\langle l_{ij} \rangle^{(max)}$ als den Erwartungswert für $U_{ij} = 0$, welcher für ein System mit unendlicher vertikaler Ausdehnung unendlich sein sollte; für ein endliches System ist natürlich auch der maximale Abstand zwischen den Fäden endlich. Um Einflüsse der Diskretisierung und der Systemgrenzen zu minimieren, benutzen wir Daten nur in dem Bereich

$$2l_{ij}^0 < \langle l_{ij} \rangle < \langle l_{ij} \rangle^{(max)} / 5. \quad (3.51)$$

Außerdem ziehen wir von den Abstandserwartungswerten den Wert für unendlich tiefes Potential ab, welcher gegeben ist durch

$$\langle l_{ij} \rangle_{\infty} = l_{ij}^0/2 \quad \text{für } U_{ij} = \infty \quad (3.52)$$

und

$$\xi_{lij}^{\infty} = l_{ij}^0/\sqrt{12} \quad \text{für } U_{ij} = \infty. \quad (3.53)$$

Diese Werte entsprechen einem konstanten Korrekturterm zum Skalenverhalten und sind besonders wichtig für kleine Werte von $\langle l_{ij} \rangle$. Sie werden immer von unseren Daten abgezogen, ohne daß dies extra vermerkt wird.

3.4.1 Das Necklace Modell

Unsere numerische Implementierung der Transfermatrix beinhaltet zwei Näherungen, deren Auswirkungen auf das kritische Verhalten wir in diesem Abschnitt abschätzen wollen: (i) die Einschränkung auf nächste Nachbarn in der Rekursionsformel (3.43), und (ii) die Darstellung des Potentialkeiles auf einem diskretisierten Gitter, wie in Abb. 3.3 gezeigt für $\theta \simeq 53.1^\circ$. Zu diesem Zweck berechnen wir numerisch kritische Exponenten für das Necklace Modell, dessen Exponenten mit den in Abschnitt 3.3 vorgestellten Ergebnissen der zweidimensionalen Schrödingergleichung exakt berechnet werden können.

Das Necklace Modell entspricht der Situation, wo nur zwischen den äußeren Fäden ein kurzreichweitiges attraktives Potential wirkt. Die Fäden spüren ein Potential nur, wenn $l_1 - l_3 < l_{13}^0$ gilt, wobei l_{13}^0 die Reichweite dieser Wechselwirkung ist.[21, 37] In den transformierten Koordinaten entspricht das einem attraktiven Bereich der Tiefe U_{13} in der linken Hälfte von Bereich C, siehe Abb. 3.3, und Potential Null in allen übrigen Bereichen. Die sterische Wechselwirkung zwischen den Fäden wird korrekt behandelt durch die Keilform, die Attraktion zwischen den einzelnen Fäden wird in einer approximativen Art berücksichtigt. Dieses Modell entspricht der in Abschnitt 3.3 gelösten Schrödingergleichung mit verschwindendem Potential in den Rinnen (vergleiche Abb. 3.2(b)).

Wir führen numerische Berechnungen aus für $\theta = \pi, \pi/2, 2 \arctan(1/2)$ und $2 \arctan(1/3)$. In Abb. 3.4 zeigen wir Daten für den Erwartungswert von verschiedenen Momenten des radialen Abstandes von der Keilecke, $r \equiv \sqrt{l_{12}^2 + l_{23}^2}$; hier ist der Winkel gegeben durch $\theta = \pi/2$. Die Momente werden mit einem Potenzgesetz der Form

$$\langle r^m \rangle^{1/m} \sim (U - U_c)^{-\nu_m} \quad (3.54)$$

gefittet, was zu einer Abschätzung der kritischen Potentialtiefe von $U_{13}^c \simeq 1.35$ führt. Die reskalierte Potentialtiefe, $(U_{13} - U_{13}^c)/U_{13}$, variiert dabei über zwei Größenordnungen. Die resultierenden effektiven Exponenten sind $\nu_3 = 0.164 \pm 0.005$, $\nu_4 = 0.251 \pm 0.005$, und $\nu_5 = 0.307 \pm 0.01$.

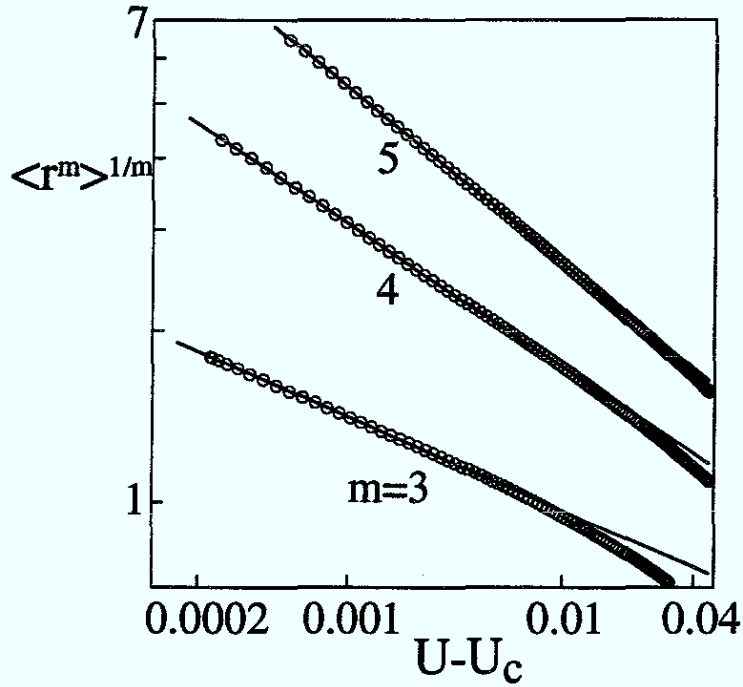


Abbildung 3.4: Transfermatrixergebnisse für das Necklace Modell mit $\theta = \pi/2$. Gezeigt werden Momente des radialen Abstandes, $\langle r^m \rangle^{1/m}$, als Funktion der Potentialtiefe, $U - U_c$, in doppeltlogarithmischer Auftragung.

Mit der in Abschnitt 3.3 hergeleiteten Formel für die Amplitude des langreichweitigen effektiven Potentials für das Necklace Modell, $w = \pi^2/\theta^2 - 1/4$, können wir mit den Beziehungen aus Abschnitt 2.3 das kritische Verhalten und insbesondere die kritischen Exponenten berechnen und erhalten

$$\nu_m = \theta/2\pi \quad (3.55)$$

für $\theta > \pi$ und

$$\nu_m = \frac{1}{m} \left(\frac{m+2}{2} - \frac{\pi}{\theta} \right) \quad (3.56)$$

für $m > 2(\pi/\theta - 1) > 0$. Für die numerisch ermittelten Momente erhalten wir mit diesen Formeln die Vorhersagen $\nu_3 = 1/6$, $\nu_4 = 1/4$, und $\nu_5 = 3/10$. Die numerischen Ergebnisse für alle verwendeten Keilwinkel werden in Abb. 3.5 gezeigt und mit den exakten Ergebnissen, die durch Kurven angedeutet werden, verglichen. Die Übereinstimmung ist sehr befriedigend. Man beachte, daß für $\theta = \pi$ die Grenze zwischen dem Unterregime (B), charakterisiert durch nichtuniverselles kritisches Verhalten mit einer Längenskala, und dem Unterregime (C), mit unendlich vielen Längenskalen, erreicht ist. Im letzteren Unterregime skalieren alle Momente von r mit verschiedenen Exponenten, die durch (3.56) gegeben sind.

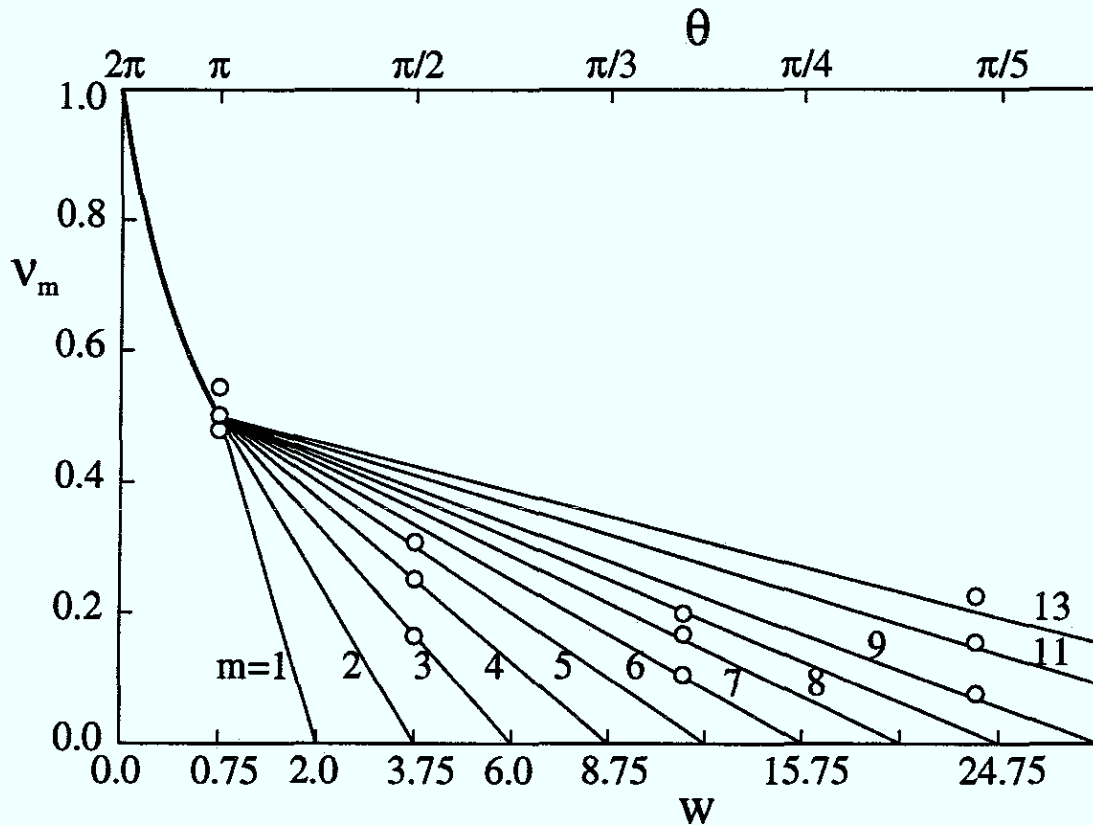


Abbildung 3.5: Vergleich der analytischen Ergebnisse für das Necklace Modell, angedeutet durch Linien, mit den numerischen Resultaten, bezeichnet durch offene Kreise. Gezeigt werden die Exponenten für Momente des radialen Abstandes, $\langle r^m \rangle^{1/m}$, als Funktion von $1/\theta$.

Die gute Übereinstimmung zwischen den analytischen und den numerischen Ergebnissen zeigt, daß der Winkel korrekt durch die Diskretisierung beschrieben wird, und daß die RSOS Näherung auch das nichtuniverselle kritische Verhalten nicht beeinflußt.

3.4.2 Der symmetrische Fall

Der symmetrische Fall ist definiert durch $d_{12}/d_{23} = 1$ und $V_{12}^o = V_{23}^o$, siehe (3.1) und (3.8). Der Hamiltonian (3.38) hängt dann nur noch von dem Keilwinkel θ , der Potentialtiefe

$$U \equiv U_{12} = U_{23}, \quad (3.57)$$

p	Keilwinkel θ	$q = (p^2 - 1)/2$	$z^\circ/\Delta z = 2p/\sqrt{1+p^2}$	U_c
1	$2 \arctan(1) = 90^\circ$	0	$\sqrt{2}$	0.1930
1.5	$2 \arctan(2/3) \simeq 67.38^\circ$	0.625	1.6641	0.1543
2	$2 \arctan(1/2) \simeq 53.13^\circ$	1.5	1.7889	0.1395
3	$2 \arctan(1/3) \simeq 36.87^\circ$	4	1.8974	0.1273
4	$2 \arctan(1/4) \simeq 28.07^\circ$	7.5	1.9401	0.1223
6	$2 \arctan(1/6) \simeq 18.92^\circ$	17.5	1.9723	0.1178
8	$2 \arctan(1/8) \simeq 14.25^\circ$	31.5	1.9846	0.1158
10	$2 \arctan(1/10) \simeq 11.42^\circ$	49.5	1.9899	0.1147
12	$2 \arctan(1/12) \simeq 9.53^\circ$	71.5	1.9937	0.1140

Tabelle 3.1: Aufstellung aller symmetrischen Drei-Fadensysteme, die wir mit Transfermatrix Methoden studiert haben, definiert durch Diskretisierungsparameter p , Keilwinkel θ , Fadenspannungsverhältnis $q = K_1/K_2$ und Dicke z° der Potentialstreifen in Einheiten der Gitterkonstanten Δz . In Abb. 3.3 wird die Diskretisierung für das dritte System mit $p = 2$ gezeigt, bei dem die äußeren Fäden $3/2$ mal flexibler als der innere Faden sind. Die letzte Spalte zeigt die kritische Potentialtiefe U_c .

und der Dicke der Potentialstreifen in reskalierten Einheiten

$$z^\circ \equiv z_{12}^\circ = z_{23}^\circ, \quad (3.58)$$

ab, siehe (3.39-3.41). Wir beschränken uns in unserer Redeweise auf den Fall $K_1 = K_3 = qK_2$ mit $l_{12}^\circ = l_{23}^\circ$, der Keilwinkel ist gegeben durch $\theta = \arctan \sqrt{2/q + 1/q^2}$; die Resultate haben aber Gültigkeit für den allgemeineren Fall $\sqrt{K_1(K_2 + K_3)}l_{12}^\circ = \sqrt{K_3(K_2 + K_1)}l_{23}^\circ$. Der mittlere Fadenabstand ist nun gegeben durch

$$\langle l \rangle \equiv \langle l_{12} \rangle / 2 + \langle l_{23} \rangle / 2, \quad (3.59)$$

wobei wir immer kontrollieren, daß $\langle l_{12} \rangle = \langle l_{23} \rangle$ tatsächlich erfüllt ist. Die gleiche Symmetrie gilt auch für alle anderen Längenskalen.

Tabelle 3.1 gibt eine Zusammenstellung aller symmetrischen, auf einem Quadratgitter diskretisierten Systeme, die mit der Transfermatrixmethode untersucht wurden. Der Diskretisierungsparameter p bestimmt den Keilwinkel über $\cot(\theta/2) = p$ und hängt über $q = (p^2 - 1)/2$ mit dem Fadenspannungsverhältnis zusammen. Nur ein diskretes Spektrum von Keilwinkeln ist mit dem in Abb. 3.3 gezeigten Diskretisierungsschema erreichbar. Um den wichtigen Fall $\theta = \pi/3$ zu studieren, der einem System aus drei identischen Fäden entspricht, benutzen wir eine andere Diskretisierung auf einem triangularen Gitter (Abschnitt 3.6.2).

Kritische Exponenten

In den Abbildungen 3.6(a) und 3.7(a) zeigen wir Daten für $q = 0$ und $q = 31.5$. Die Fadenabstände werden immer in Einheiten von l^0 gemessen. Die Ergebnisse für $\langle l \rangle$, $\xi_{\perp} = (\langle (l - \langle l \rangle)^2 \rangle)^{1/2}$, und $\xi_{\parallel} = (f_1/T + \ln \mathcal{N}/\Delta x)^{-1}$ werden in doppeltlogarithmischer Auftragung als Funktion von $U - U_c$ gezeigt. Dazu fitten wir gleichzeitig alle Größen an das Potenzgesetz

$$\langle l \rangle \sim (U - U_c)^{-\psi}, \quad (3.60)$$

und analog für $\xi_{\perp}$ und $\xi_{\parallel}$, wobei wir die Levenberg-Marquardt Methode für einen Drei-Parameter-Fit einsetzen.[85] Die Daten für $\langle l \rangle$ und $\xi_{\perp}$ skalen in der gleichen Weise, und man erhält $\psi = 1.01 \pm 0.02$ und $\nu_{\perp} = 0.99 \pm 0.02$ für $\theta = \pi/2$, Abb. 3.6(a), und $\psi = 0.71 \pm 0.02$ und $\nu_{\perp} = 0.71 \pm 0.02$ für $\theta = 14.25$, Abb. 3.7(a). Die Daten für $\theta = \pi/2$, hier entspricht der mittlere Faden einer harten Wand, sind in guter Übereinstimmung mit dem exakten Resultat $\psi = \nu_{\perp} = 1$. Die Ergebnisse für $\theta = 14.25$, hier ist der mittlere Faden 31.5 mal flexibler als die äußeren Fäden, zeigen, daß $\psi \simeq \nu_{\perp}$ und also Skalenverhalten mit einer Längenskala vorliegt; jedoch weicht der erhaltene Exponent deutlich von dem universellen Wert $\psi = 1$ ab. Die Daten für $\xi_{\parallel}$ bestätigen, daß der Rauigkeitsexponent $\zeta = 1/2$ ist innerhalb eines Fehlers von 5 %. Durch die maximale Systemgröße sind die Daten auf etwa eine halbe Größenordnung in $\langle l \rangle$ beschränkt. Für den Fall drei gleicher Fäden konnten wir den zulässigen Bereich in $\langle l \rangle$ auf über eine Größenordnung erhöhen. Diese Daten werden in Abschnitt 3.6.2 präsentiert.

In Abb. 3.8 zeigen wir unsere Ergebnisse für die Exponenten ψ und $\nu_{\perp}$ als Funktion des Keilwinkels θ . Für alle Winkel gilt $\psi = \nu_{\perp} \pm 0.03$. Der numerische Fehler sollte ungefähr in dieser Größenordnung liegen. Die Exponenten hängen monoton vom Winkel θ , also von der relativen Steifigkeit des inneren Fadens, ab. Dies ist analog zu dem sogenannten Unterregime (B) des intermediären Fluktuationsregimes für die Entbindung von zwei Fäden. In diesem Fall wirkt zwischen den beiden Fäden ein abstoßendes Potential proportional zum inversen Abstandsquadrat; dabei wird eine ähnliche Nichtuniversalität als Funktion der Amplitude w des abstoßenden Potentials beobachtet (siehe Abschnitt 2.3).

Durch folgende Skalenüberlegung kann diese Analogie verständlich gemacht werden: In dem Fall dreier Fäden wird der Bewegungsfreiraum des inneren Fadens durch die Anwesenheit der äußeren Fäden eingeschränkt, da sich die Fäden nicht durchdringen können. In Abschnitt 2.2.5 wurde der Entropieverlust eines Fadens bei vertikaler Einschränkung der Fluktuationen auf eine Breite von d zu $\sim 1/d^2$ bestimmt; dabei wurde offengelassen, durch was diese Einschränkung bewirkt wird. Sie könnte durch ein Potential, durch harte Wände, aber auch durch benachbarte Fäden hervorgerufen werden. Für drei Fäden mit Wechselwirkung nur zwischen den beiden äußeren Fäden, kann dieser Entropieverlust exakt berechnet werden; dies entspricht gerade dem Necklace Modell. Für das realistische Modell mit Paarwechselwirkun-

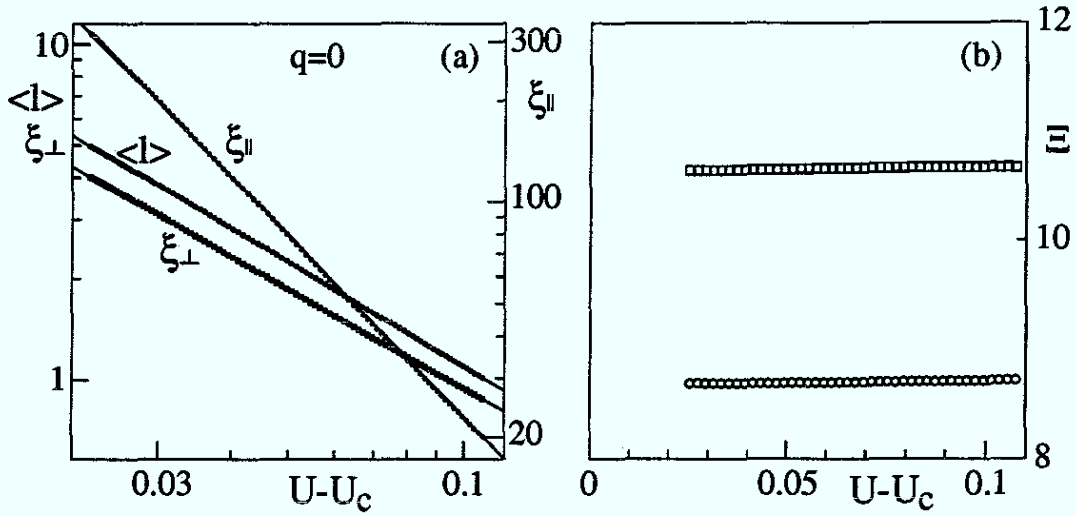


Abbildung 3.6: Transfermatrixergebnisse für den Fall $K_2 = \infty$ und $K_1 = K_3$, ($q = 0$ und $\theta = \pi/2$). (a) In einem Log-Log Plot skalen Daten für die parallele Korrelationslänge wie $\xi_{\parallel} \sim (U - U_c)^{-\nu_{\parallel}}$ mit $\nu_{\parallel} = 1.8 \pm 0.2$. Der mittlere Abstand geht wie $\langle l \rangle \sim (U - U_c)^{-\psi}$ mit $\psi = 1.01 \pm 0.02$, und die senkrechte Korrelationslänge geht wie $\xi_{\perp} \sim (U - U_c)^{-\nu_{\perp}}$ mit $\nu_{\perp} = 0.99 \pm 0.02$. (b) Die Differenzfunktion Ξ für $\langle l \rangle$, ($\circ$), und $\xi_{\perp}$, ($\square$), mit $\gamma' = 1$.

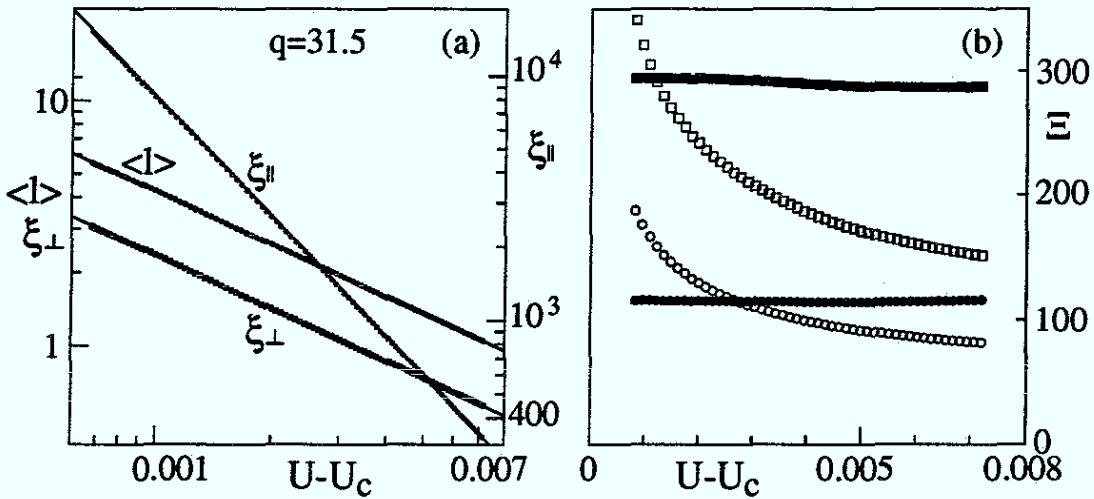


Abbildung 3.7: Transfermatrixergebnisse für den Fall $K_1/K_2 = K_3/K_2 = 31.5$ oder $\theta = 14.25^\circ$. (a) Daten für die parallele Korrelationslänge skalieren wie $\xi_{\parallel} \sim (U - U_c)^{-\nu_{\parallel}}$ mit $\nu_{\parallel} = 1.6 \pm 0.2$. Der mittlere Abstand geht wie $\langle l \rangle \sim (U - U_c)^{-\psi}$ mit $\psi = 0.707 \pm 0.02$ und die senkrechte Korrelationslänge wie $\xi_{\perp} \sim (U - U_c)^{-\nu_{\perp}}$ mit $\nu_{\perp} = 0.71 \pm 0.02$. (b) Die Differenzfunktion Ξ für $\langle l \rangle$ mit $\gamma' = 1$, ($\circ$), und $\gamma' = 0.71$, ($\bullet$), und für $\xi_{\perp}$ mit $\gamma' = 1$, ($\square$), und $\gamma' = 0.712$, ($\blacksquare$).

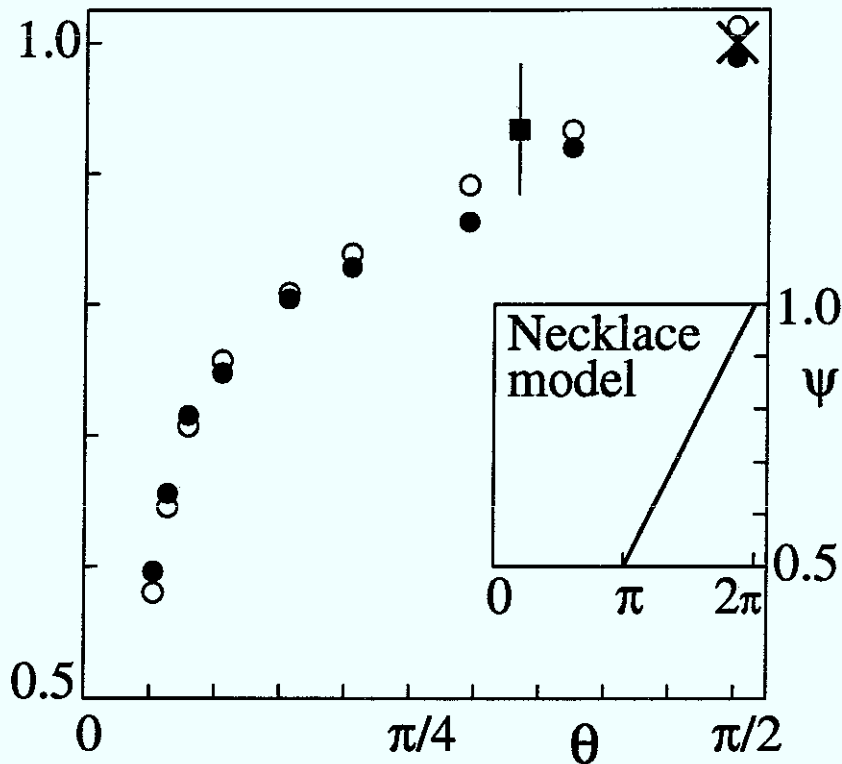


Abbildung 3.8: Die kritischen Exponenten ψ (offene Symbole) und $\nu_{\perp}$ (geschlossene Symbole) als Funktion des Keilwinkels θ . Das Quadrat bezeichnet das Monte Carlo Resultat für $\nu_{\perp}$ für den Fall $K_1 = K_2 = K_3$, die Kreise stehen für Transfermatrix Ergebnisse. Das Kreuz entspricht dem exakten Ergebnis für $\theta = \pi/2$, nämlich $\psi = \nu_{\perp} = 1$. Die kleine Teilfigur zeigt die Vorhersagen des Necklace Modells für $\psi = \nu_{\perp}$, welches Entbindungsübergänge erster Ordnung für $\theta < \pi$ vorhersagt.

gen zwischen allen benachbarten Fäden könnte der gleiche Mechanismus, natürlich modifiziert durch die Wechselwirkung des mittleren Fadens mit den beiden äußeren Fäden, auch zu einer langreichweitigen Abstoßung der beiden äußeren Fäden führen. Dies würde die numerisch beobachtete Nichtuniversalität der Exponenten in Abhängigkeit von θ erklären.

Auf der anderen Seite ist es nicht ausgeschlossen, daß das asymptotische kritische Verhalten, also das Verhalten für $U - U_c \rightarrow 0_+$, universell ist, wie inzwischen von einigen analytischen Rechnungen verwandter Modelle nahegelegt wird; diese Frage wird in Abschnitt 3.7 behandelt.

Die kleine Teilfigur in Abb. 3.8 zeigt den Exponenten $\psi = \nu_{\perp}$ für das Necklace Modell. Hier gibt es eine lineare Abhängigkeit der Exponenten von dem Keilwinkel für $\theta > \pi$. Man beachte, daß der größte erreichbare Winkel für den Fall dreier Fäden für $K_2 = \infty$ gegeben ist und $\theta = \pi/2$ beträgt. Für $\theta < \pi$ erhält man mit dem

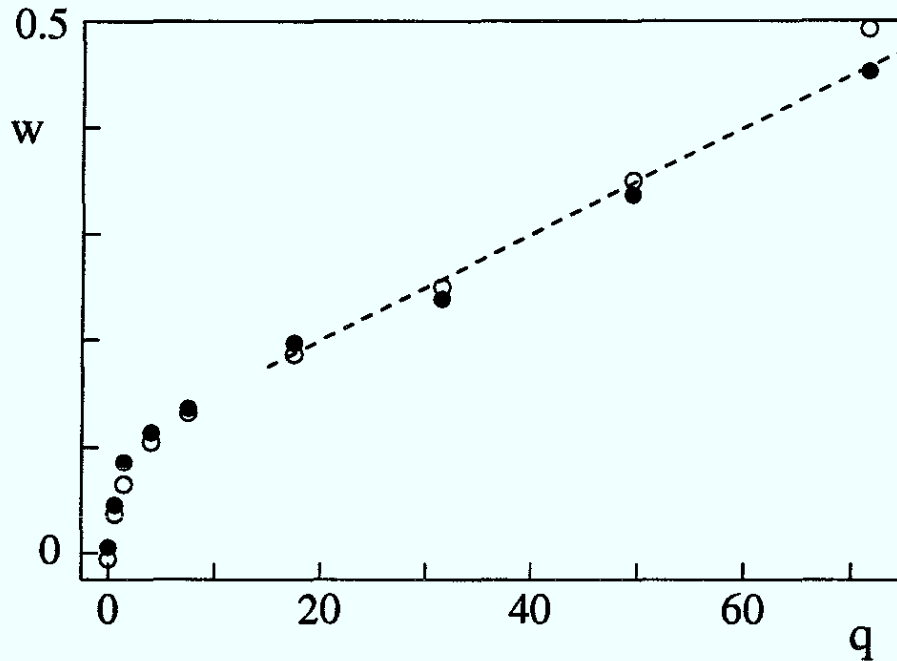


Abbildung 3.9: Die effektive Amplitude w der fluktuationsinduzierten, repulsiven Wechselwirkung, die aus den Exponenten ψ (○) und $\nu_{\perp}$ (●) berechnet wurde, als Funktion des Fadenspannungsverhältnisses $q = K_1/K_2 = K_3/K_2$. Eine lineare Extrapolation für große q liefert die Vorhersage $q(w = 0.75) \approx 130$, was der Grenze zwischen Unterregime (B) und (C) entspricht.

Necklace Modell das Unterregime (C) mit Entbindungsübergängen erster Ordnung und multiplem Skalenverhalten, vgl. Abschnitt 3.4.1. Insbesondere für $\pi/2$, den exakt lösbaren Fall mit universellem Verhalten, sagt das Necklace Modell einen stark diskontinuierlichen Entbindungsübergang voraus. Diese starken Abweichungen des Necklace Modells kommen durch die Vernachlässigung der Paarwechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn. Diese Wechselwirkungen kompensieren den Entropieverlust durch die vertikale Einschränkung der Fluktuationen des mittleren Fadens weitgehend, wie aus der nur schwachen Abhängigkeit der numerisch ermittelten effektiven Exponenten von dem Winkel θ erkennbar ist.

Aus den ermittelten Exponenten ψ und $\nu_{\perp}$ kann die reduzierte Amplitude w des effektiven abstoßenden Potentials zwischen den äußeren Fäden berechnet werden, siehe Abschnitt 2.3. Die Ergebnisse für $w = 1/(4\psi)^2 - 1/4$ (offene Kreise) und $w = 1/(4\nu_{\perp})^2 - 1/4$ (gefüllte Kreise) sind in Abb. 3.9 über dem Linienspannungsverhältnis q aufgetragen. Für große Werte von q kann man die Daten linear extrapolieren und erhält für die Grenze zwischen Unterregime (B) und (C), bei der $w = 3/4$ ist, die Abschätzung $q \approx 130$. Erst wenn der mittlere Faden ungefähr 130 mal flexibler als die äußeren Fäden ist, erhält man also für das Unterregime

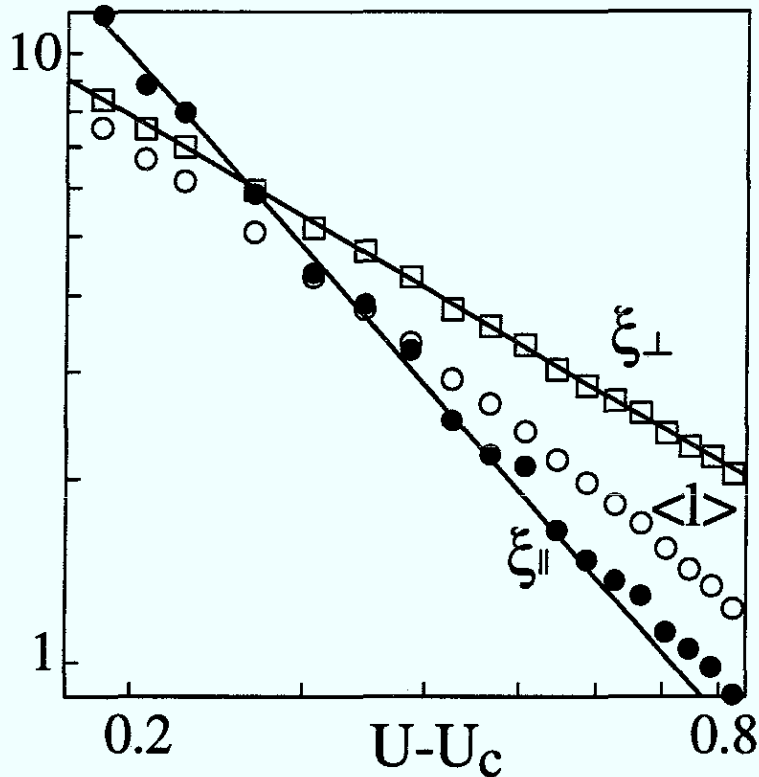


Abbildung 3.10: Monte Carlo Ergebnisse für $q = 1$. Die senkrechte Korrelationslänge ($\square$) divergiert mit $\nu_{\perp} = 0.93 \pm 0.05$, die parallele Korrelationslänge ($\bullet$) divergiert mit $\nu_{\parallel} = 1.8 \pm 0.2$. Der mittlere Abstand $\langle l \rangle$ ($\circ$) skaliert wie die senkrechte Korrelationslänge genügend nahe am Übergang.

(C) charakteristische Phasenübergänge erster Ordnung. Als Konsequenz werden Entbindungen von Fäden mit kurzreichweitigen Potentialen typischerweise kontinuierlich verlaufen. Im Vergleich zu den Transfer Matrix Ergebnissen in Abb. 3.9 sagt das Necklace Modell für den Fall $q = 0$ eine Amplitude von $w = 3.75$ voraus.

Die numerische Lösung des Drei-Faden Problems mit kurzreichweitigen attraktiven Wechselwirkungen zwischen den beiden nächsten Nachbarn ergibt also effektive kritische Exponenten, die nur schwach von dem universellen Wert der Entbindung von zwei Fäden abweichen. Ein Vergleich mit dem Necklace Modell, in dem nur die attraktive Wechselwirkung zwischen den äußeren Fäden berücksichtigt wird, zeigt, daß die Attraktion zwischen Nachbarn wichtig ist und den Entropieverlust durch sterische Wechselwirkungen nahezu kompensiert.

Monte Carlo Simulation

Zusätzlich zu den Transfermatrix Berechnungen zeigen wir hier die Ergebnisse einer Monte Carlo Simulationsreihe für $q = 1$, also für drei identische Fäden. Die Länge der Fäden ist dabei auf 500 diskrete Gitterpunkte beschränkt, wobei periodische Randbedingungen eingesetzt werden. Der verwendete Monte Carlo Algorithmus entspricht einem Standard single-site-move Metropolis Schema.[6] Im Unterschied zu den Transfer-Matrix Berechnungen werden hier die Abstandsvariablen als kontinuierliche Felder behandelt. Die Reichweite des reduzierten Potentials ist $z^\circ = \sqrt{5/100}$. Abb. 3.10 zeigt die Resultate für $\langle l \rangle$, $\xi_\perp$ und $\xi_\parallel$, wobei wir immer über 10^7 Monte Carlo Schritte gemittelte Ergebnisse zeigen. Der statistische Fehler ist dann kleiner als 5 %. Die Skalenrelation $\xi_\perp \sim \langle l \rangle$ ist gut erst für große Werte von $\langle l \rangle$ erfüllt. Der gefittete Exponent für die senkrechte Korrelationslänge ist $\nu_\perp = 0.93 \pm 0.05$. Die parallele Korrelationslänge divergiert mit $\nu_\parallel = 1.8 \pm 0.2$, was einen Rauigkeitsexponenten von $\zeta = 0.52 \pm 0.06$ ergibt. Der Wert für $\nu_\perp$ ist in Abb. 3.8 eingetragen und stimmt gut mit den Transfermatrix Ergebnissen überein.

Kritische Potentialtiefen

Eine wichtige Frage betrifft den Wert der kritischen Potentialtiefe U_c in Abhängigkeit von dem Keilwinkel. In der letzten Spalte von Tabelle 3.1 sind die kritischen Potentialtiefen für alle untersuchten Systeme aufgeführt. Natürlich liegt eine zusätzliche nichttriviale Abhängigkeit von der Potentialstreifenbreite z° vor, die der Winkelabhängigkeit überlagert ist. Um die Einflüsse von z° und θ auf U_c zu trennen, vergleichen wir die Werte von U_c aus Tabelle 3.1 mit Werten für eindimensionale Systeme für $z^\circ = 1, 2$ und 3 .

Wie in der Einführung besprochen, entspricht das eindimensionale System dem Fall zweier wechselwirkender Fäden, oder dem Fall eines mit einer harten Wand wechselwirkenden Fadens nach Abspaltung der Schwerpunktkoordinate. Diese Systeme entsprechen dem zweidimensionalen Hamiltonian mit $\theta = \pi/2$, der sich in zwei eindimensionale Teile aufspalten läßt. Wir konnten das eindimensionale Problem in der RSOS Näherung für die drei Werte der Reichweite exakt lösen (siehe Appendix C) und erhielten auch sehr genaue numerische Ergebnisse. Die Übereinstimmung zwischen beiden Rechenmethoden ist sehr gut.

In Abb. 3.11 zeigen wir die exakten Werte (Kreuze) und die numerischen eindimensionalen Ergebnisse (gefüllte Kreise) für U_c als Funktion von der Potentialreichweite z° . Die gestrichelte Linie interpoliert zwischen den eindimensionalen Ergebnissen. Die Resultate für den zweidimensionalen Potentialkeil sind durch offene Kreise bezeichnet. Für große Winkel liegen die Potentialreichweiten z° durch die Diskretisierung bestimmt relativ weit auseinander. Für kleine Winkel streben sie gegen $z^\circ = 2$ und liegen in Abb. 3.11 dicht gehäuft. Die Abweichungen der zweidimensionalen Ergebnisse von der Interpolationskurve für das eindimensionale Problem

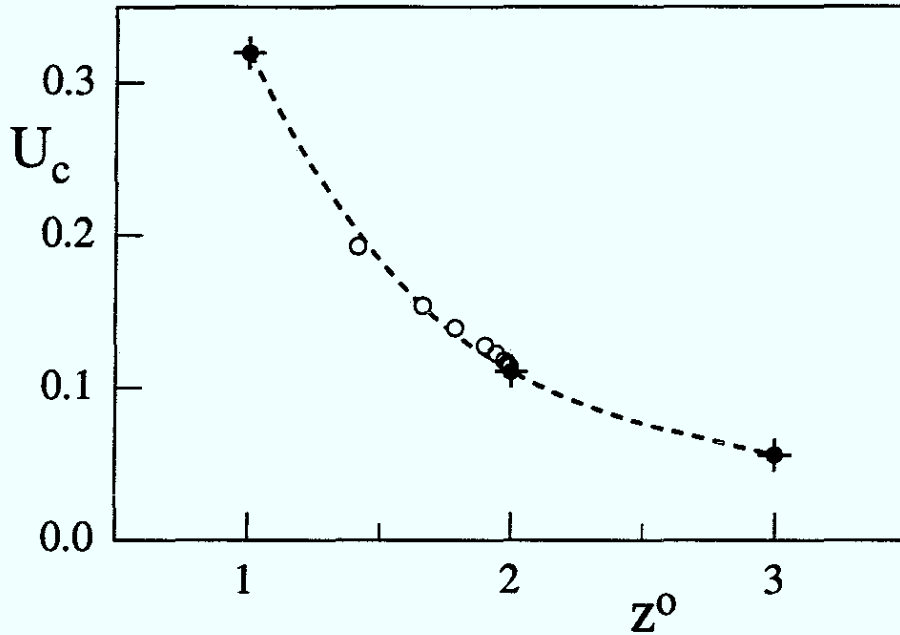


Abbildung 3.11: Die kritische Potentialtiefe U_c als Funktion von der Potentialreichweite z^0 . Resultate der zweidimensionalen Transfermatrix (o) liegen gut auf der Interpolationskurve durch analytische (+) und numerische (•) Ergebnisse der eindimensionalen Transfermatrix.

(oder, äquivalent, für das zweidimensionale System mit festgehaltenem Keilwinkel $\theta = \pi/2$) sind ziemlich klein und wahrscheinlich durch Crossover-Phänomene verursacht. Von den Daten ausgehend ist damit innerhalb der numerischen Ungenauigkeit keine Abhängigkeit der kritischen Potentialtiefe von dem Winkel feststellbar. Die beobachtete Variation von unseren U_c Werten ist also allein durch die Variation der Potentialreichweite bedingt.

Das bedeutet insbesondere, daß zwei Fäden mit Linienspannung K bei der gleichen Potentialtiefe entbinden wie drei identische Fäden mit den gleichen Linienspannungen. Das kann einfach eingesehen werden dadurch, daß drei Fäden und zwei Fäden nach Subtraktion der Schwerpunktkoordinate die gleiche Potentialreichweite in den reskalierten Einheiten haben, nämlich $z^0 = l^0 \sqrt{K/2\Delta x T}$. Dieses Ergebnis werden wir in Abschnitt 3.6.2 auf den Fall von vier Fäden erweitern; tatsächlich scheint die kritische Potentialtiefe ganz generell unabhängig von der Anzahl der wechselwirkenden Fäden zu sein.

Eine andere Fragestellung ist, wie U_c von q abhängt, wenn man die äußeren Fadenspannungen konstant hält. Im Kontinuums limites ($\Delta x \rightarrow 0$) ist der einzige verbleibende Parameter für die Entbindung zweier Fäden mit Spannungen K_1 und

K_2 gegeben durch

$$v = \frac{2V^o K_1 K_2}{(K_1 + K_2)} \left(\frac{l^o}{T} \right)^2, \quad (3.61)$$

die Entbindung findet bei $v_c = \pi^2/4$ statt. Mit $q = K_1/K_2$ folgt für die kritische Potentialstärke V_c^o

$$V_c^o = (q + 1)\pi^2 T^2 / 8K_1 (l^o)^2, \quad (3.62)$$

was auch für die Entbindung von drei Fäden mit $K_1 = K_3$ Gültigkeit besitzen sollte. Für $q = 0$ erhält man trivialerweise das Resultat von einem Faden an einer Wand. Ansonsten steigt die kritische Potentialstärke linear mit q an; dies entspricht dem Effekt der Fluktuationen des mittleren Fadens, die die äußeren Fäden auseinander treiben.

3.4.3 Asymptotische Datenanalyse

Hier stellen wir eine sehr effektive Methode vor, mit der wir unsere numerischen Daten bei der Annäherung an den Entbindungsübergang auf eventuelle Crossover-Phänomene untersuchen können. Dazu betrachtet man die folgendermaßen definierte Differenzfunktion:

$$\Xi[F(U), \gamma'] \equiv \frac{F(U + \Delta U)^{-1/\gamma'} - F(U)^{-1/\gamma'}}{\Delta U}. \quad (3.63)$$

Wenn die Funktion $F(U)$ die Form

$$F(U) \approx a(U - U_c)^{-\gamma} \quad (3.64)$$

hat, erhalten wir für kleine Werte von $\Delta U/(U - U_c)$

$$\Xi \approx \frac{\gamma}{\gamma'} (U - U_c)^{\gamma/\gamma' - 1} a^{-1/\gamma'}. \quad (3.65)$$

Für $\gamma/\gamma' = 1$ reduziert sich dieser Ausdruck auf $\Xi \approx a^{-1/\gamma'}$, ergibt also eine Konstante. Für $\gamma/\gamma' < 1$ divergiert die Differenzfunktion Ξ wenn U nach U_c geht; für $\gamma/\gamma' > 1$ geht die Differenzfunktion Ξ gegen Null wenn U nach U_c geht. Es ist offensichtlich, daß Ξ nützlich ist, um effektive kritische Exponenten zu bestimmen, da für $\gamma = \gamma'$ der Parameter U_c wegfällt. Die Existenz von Crossover-Effekten in den effektiven Exponenten für $U \rightarrow U_c$ kann aus dem Verhalten der Differenzfunktion als Funktion von U gefolgert werden: Ist die Krümmung von Ξ positiv oder negativ, hat man $\gamma < \gamma'$ oder $\gamma > \gamma'$.

In den Abbildungen 3.6(b) und 3.7(b) zeigen wir die Differenzfunktion Ξ für die Winkel $\theta = \pi/2$ und $\theta = 14.25^\circ$. Die Differenzfunktion wird dabei immer für direkt benachbarte Datenpaare berechnet. Offene Symbole bezeichnen Daten mit $\gamma' = 1$; in

Abb. 3.6(b) sind die Differenzfunktionen für $\langle l \rangle$ (Kreise) und $\xi_{\perp}$ (Quadrate) gerade Linien für die erreichbaren Längenskalen, was zeigt, daß tatsächlich $\psi = \nu_{\perp} = 1$. In Abb. 3.7(b) divergieren die Differenzfunktionen mit $\gamma' = 1$ für $U - U_c \rightarrow 0$; dies zeigt, daß der kritische Exponent kleiner als eins ist. Die gefüllten Symbole bezeichnen $\Xi[\langle l \rangle, \psi]$ (Kreise) und $\Xi[\xi_{\perp}, \nu_{\perp}]$ (Quadrate), nun mit den Exponenten $\psi = 0.71$ und $\nu_{\perp} = 0.71$, die wir durch das Fitten erhalten haben. Wieder erhalten wir gerade Linien, was zeigt, daß kein systematischer Trend zu größeren (universellen) Exponenten in dem Datenbereich, den wir betrachten können, vorliegt.

Wenn die Funktion folgendermaßen definiert ist,

$$F(U) \approx a (U - U_c)^{-\gamma} + b, \quad (3.66)$$

also eine zusätzliche Konstante enthält, erhalten wir wieder für kleine Werte von $\Delta U / (U - U_c)$ und für $\gamma' = \gamma$

$$\Xi \approx a^{-1/\gamma} - \frac{\gamma + 1}{\gamma} (U - U_c)^{\gamma} b^{-1/\gamma}. \quad (3.67)$$

Eine zusätzliche Konstante b in den Daten hat also eine deutliche Signatur und kann somit von einem abweichenden Exponenten, $\gamma' \neq \gamma$, unterschieden werden.

3.4.4 Der unsymmetrische Fall

Wir betrachten nun unsymmetrische Fadensysteme, für die $K_1 \neq K_3$ gilt, wobei die limitierenden Fälle $K_1 = \infty$ und $K_3 = \infty$ mit eingeschlossen sind. Die Linienspannungen bestimmen das Dickenverhältnis der Potentialstreifen, d_{12}/d_{23} , und den Keilwinkel θ nur über die Verhältnisse q_1 und q_3 , siehe (3.7) und (3.9). Das kritische Verhalten des Drei-Faden-Systems ist also durch die beiden Linienspannungsverhältnisse vollständig parametrisiert.

In Abb. 3.12 zeigen wir, wie sich das System von drei Fäden, parametrisiert durch q_1 und q_3 , in dem viel allgemeineren Parameterraum des Potentialkeiles, bestimmt durch d_{12}/d_{23} und θ , darstellen läßt. Mit den reskalierten Versionen der Linienspannungsverhältnisse,

$$Q_1 \equiv \frac{q_1}{q_1 + 1} = \frac{1}{1 + K_2/K_1} \quad Q_3 \equiv \frac{q_3}{q_3 + 1} = \frac{1}{1 + K_2/K_3}, \quad (3.68)$$

lassen sich die beiden Parameterräume für $l_{12}^o = l_{23}^o$ wie folgt verknüpfen:

$$\frac{Q_3}{Q_1 + Q_3} = \frac{1}{(d_{12}/d_{23})^2 + 1} \quad (3.69)$$

und

$$Q_1 Q_3 = \cos^2 \theta. \quad (3.70)$$

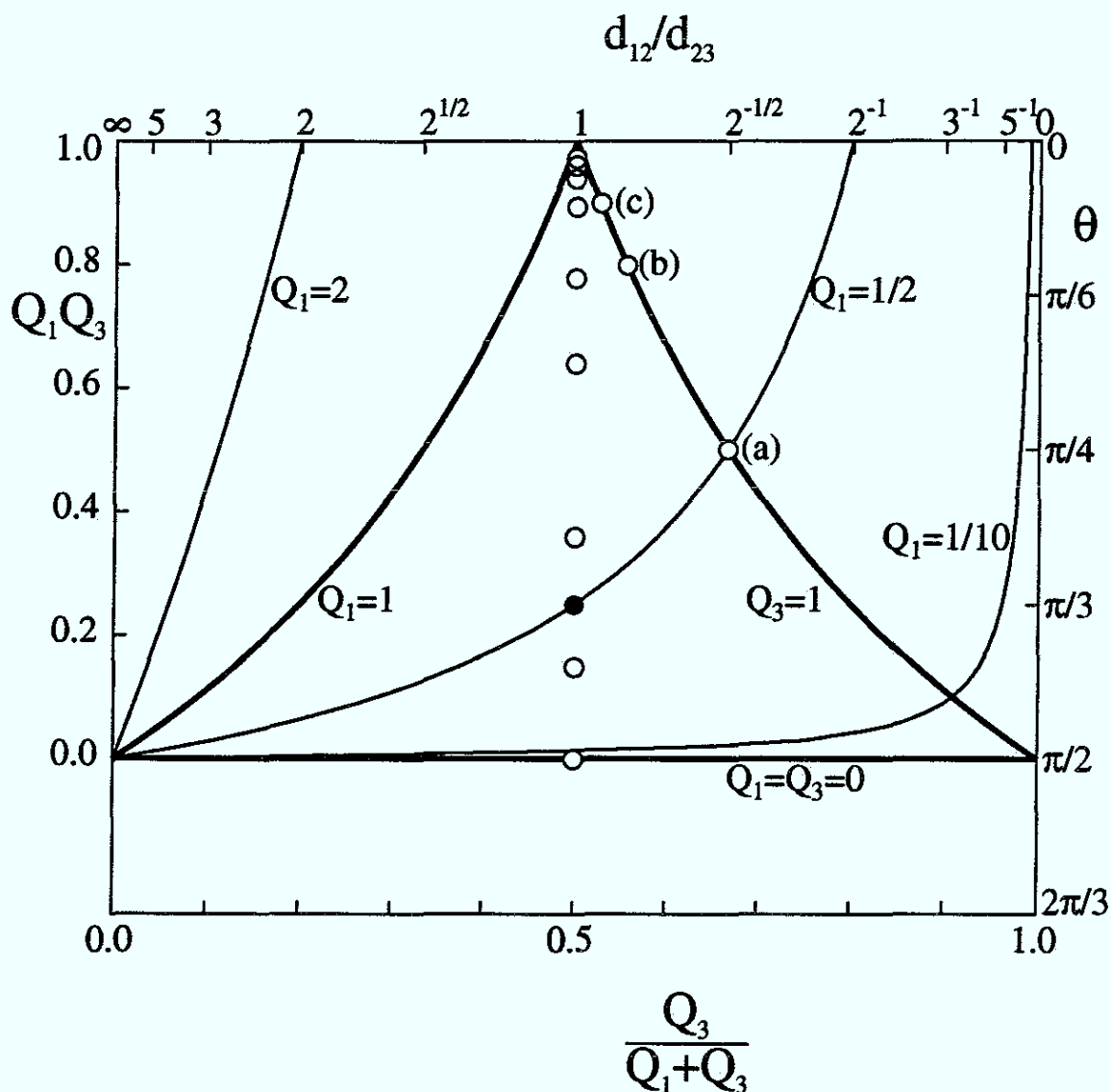


Abbildung 3.12: Parameterraum für einen Faden in einem (1+2)-dimensionalen Keil mit Öffnungswinkel θ und Potentialstreifen an den Wänden, die ein Dickenverhältnis d_{12}/d_{23} haben. Die verschiedenen Linien entsprechen konstanten Werten der Parameter q_1 oder q_3 , die das Drei-Faden Problem charakterisieren. Die Kreise bezeichnen Parameter der Transfermatrix (offen) und der Monte Carlo Rechnungen (gefüllt). Die dicken Linien mit $Q_1 = 1$, $Q_1 = Q_3 = 0$ und $Q_3 = 1$ geben die Grenzfälle für drei Fäden in zwei Dimensionen an, bei denen jeweils einer der drei Fäden unendlich steif ist, also $K_1 = \infty$, $K_2 = \infty$ oder $K_3 = \infty$. Die vertikale Linie mit $d_{12}/d_{23} = 1$ bezeichnet symmetrische Bündel mit $K_1 = K_3$, wo alle drei Fäden gleichzeitig entbinden. Seitlich dieser Symmetrielinie entbinden die äußeren Fäden bei unterschiedlichen Werten der Potentialtiefe, $U_{12}^c \neq U_{23}^c$. Die Parameterwerte der mit (a), (b) und (c) bezeichneten unsymmetrischen Systeme sind in Tabelle 3.2 aufgeführt.

Die verschiedenen Linien in Abb. 3.12 bezeichnen Linien auf denen entweder q_1 oder q_3 eine Konstante ist. Die drei dicken Linien bezeichnen $q_1 = \infty (Q_1 = 1)$, $q_3 = \infty (Q_3 = 1)$ und $q_1 = q_3 = 0 (Q_1 = Q_3 = 0)$; diese Parameterwerte entsprechen den limitierenden Fällen des Drei-Faden-Problems, in denen jeweils einer der drei Fäden unendlich steif ist und einer harten Wand entspricht.

Offensichtlich ist nur der Bereich innerhalb der drei dicken Linien erreichbar, wenn man mit drei Fäden startet. Um diesen Bereich zu verlassen, muß man mindestens eine der Fadenspannungen negativ wählen, was physikalisch nicht sinnvoll ist. Nichtsdestoweniger entspricht dieser Bereich einem wohldefinierten physikalischen Problem, nämlich dem der Entbindung eines Fadens aus einem dreidimensionalen Keil mit Öffnungswinkel θ und Potentialstreifen an den Wänden, die im Dickenverhältnis d_{12}/d_{23} zueinander stehen. Daraus folgt, daß die Grenzen des Bereichs für die Entbindung von drei Fäden in $(1 + 1)$ Dimensionen in keiner Weise singular oder speziell sind. Die Parameterwerte, für die wir Transfermatrix Rechnungen durchführten, sind durch offene Kreise bezeichnet, die Monte Carlo Simulation durch einen gefüllten Kreis. Die meisten TM Rechnungen entsprechen dem symmetrischen Fall, also einem Potentialkeil mit $d_{12}/d_{23} = 1$.

Die dicke horizontale Linie mit $Q_1 = Q_3 = 0$ repräsentiert alle Systeme mit $K_2 = \infty$, wo also der mittlere Faden einer harten Wand entspricht. Wie bereits erwähnt, separiert hier der Hamiltonian in den beiden Abstandskoordinaten, und das Problem läßt sich exakt lösen. Als Ergebnis entbinden dann die beiden Fäden bei verschiedenen Potentialtiefen, sobald $K_1 \neq K_3$. Um dieses Ergebnis zu präzisieren, bezeichnet man die kritischen Potentialtiefen des oberen und unteren Fadens durch U_{12}^c und U_{23}^c . Mit den im Anhang A.2 hergeleiteten exakten Ergebnissen für das Zwei-Faden-Problem erhält man für das Verhältnis im Kontinuumslimites und für $K_2 = \infty$

$$\frac{U_{23}^c}{U_{12}^c} = \frac{d_{12}^2}{d_{23}^2}. \quad (3.71)$$

Nur für $d_{12}/d_{23} = 1$ entbinden die Fäden gleichzeitig.

Für $K_2 \neq \infty$ führten wir drei Berechnungen für unsymmetrische Systeme durch, bei denen zwei Fäden von einer harten Wand entbinden; die Spezifikationen sind in Tabelle 3.2 aufgelistet. Die Diskretisierung für Fall (a) ist in Abb. 3.13 gezeigt. Hier entbinden zwei gleiche Fäden von einer harten Wand, also $q_1 = 1$. Dabei sind die gemessenen Exponenten $\psi_{12} = 1.01 \pm 0.01$ für die erste Entbindung bei $U_{12}^c = 0.441$ und $\psi_{23} = 1.1 \pm 0.1$ für die zweite Entbindung bei $U_{23}^c = 0.316$. Daten für $\langle l_{12} \rangle$ und $\langle l_{23} \rangle$ werden in Abb. 3.14 zusammen mit den gefitteten Kurven gezeigt. Die Daten für $\langle l_{23} \rangle$ sind stark von der Größe des Systems abhängig. Dies ist verständlich, da zwischen U_{12}^c und U_{23}^c die Verteilung in der unteren Region B in Abb. 3.13 lokalisiert ist und daher die endliche Größe des Systems spürt. Da der obere Faden in diesem Bereich bereits entbunden ist, ist U_{23}^c einfach der Wert für die Entbindung von einem einzigen Faden von einer harten Wand, für die wir $U_c = 0.3203$

	$q_1 = K_1/K_2$	$q_3 = K_3/K_2$	Keilwinkel θ	z_{12}^o/z_{23}^o	U_{12}^c
(a)	1	∞	$\pi/4$	$1/\sqrt{2}$	0.4412
(b)	4	∞	$\arctan(1/2)$	$2/\sqrt{5}$	0.3568
(c)	9	∞	$\arctan(1/3)$	$3/\sqrt{10}$	0.3413

Tabelle 3.2: Aufstellung aller unsymmetrischen Drei-Fadensysteme, die mit Transfermatrix Methoden studiert wurden. Hierbei entspricht Faden 3 einer harten Wand, und nur das Linienspannungsverhältnis von Faden 1 und 2, q_1 , wird variiert. Abb. 3.13 zeigt die Diskretisierung für Fall (a). Für alle drei Fälle ist $z_{23}^o = 1$, somit ist $U_{23}^c = 0.3203$.

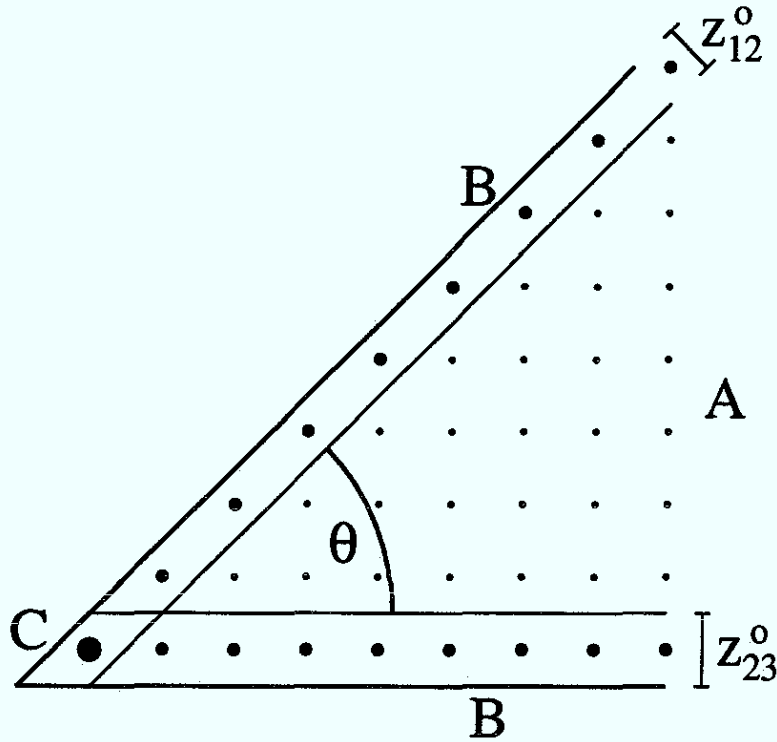


Abbildung 3.13: Diskretisierung für das asymmetrische Fadenbündel mit $K_3 = \infty$ und $K_1 = K_2$. Der Keilwinkel ist $\theta = \pi/4$, das Verhältnis der Dicken der beiden Potentialstreifen ist $z_{12}^o/z_{23}^o = 2^{-1/2}$. Die drei Regionen A, B, und C entsprechen Regionen unterschiedlicher Potentialtiefen, wie in Abb. 3.3.

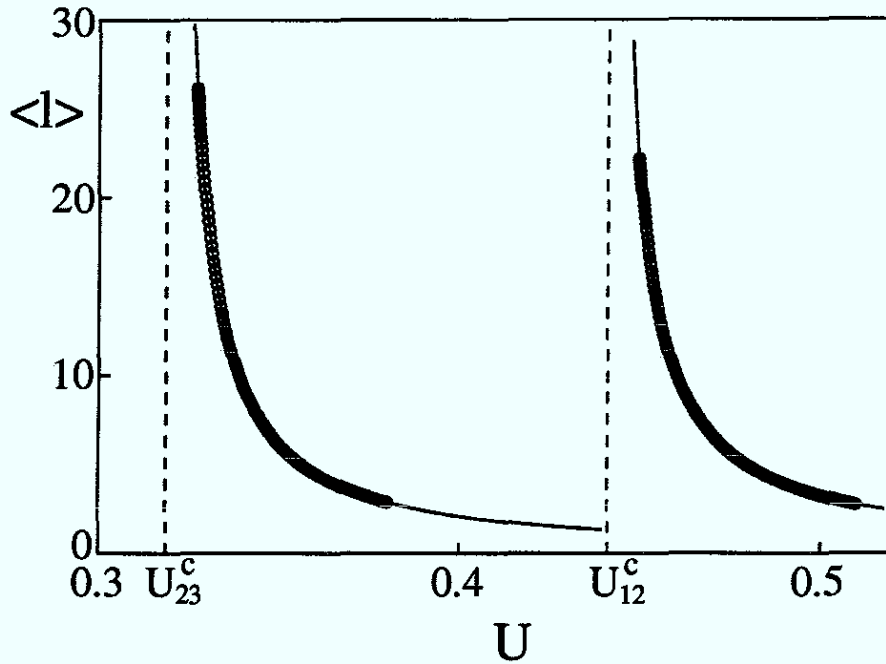


Abbildung 3.14: Zwei aufeinanderfolgende Entbindungsübergänge für zwei identische Fäden an einer harten Wand. Die beiden Fadenabstände $\langle l_{12} \rangle$ und $\langle l_{23} \rangle$ divergieren für verschiedene Potentialtiefen U_{12}^c und U_{23}^c , aber mit universellen Exponenten.

für $z^\circ = 1$ exakt berechnet haben (Anhang C) und $\psi = 1$ wissen (Anhang A). Für alle drei in Tabelle 3.2 aufgeführten Systeme benutzen wir eine Diskretisierung mit $z_{23}^\circ = 1$, so daß $U_{23}^c = 0.3203$ für alle Fälle; die Differenz der kritischen Potentialtiefen, $U_{12}^c - U_{23}^c$, wird kleiner für größer werdendes q_1 und verschwindet wahrscheinlich erst für $q_1 = \infty$. Deshalb schlagen wir vor, daß die drei Fäden nicht nur für den exakt lösbaren Fall $\theta = \pi/2$, sondern immer wenn $d_{23}/d_{23} \neq 1$ ist in zwei aufeinanderfolgenden getrennten Übergängen entbinden. Daraus folgt, daß die vertikale Linie mit $d_{12}/d_{23} = 1$ eine multikritische Linie ist: auf dieser Linie entbinden die drei Fäden gleichzeitig; neben dieser Linie gibt es zwei aufeinanderfolgende Entbindungsübergänge.

Alle Resultate für den symmetrischen und den unsymmetrischen Fall zusammenfassend, können wir nun ein schematisches globales Phasendiagramm angeben (Abb. 3.15). Die vertikale Achse gibt die reduzierte Temperatur an, die im Kontinuumslimit als $t \equiv (V^\circ(K_1 + K_3))^{-1/2}(T/l^\circ)$ definiert werden kann. Die horizontale Achse mißt die Asymmetrie des Fadenbündels, und die dritte Achse ist ein Maß für die relative Linienspannung des mittleren Fadens in Einheiten des Keilwinkels θ . Bei hohen reduzierten Temperaturen sind alle Fäden entbunden, für niedrige Temperaturen sind sie alle gebunden. Für mittlere Temperaturen und weg von der Symmetrieebene (definiert durch $(K_1 - K_3)/(K_1 + K_3) = 0$) sind zwei der Fäden

gebunden und der dritte hat sich bereits abgelöst.

An dem mit dem gefüllten Kreis bezeichneten Punkt ist gerade $K_2 = \infty$. In der Ebene mit konstantem θ liegen dann zwei exakt bekannte Übergangslinien, die sich bei $(K_1 - K_3)/(K_1 + K_3) = 0$ unter endlichem Winkel kreuzen. Hier sind alle Übergänge universell, also $\psi = 1$.

Für beliebige Winkel erhält man dann insgesamt vier Flächen universeller Entbindungsübergänge, die sich in der Symmetrieebene an einer multikritischen Linie treffen. Dies ist die einfachste Topologie, die mit unseren Daten übereinstimmt.

Wenn nun der mittlere Faden flexibel wird, dabei nimmt der Keilwinkel ab, bewegt man sich nach hinten. Die Daten zeigen nun eine Abhängigkeit der effektiven kritischen Exponenten von dem Winkel. Da die Flächen, auf denen immer ein einzelner Faden entbindet, durch den universellen Exponent $\psi = 1$ charakterisiert sind, und auf der multikritischen Linie für $\theta < \pi/2$ aber $\psi < 1$ zu gelten scheint, ist es plausibel, daß die Flächen nun mit einem Winkel von Null auf der multikritischen Linie zusammenkommen. Dies hängt aber natürlich von dem Wert des Crossoverexponenten ab, der durch das Verhältnis der Dimensionen der beiden relevanten Skalenfelder an der multikritischen Linie (in unserem Falle Temperatur und Asymmetrie des Fadenbündels) bestimmt ist. Unabhängig davon erwartet man Crossoverflächen neben den universellen Entbindungsflächen, auf denen das kritische Verhalten von nichtuniversellem zu universellem Verhalten überwechselt. Die multikritische Linie sollte tatsächlich horizontal sein, da die Übergangstemperatur nicht von dem Winkel θ abhängt, wie in Abschnitt 3.4.2 gezeigt wurde.

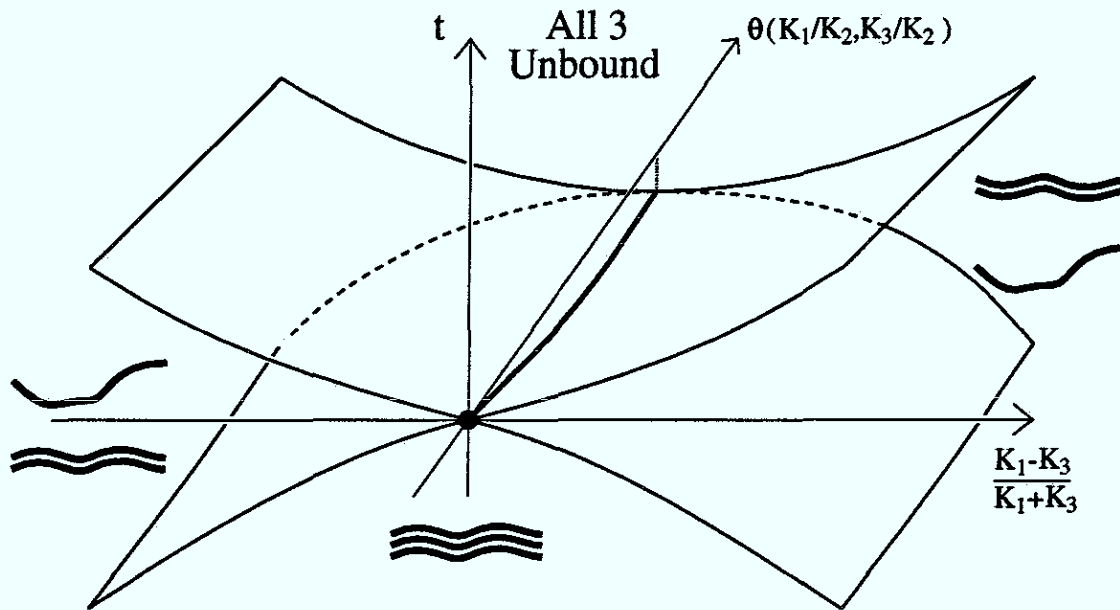


Abbildung 3.15: Globales Phasendiagramm für die Entbindung von drei Fäden mit beliebigen Linienspannungen. Im oberen Teil, für hohe Temperaturen oder kleine Werte der attraktiven Wechselwirkung, sind alle Fäden entbunden; im unteren Teil, für niedrige Temperaturen oder starke Attraktion, sind alle Fäden gebunden. Für mittlere Temperaturen und seitlich der Symmetrieebene sind nur zwei der drei Fäden gebunden. Die vier Flächen entsprechen universellen Entbindungsübergängen und treffen sich alle in einer tetrakritischen Linie in der Symmetrieebene definiert durch $K_1 = K_3$. Für $\theta = \pi/2$, diese Ebene enthält den gefüllten Kreis, kann das Problem exakt gelöst werden; hier treffen sich die Übergangslinien mit endlichem Winkel, und das kritische Verhalten am Schnittpunkt ist auch universell. Die Transfermatrixrechnungen ergeben nichtuniverselles kritisches Verhalten mit $\psi < 1$ für die tetrakritische Linie für $\theta < \pi/2$; dann ist es wahrscheinlich, daß sich die Flächen mit verschwindendem Winkel schneiden, es sei denn, der Wert des Crossoverexponenten ist eins. Da die Skalendimension von t steigt, wird für verschwindenden Schneidungswinkel ein horizontales Treffen der universellen Übergangsflächen nahegelegt. Den Ergebnissen in Abschnitt 3.4.3 folgend, sollte die multikritische Linie tatsächlich horizontal verlaufen, also nicht von θ abhängen.

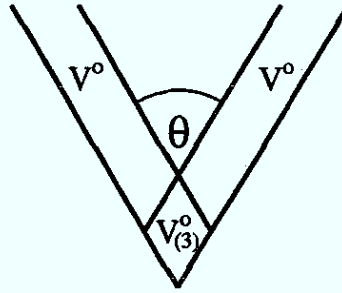


Abbildung 3.16: Das keilförmige Potential für drei Fäden mit kastenförmigen Wechselwirkungspotentialen zwischen allen Fadenpaaren, definiert durch Hamiltonian (3.2) mit der zusätzlichen Dreipunktwechselwirkung (3.72).

3.5 Wechselwirkung zwischen übernächsten Nachbarn

Hier behandeln wir den Effekt einer kurzreichweitigen Wechselwirkung zwischen übernächsten Nachbarn für den Fall von drei Fäden. Als Resultat der Transfer Matrix Berechnungen finden wir, daß diese Art der Wechselwirkung tatsächlich relevant ist und das kritische Verhalten modifiziert. Wir erhalten das komplette Phasendiagramm mit dem Verhältnis der Wechselwirkungsstärken zwischen nächsten und übernächsten Nachbarn als zusätzlichem Parameter, wobei die Wechselwirkungen durch Kastenpotentiale gegeben sind.

Im theoretischen Jargon entspricht diese Wechselwirkung einer Dreipunktwechselwirkung, da sie nur wirkt, wenn alle drei Fäden aneinander gebunden sind. Die zweidimensionale Potentialform ist in Abb. 3.16 dargestellt. Das Verhältnis zwischen den beiden Wechselwirkungsstärken wird durch $\Sigma = V^o/V_{(3)}^o$ festgelegt. Der Hamiltonian ist durch Ausdruck (3.2) gegeben, welcher mit folgendem Anteil ergänzt ist:

$$V_{(3)}(l_{12}, l_{23}) = \begin{cases} V_{(3)}^o - 2V^o & \text{für } l_{12}, l_{23} < l^o \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.72)$$

Für $\Sigma = 1/2$ ist keine Dreipunktwechselwirkung vorhanden, und das Gesamtpotential ist eine reine Überlagerung der Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn. Dies entspricht dem in den vorigen Abschnitten behandelten Fall.

Für $\Sigma < 1/2$ ist die Dreipunkt-Wechselwirkung attraktiv; für $\Sigma = 0$ verschwindet die Zweipunktwechselwirkung, also $V^o = 0$, und man erhält das Necklace Modell. Genau wie in Abschnitt 3.4 definieren wir die reduzierten Potentialstärken der

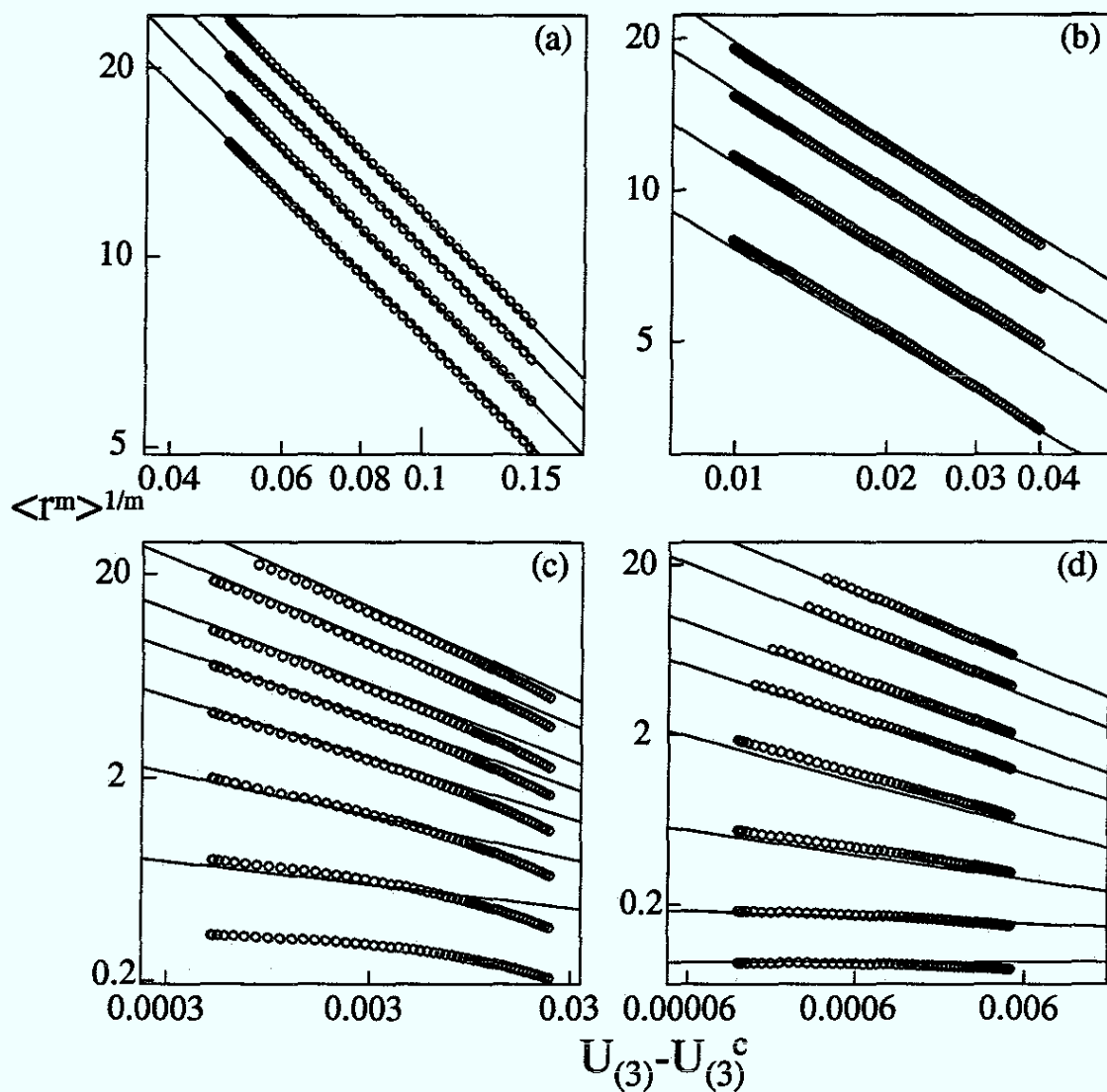


Abbildung 3.17: Die ersten vier Momente $\langle r^m \rangle^{1/m}$ des radialen Abstandes für a) $\Sigma = 1/2$, den exakt lösbaren Fall, mit $U_{(3)}^c = 0.6406$, b) $\Sigma = 1/3$ mit $U_{(3)}^c = 0.9141$, und die Momente $m = 1 - 6, 8, 10$ (in dieser Reihenfolge von unten nach oben geplottet) für c) $\Sigma = 1/5$ mit $U_{(3)}^c = 1.1015$, und d) $\Sigma = 0$ mit $U_{(3)}^c = 1.26908$ in doppelt-logarithmischer Auftragung, wobei $\Sigma = U_{(2)}/U_{(3)}$. Die Steigungen der Geraden geben die Exponenten ν_m an.

Zweipunkt- und Dreipunkt-Wechselwirkung, $U_{(2)}$ und $U_{(3)}$, wie folgt:

$$U_{(2)} \equiv -\frac{\Delta x}{T} V^o \quad U_{(3)} \equiv -\frac{\Delta x}{T} V_{(3)}^o. \quad (3.73)$$

Die Reichweite der Zweipunktwechselwirkung, also die Dicke der Potentialstreifen, ist für alle Transfer Matrix Rechnungen durch $z^o = 1$ gegeben.

3.5.1 Wechselwirkung zweier Fäden durch eine harte Wand

Hier betrachten wir den Fall, wo der mittlere Faden unendlich steif ist und einer harten Wand entspricht, also $\theta = \pi/2$. Dann gibt es zwei exakt lösbare Grenzfälle, nämlich $\Sigma = 0$, das Necklace Modell, und $\Sigma = 1/2$, zwei durch eine harte Wand getrennte Fäden ohne Dreipunkt-Wechselwirkung. In Abb. 3.17 zeigen wir Momente des radialen Abstandes, $r \equiv \sqrt{l_{12}^2 + l_{23}^2}$, die wie

$$\langle r^m \rangle^{1/m} \sim (U_{(3)} - U_{(3)}^c)^{-\nu_m} \quad (3.74)$$

skalen. Für $\Sigma = 1/2$ wird das kritische Verhalten akkurat durch $\nu_m = 1$ (für $m = 1, \dots, 4$) beschrieben, wie durch die Geraden mit Steigung 1 in Abb. 3.17(a) verdeutlicht wird. Für $\Sigma = 1/3$, Abb. 3.17(b), erhalten wir $\nu_1 = 0.60 \pm 0.02$, $\nu_2 = 0.61 \pm 0.02$, $\nu_3 = 0.63 \pm 0.02$ und $\nu_4 = 0.64 \pm 0.02$. Innerhalb der numerischen Ungenauigkeit skalen die Momente hier also noch mit gleichen Exponenten. Für $\Sigma = 1/5$, Abb. 3.17(c), jedoch erhalten wir Exponenten, die von $\nu_2 = 0.115 \pm 0.005$ bis $\nu_{10} = 0.44 \pm 0.02$ stark mit m variieren. Für $\Sigma = 0$ stimmen die gemessenen Exponenten gut mit den vom Necklace-Modell vorhergesagten Exponenten überein.

Der Exponent der parallelen Korrelationslänge, $\nu_{||}$, hängt in vergleichbarer Weise von dem Parameter Σ ab, wie aus Abb. 3.18 zu sehen ist. Dort zeigen wir die Ergebnisse für $\xi_{||}$ für vier verschiedene Werte von Σ . Für $\Sigma < 1/4$ erhalten wir $\nu_{||} \simeq 1$, was einen Entbindungsübergang erster Ordnung andeutet. Für die Werte von Σ wo $\nu_{||} > 1$ ist, gilt in guter Näherung die Skalenrelation $\nu_m = \nu_{||}/2$.

In Abb. 3.19(a) zeigen wir das Phasendiagramm als Funktion der Stärken der beiden Wechselwirkungen, $U_{(2)}$ und $U_{(3)}$. Das Kreuz bezeichnet das exakte Resultat für verschwindende Dreipunkt-Wechselwirkung, die offenen Kreise geben die Ergebnisse der Transfer Matrix Rechnungen an. Für $U_{(2)} > 0.3203$ ist das System immer im gebundenen Zustand.

Wieder erhalten wir nichtuniverselles kritisches Verhalten, diesmal als Funktion des Parameters Σ . Die Analogie des kritischen Verhaltens mit dem in Abschnitt 2.3 dargestellten Verhalten von zwei Fäden in Anwesenheit eines langreichweitigen Potentials $\sim 1/l^2$ legt es nahe, wieder die reduzierte Amplitude w des effektiven abstoßenden Potentials über die Beziehungen (2.37) und (2.40) zu berechnen. In

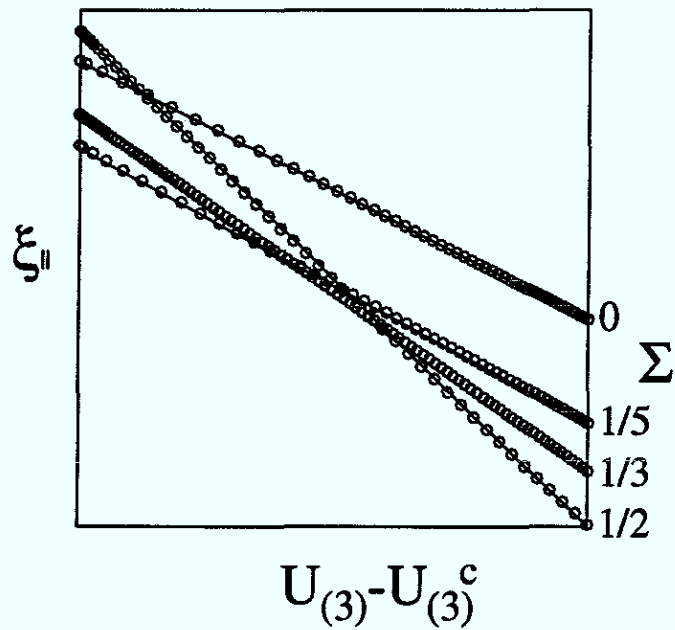


Abbildung 3.18: Doppelt-logarithmischer Plot der parallelen Korrelationslänge $\xi_{||}$ für $\Sigma = 1/2, 1/3, 1/5$ und $\Sigma = 0$, wobei die Achsen geeignet skaliert sind. Die Exponenten sind $\nu_{||} = 1.92 \pm 0.02$ für $\Sigma = 1/2$, $\nu_{||} = 1.38 \pm 0.02$ für $\Sigma = 1/3$, $\nu_{||} = 1.06 \pm 0.02$ für $\Sigma = 1/5$ und $\nu_{||} = 1.00 \pm 0.02$ für $\Sigma = 0$, wie durch die Geraden angedeutet wird.

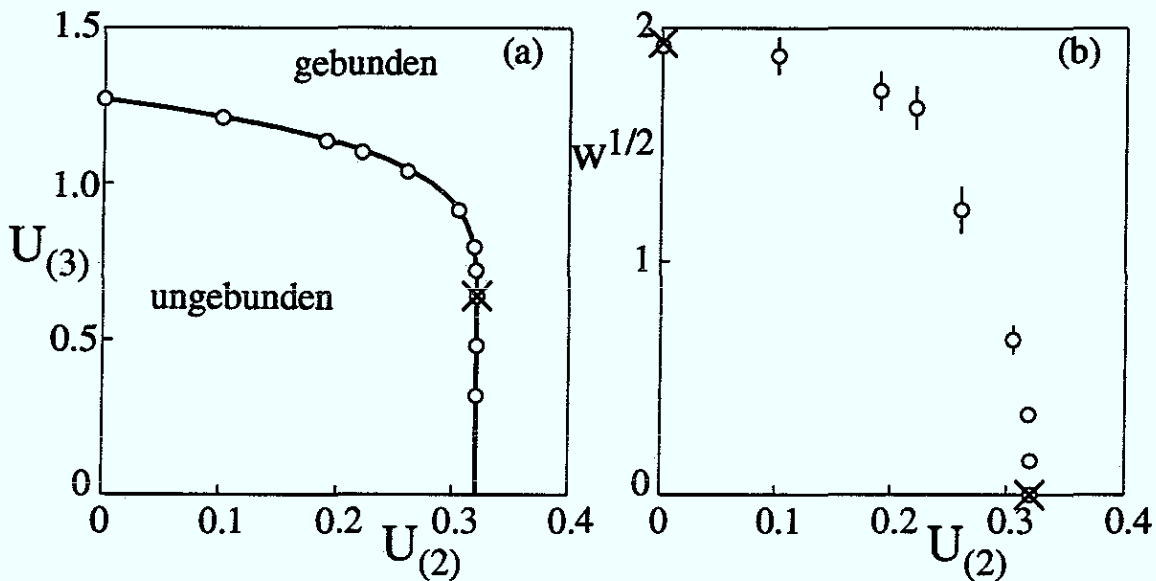


Abbildung 3.19: a) Phasendiagramm für allgemeine Stärken der Wechselwirkungen, $U_{(2)}$ und $U_{(3)}$. b) Amplitude w der effektiven Wechselwirkung $\sim 1/r^2$ als Funktion von $U_{(2)}^c$; hier gibt es zwei exakte Ergebnisse, die durch Kreuze gekennzeichnet sind.

Abb. 3.19(b) zeigen wir die resultierende Amplitude w als Funktion von $U_{(2)}$. Die beiden Kreuze geben die exakten Ergebnisse wieder, nämlich $w(U_{(2)} = 0) = 3.75$, was dem Necklace Modell entspricht, und der Fall mit verschwindender Dreipunkt-Wechselwirkung, $w(\Sigma = 1/2) = 0$. Die Ergebnisse zeigen, daß das kritische Verhalten zwischen diesen beiden Fällen kontinuierlich variiert. Wir berechnen w für alle gemessenen Exponenten separat; in der Abbildung zeigen wir die daraus errechneten Mittelwerte und die resultierenden Fehler.

In Abb. 3.20 und 3.21 zeigen wir dreidimensionale Plots der durch (3.43) definierten Wahrscheinlichkeitsverteilung $\mathcal{W}(l_{12}, l_{23})$, die der Lösung der korrespondierenden Schrödingergleichung entspricht. Für das Necklace Modell, für das $\Sigma = 0$ gilt, ist diese Verteilung für eine Potentialstärke von $U_{(3)} = 1.269$ berechnet, was sehr nahe an der kritischen Potentialstärke $U_{(3)}^c = 1.26908$ liegt. Die in Abb. 3.20 gezeigte Verteilung ist trotz der Nähe zum Entbindungsübergang noch sehr in der Ecke konzentriert, wo sich auch alle Konturlinien treffen. Für $\Sigma = 1/3$ berechnen wir die Verteilung für $U_{(3)} = 0.924$, wo wir $\langle l_{12} \rangle = \langle l_{23} \rangle = 5.05$ erhalten (wobei $U_{(3)}^c = 0.9141$). Hier sind die Konturlinien auch stark gebogen, aber treffen mit endlichem Winkel auf die Ränder des Potentialkeils. (In Abb. 3.26 wird die Wahrscheinlichkeitsverteilung $\mathcal{W}(l_{12}, l_{23})$ für verschwindende Dreipunktwechselwirkung gezeigt.)

Die hier vorgestellten Ergebnisse für $\theta = \pi/2$ zeigen, daß das kritische Verhalten auf den numerisch erreichbaren Längenskalen durch die Dreipunktwechselwirkung modifiziert wird. Der gleiche Effekt sollte auch für andere Winkel des Potentialkeils beobachtbar sein, insbesondere für $\theta = \pi/3$, was dem Fall von drei gleichen Fäden entspricht.

3.5.2 Relevanz für Lipidmembranen

Um die experimentelle Relevanz der im letzten Abschnitt vorgestellten Ergebnisse für die Entbindung von Lipidmembranenstapeln zu ermitteln, muß man das Verhältnis von der Wechselwirkung zwischen nächsten und übernächsten Nachbarn abschätzen.

Für Membranen der Dicke δ , die einen Abstand von l zueinander haben, ist die Van-der-Waals Attraktion zwischen übernächsten Nachbarn unter der Voraussetzung der Additivität der mikroskopischen Kräfte in Analogie zu (2.13) gegeben durch

$$V_W(l) = -\frac{W}{12\pi} \left(\frac{1}{(l + 2\delta)^2} - \frac{2}{(2l + 2\delta)^2} + \frac{1}{(2l + 3\delta)^2} \right). \quad (3.75)$$

Für $l \gg \delta$ erhält man daraus

$$V_W(l) \simeq -\frac{W\delta^2}{32\pi l^4}, \quad (3.76)$$

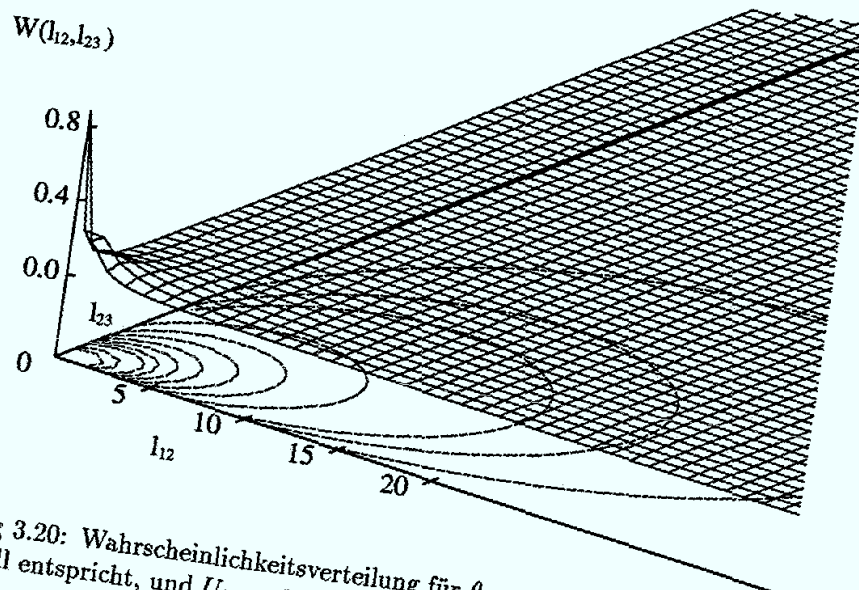


Abbildung 3.20: Wahrscheinlichkeitsverteilung für $\theta = \pi/2$, $\Sigma = 0$, was dem Necklace Modell entspricht, und $U_{(3)} = 1.269$.

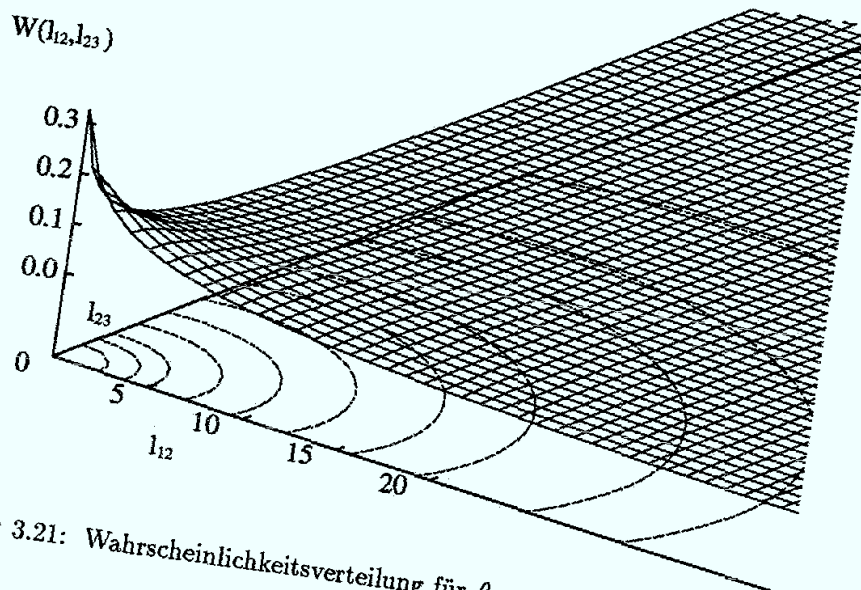


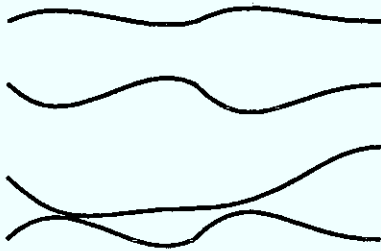
Abbildung 3.21: Wahrscheinlichkeitsverteilung für $\theta = \pi/2$, $\Sigma = 1/3$ und $U_{(3)} = 0.924$.

was um den Faktor 16 kleiner als der Ausdruck (2.14) für die Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn ist. Dieser Faktor wird für kleinere Abstände eher größer, da die Wechselwirkung der äußeren Membranen durch die in der Mitte vorhandene Membran zusätzlich abgeschwächt werden sollte, und stellt also eine untere Schranke dar. Für diese Schranke erhält man durch Interpolation $\psi \simeq 0.9992$; die Abweichung vom universellen Wert $\psi = 1$ ist also vernachlässigbar für Lipidmembranen. Auch der Einfluß auf die Adhäsionstemperatur ist vernachlässigbar. In realen Systemen kommen zusätzlich noch Wechselwirkungen zwischen überübernächsten Nachbarn (und so weiter) hinzu, die aber zusammengekommen nicht ins Gewicht fallen.[62]

Für Stufen auf Oberflächen könnten Wechselwirkungen zwischen übernächsten Nachbarn eine wichtigere Rolle spielen, da hier die Oberflächenspannungsrelaxierung über den Festkörper relevant ist und die Wechselwirkungen entscheidend beeinflussen kann.

Freier Stapel

$N=4$



Stapel am Substrat

$N=4$

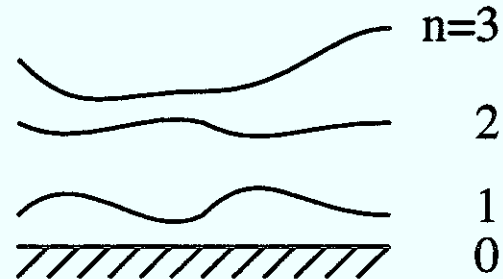


Abbildung 3.22: Schematische Gegenüberstellung eines freien Stapels, bei dem alle N Fäden (oder Membranen) die gleiche Elastizität haben, und eines am flachen Substrat gebundenen Stapels, bei dem die unterste Fläche (hier mit $n = 0$ bezeichnet) unendlich steif ist.

3.6 Vier Flächen

In diesem Abschnitt dehnen wir die Diskussion auf bis zu vier Flächen aus. Wir betrachten nun sowohl eindimensionale Fäden als auch zweidimensionale Membranen. Wir finden tatsächlich, daß das kritische Verhalten für diese zwei sehr verschiedenen Klassen von Systemen gleich ist, in Übereinstimmung mit den in Abschnitt 3.2 vorgestellten Argumenten. Im Falle von Membranen sind Transfermatrix-Methoden nicht anwendbar, hier müssen wir auf Monte-Carlo Simulationen zurückgreifen. Der enorme numerische Aufwand schränkt die maximale Anzahl von Membranen auf $N < 4$ ein. Im Falle von Fäden können wir auch das kritische Verhalten für $N = 4$ bestimmen. Tatsächlich lassen diese beschränkten Ergebnisse für die interessierenden Fragen eine Extrapolation nach $N \rightarrow \infty$ zu. Wir beschränken uns hier auf zwei Extremfälle: den *symmetrischen* Fall, bei dem alle Flächen durch identische elastische Konstanten charakterisiert sind, und den *asymmetrischen* Fall, bei dem die unterste Fläche eine unendlich hohe elastische Konstante besitzt und ein flaches Substrat darstellt (siehe Abb. 3.22). Die Wechselwirkungs-Potentiale sind dabei alle gleich (und beschränkt auf nächste Nachbarn), auch die zwischen dem flachen Substrat und der nächsten Fläche im asymmetrischen Fall. Diese beiden Fälle werden in Experimenten an Lipidmembranenstapeln untersucht. Im symmetrischen Fall handelt es sich um freie Membranenstapel,[30] der asymmetrische Fall wird realisiert indem ein Membranenstapel an einer festen Oberfläche, typischerweise eine Glass-

platte, immobilisiert wird.[46] Die hier untersuchten Fadensysteme könnten durch sogenannte Makrosteps auf Metalloberflächen realisiert werden.

Der Hamiltonian für N Flächen ist gegeben durch

$$\mathcal{H}\{l_N\} = \int d^s x \left\{ \sum_{n=0}^{N-1} \frac{K_n}{2} (\nabla^s l_n)^2 + \sum_{n=0}^{N-2} V(l_{n+1} - l_n) \right\}, \quad (3.77)$$

wobei wieder $s = 1$ für Fäden und $s = 2$ für Membranen gilt. Die elastischen Konstanten unterscheiden zwischen dem symmetrischen Fall mit

$$K_n = K \quad \text{für} \quad n = 0, \dots, N-1, \quad (3.78)$$

und dem asymmetrischen Fall, für den

$$K_n = \begin{cases} \infty & \text{für } n = 0 \\ K & \text{für } n = 1, \dots, N-1 \end{cases} \quad (3.79)$$

gilt, wobei $K_0 = \infty$ dem flachen Substrat entspricht. Die Wechselwirkung ist wieder definiert durch ein Kastenpotential und gegeben durch

$$V(l) = \begin{cases} \infty & \text{for } l \leq 0 \\ V^o & \text{for } 0 < l < l^o \\ 0 & \text{for } l^o \leq l, \end{cases} \quad (3.80)$$

wobei hier $V^o < 0$ für attraktive Wechselwirkungen gilt. Für Membranen entspricht dieses Potential, insoweit universelle Aspekte betroffen sind, der Van-der-Waals Wechselwirkung, da beide Potentiale kurzreichweitig in dem Sinne sind, daß sie schneller als $1/l^2$ abfallen (siehe Abschnitt 2.3).

Die x -Koordinate wird mit einer Gitterkonstante Δx diskretisiert, das in (3.77) definierte Problem hängt dann nur von den beiden Parametern $U \equiv -(\Delta x)^s V^o / T$ und $\hat{l}^o \equiv l^o \sqrt{K/2T(\Delta x)^s}$ ab. Wir berechnen die mittleren Abstände zwischen den Flächen, definiert als

$$\langle \delta l_n \rangle \equiv \langle l_n - l_{n-1} \rangle, \quad (3.81)$$

und die entsprechenden Korrelationslängen $\xi_{\perp n}$ und $\xi_{\parallel n}$.

3.6.1 Monte Carlo Algorithmus für Membranen

In den Monte Carlo Simulationen wird das zweidimensionale Koordinatensystem $\mathbf{x}$ repräsentiert durch ein Quadratgitter $x^{(i,j)}$ mit der Gitterkonstante Δx . Die Konfiguration der n ten Membran ist dann festgelegt durch $l_n^{(i,j)} \equiv l_n(x^{(i,j)})$. Der diskretisierte Laplaceoperator hat die Form

$$\nabla_d^2 l^{(i,j)} = l^{(i+1,j)} + l^{(i,j+1)} + l^{(i-1,j)} + l^{(i,j-1)} - 4l^{(i,j)}. \quad (3.82)$$

Wir benutzen einen single-site-move Algorithmus, bei dem wir die Energien zweier Konfigurationen $\{\tilde{l}_N\}$ und $\{l_N\}$ vergleichen, die sich durch den Wert einer Höhenvariablen an der Position (i, j) unterscheiden; ist die Energiedifferenz negativ, wird der move angenommen, ist sie positiv, dann ist die Annahmewahrscheinlichkeit durch das Boltzmannngewicht der Energiedifferenz, $\exp(-\Delta\mathcal{H}/T)$, gegeben.[6] Die Energiedifferenz des elastischen Anteils ist gegeben durch

$$\begin{aligned}\Delta\mathcal{H}^{el} &= \mathcal{H}^{el}(\{\tilde{l}_N\}) - \mathcal{H}^{el}(\{l_N\}) = \\ &= \frac{K}{2} \left(\nabla_d^2 \tilde{l}_n^{(i,j)} + \nabla_d^2 \tilde{l}_n^{(i+1,j)} + \nabla_d^2 \tilde{l}_n^{(i,j+1)} + \nabla_d^2 \tilde{l}_n^{(i-1,j)} + \nabla_d^2 \tilde{l}_n^{(i,j-1)} - \right. \\ &\quad \left. \nabla_d^2 l_n^{(i,j)} - \nabla_d^2 l_n^{(i+1,j)} - \nabla_d^2 l_n^{(i,j+1)} - \nabla_d^2 l_n^{(i-1,j)} - \nabla_d^2 l_n^{(i,j-1)} \right). \quad (3.83)\end{aligned}$$

Durch Einsetzen der Definition des diskretisierten Laplaceoperators erhält man

$$\begin{aligned}\Delta\mathcal{H}^{el} &= K \left\{ \left(\tilde{l}_n^{(i,j)} - l_n^{(i,j)} \right) \left(l_n^{(i+2,j)} + l_n^{(i,j+2)} + l_n^{(i-2,j)} + l_n^{(i,j-2)} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. 2 \left[l_n^{(i+1,j+1)} + l_n^{(i-1,j+1)} + l_n^{(i+1,j-1)} + l_n^{(i-1,j-1)} \right] - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. 8 \left[l_n^{(i+1,j)} + l_n^{(i,j+1)} + l_n^{(i-1,j)} + l_n^{(i,j-1)} \right] + 10 \left[\tilde{l}_n^{(i,j)} - l_n^{(i,j)} \right] \right) \right\}. \quad (3.84)\end{aligned}$$

Da die Energiedifferenz nur von nächsten und übernächsten Nachbarn abhängt, kann man das Quadratgitter in fünf einander durchdringende Untergitter unterteilen, so daß die elastische Energiedifferenz (3.84) eines moves auf dem einen Untergitter nur von den Höhenvariablen auf den anderen vier Untergittern abhängt. Dann kann man die Berechnung der Energiedifferenz vollständig vektorisieren, wobei fünf die minimale Anzahl von Untergittern darstellt, mit der dies möglich ist. Die fünf Untergitter sind selber Quadratgitter mit der Kantenlänge $\sqrt{5}\Delta x$. Nächste Nachbarn auf demselben Untergitter sind also durch Rösselsprünge auf dem Grundgitter verbunden. Mit diesem Algorithmus erzielen wir eine sehr gute Vektorisierung auf einer Cray Y-mp mit Geschwindigkeiten von größer als 140 MFlops/s. Das Gitter besteht dabei typischerweise aus 3920 diskreten Punkten, mit kontinuierlichen Höhenvariablen. In den meisten Läufen führen wir 10^7 Monte-Carlo Schritte (MCS) durch, wobei ein MCS einem single-site-move pro Gitterplatz entspricht. Die reduzierte Reichweite des Potentials ist in allen Simulationen $\hat{l}^o = 0.0185$.

3.6.2 Identische Flächen

In Abb. 3.23 zeigen wir unsere Monte Carlo Resultate für einen symmetrischen Stapel von drei identischen Membranen. Hier verhalten sich die beiden mittleren Abstände wieder gleich und wir definieren $\langle \delta l \rangle \equiv \langle \delta l_1 \rangle / 2 + \langle \delta l_2 \rangle / 2$ (und analog für die anderen Längenskalen). Die parallele Korrelationslänge wird abgeschätzt durch $\xi_{\parallel} \equiv a \exp[2\pi \langle (\nabla \delta l)^2 \rangle / T]$, siehe Abschnitt 4.5.[60] Abb. 3.23(a) zeigt das Verhalten von $\langle \delta l \rangle$ und $\xi_{\perp}$ als Funktion von der parallelen Korrelationslänge in einem Log-Log-Plot. Die Daten nähern sich der Geraden mit Steigung eins für große Werte

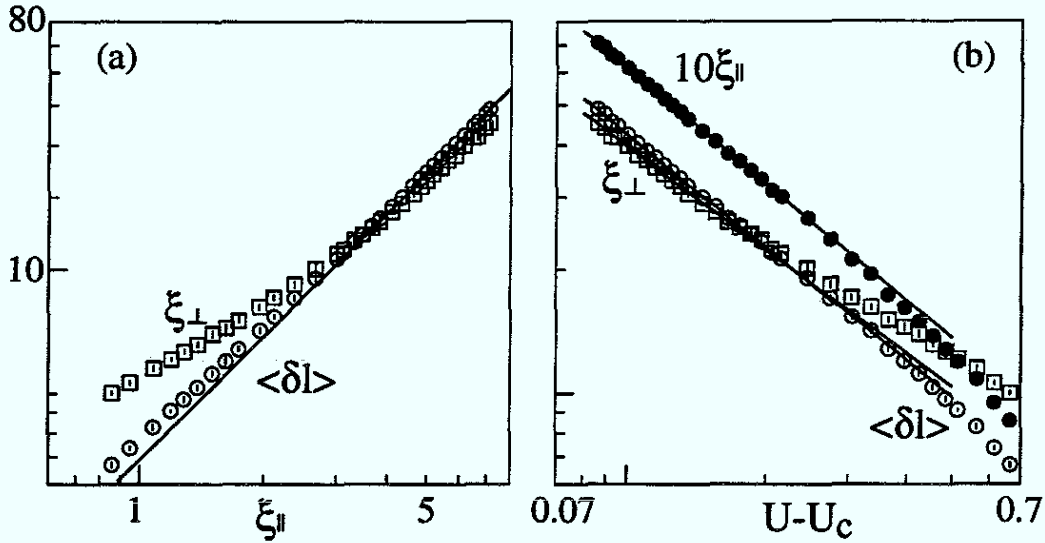


Abbildung 3.23: Monte Carlo Ergebnisse für drei identische Membranen. (a) Daten für die Rauhhigkeit $\xi_{\perp}$ und den mittleren Abstand $\langle \delta l \rangle$ skalieren wie die parallele Korrelationslänge $\xi_{\parallel}$ genügend nahe am Übergang, wie durch die Gerade mit Steigung eins verdeutlicht wird. (b) Doppeltlogarithmischer Plot aller Längen als Funktion der reduzierten Potentialstärke $U - U_c$, wobei $U_c = 2.785 \pm 0.01$. Die Steigungen der Geraden entsprechen den gefitteten Exponenten. Die vertikalen Linien geben die numerischen Fehler an.

der parallelen Korrelationslänge, was bedeutet, daß asymptotisch $\psi = \nu_{\perp} = \nu_{\parallel}$ gilt.[14] Wir fitten die Daten an ein Potenzgesetz und erhalten $U_c = 2.785 \pm 0.01$ und $\psi = 0.91 \pm 0.04$, $\nu_{\perp} = 0.83 \pm 0.10$, und $\nu_{\parallel} = 0.93 \pm 0.06$. In Abb. 3.23(b) zeigen wir die Daten als Funktion der Potentialtiefe $U - U_c$. Der Adhäsionsübergang für zwei Membranen liegt bei $U_c = 2.78 \pm 0.01$ (Abschnitt 3.6.3), was innerhalb der Fehlergrenzen nicht von dem Wert für die Entbindung von drei Membranen zu unterscheiden ist. Bei Membranen hängt die kritische Tiefe des Potentials also nicht davon ab, ob man zwei oder drei Membranen betrachtet; dies ist vollkommen analog zu dem Fall von Fäden (Abschnitt 3.4.2). Abb. 3.24 zeigt Schnitte durch zwei typische Membranenkonfigurationen bei $U = 3.5$ und $U = 3.0$. Die Membranen erscheinen sehr rauh, was anschaulich demonstriert, daß $\langle \delta l \rangle \simeq \xi_{\perp}$, wie man in Abb. 3.23(b) sehen kann und wie für mit Kastenpotentialen wechselwirkende Fäden in Anhang A.2 exakt gezeigt wird.

In Abb. 3.25 zeigen wir unsere Transfermatrix Ergebnisse für N identische Fäden mit $N = 2, 3$ und 4 , wobei die Diskretisierung hier die reduzierten Potentialreichweiten $\hat{l}^o = 1, \sqrt{3}/2$, und $\sqrt{2}$ diktiert. Für drei gleiche Fäden erhalten wir nach Eliminierung der Schwerpunktkoordinate einen Potentialkeil mit einem Öffnungswinkel

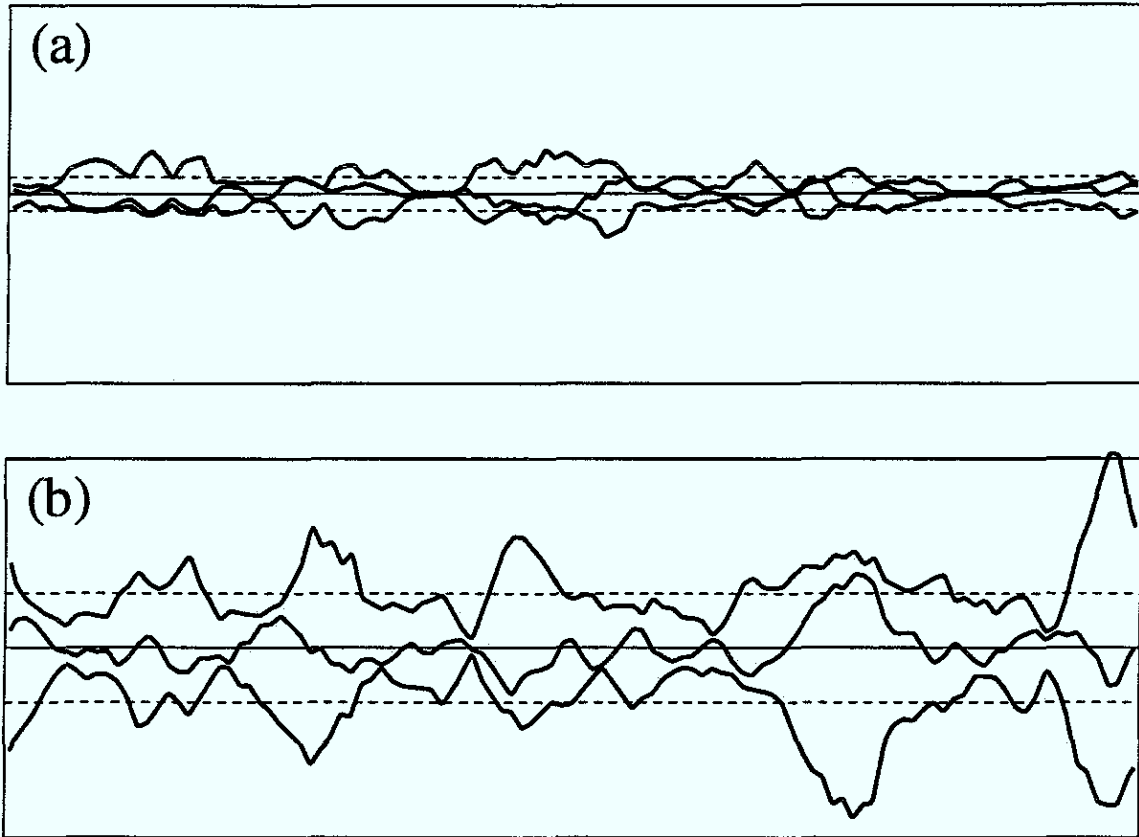


Abbildung 3.24: Schnitt durch typische Konfigurationen der drei Membranen bei der Monte Carlo Simulation. Der Schnitt enthält 112 diskrete Konfigurationsdaten. Die Schwerpunktkoordinate ist durch die durchgezogene Linie bezeichnet und wird für die graphische Darstellung konstant gehalten. Tatsächlich ist die Schwerpunktkoordinate stark aufgerauht, da sie ohne Wirkung eines Potentials frei diffundiert. Die Dicken der Membranen entsprechen den Reichweiten der Kastenpotentiale, $l^o = 1$. Der Adhäsionsübergang findet bei $U_c = 2.785 \pm 0.01$ statt. (a) Konfiguration für $U = 3.5$; hier sind die mittleren Abstände $\langle \delta l \rangle = 6.6$, wie durch die gestrichelten Linien angedeutet wird. (b) Konfiguration für $U = 3.0$; hier ist $\langle \delta l \rangle = 21.6$.

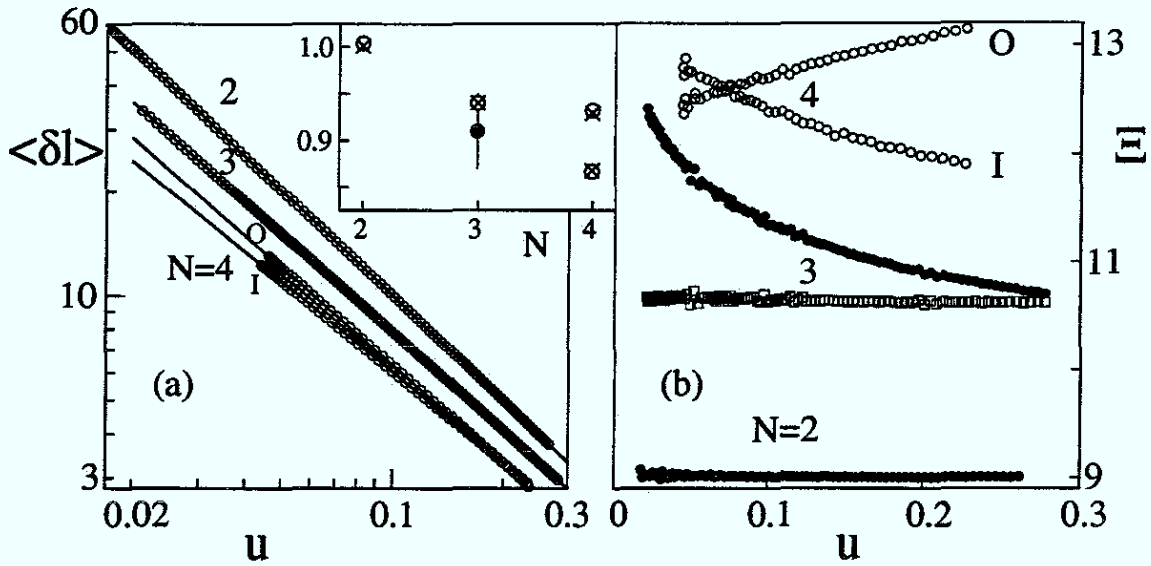


Abbildung 3.25: Transfermatrixergebnisse für den symmetrischen Fall von N identischen Fäden mit $N = 2, 3$ und 4 als Funktion der reduzierten Potentialstärke $u \equiv (U - U_c^s(N))/U_c^s(N)$. (a) Fadenabstände $\langle \delta l \rangle$ skalieren mit verschiedenen effektiven Exponenten ψ , wie durch die Geraden im doppeltlogarithmischen Plot gezeigt wird. In der kleinen Teilfigur werden die Exponenten ψ (o) und $\nu_{\perp}$ (x) als Funktion von N gezeigt; zusätzlich wird das Monte Carlo Ergebnis für $\nu_{\perp}$ für drei Membranen gezeigt (•). (b) Erweiterte Datenanalyse mit Hilfe der Differenzfunktion Ξ .

von $\theta = \pi/3$; hier diskretisieren wir das Potential auf einem hexagonalen Gitter. Für die vier gleichen Fäden erhält man nach der Orthogonaltransformation eine dreidimensionale Potentialecke mit den Öffnungswinkeln $\theta_1 = \theta_3 = \arccos(1/\sqrt{3}) \simeq 54.7^\circ$ und $\theta_2 = \arccos(1/3) \simeq 70.5^\circ$, wobei an den Randflächen anziehende Potentiale der Reichweite $\hat{l}^o = \sqrt{2}$ zu finden sind. Die Diskretisierung erfolgt auf einem kubischen Gitter.

Für $N = 4$ muß zwischen dem gemittelten Abstand der mittleren Fäden, und den beiden äußeren Abständen, deren mittlerer Wert wegen der Symmetrie gleich sein sollte, unterschieden werden. Wir definieren also

$$\langle \delta l_O \rangle \equiv \langle \delta l_1 \rangle / 2 + \langle \delta l_3 \rangle / 2, \quad \langle \delta l_I \rangle \equiv \langle \delta l_2 \rangle. \quad (3.85)$$

Im Prinzip könnte der Entbindungsvorgang nun in zwei Stufen ablaufen, indem sich zuerst die äußeren Fäden ablösen und dann, bei einem niedrigeren Wert der Potentialtiefe, die mittleren Fäden entbinden. Tatsächlich aber divergieren die beiden Abstände $\langle \delta l_O \rangle$ und $\langle \delta l_I \rangle$ bei dem gleichen Wert $U_c^s = 0.192 \pm 0.005$. Der Entbindungsübergang für zwei Fäden und der gleichen Potentialreichweite $\hat{l}^o = \sqrt{2}$ findet

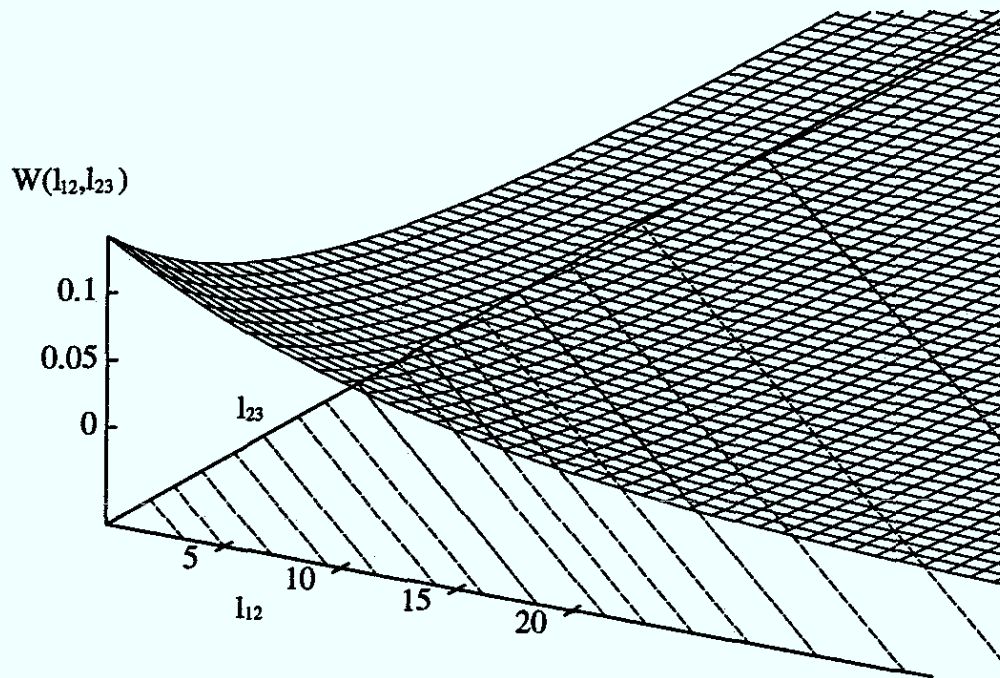


Abbildung 3.26: Wahrscheinlichkeitsverteilung für $\theta = \pi/2$ und $U = 0.35$, wobei $U_c = 0.3203$; hier ist $\langle l_{12} \rangle = \langle l_{23} \rangle = 12.2$.

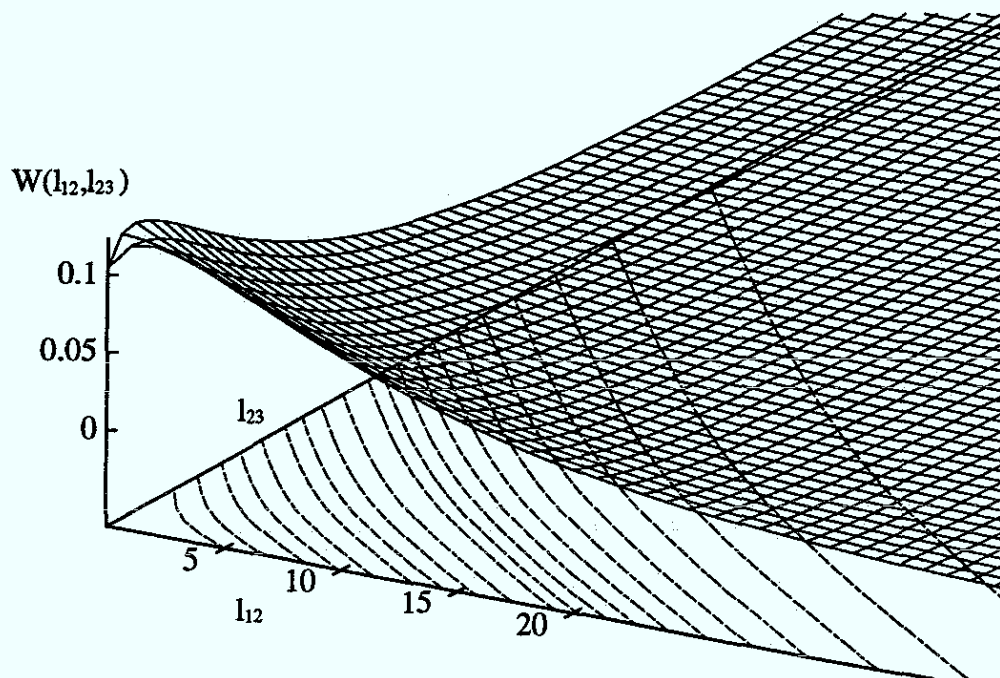


Abbildung 3.27: Wahrscheinlichkeitsverteilung für $\theta = \pi/3$ und $U = 0.33$, wobei $U_c = 0.30$; hier ist $\langle l_{12} \rangle = \langle l_{23} \rangle = 10.5$.

bei einer kritischen Potentialtiefe von $U_c^s = 0.193 \pm 0.005$ statt (siehe Tabelle 3.1). Die beiden gefundenen Werte sind innerhalb der numerischen Fehlergrenzen nicht voneinander zu unterscheiden. Daß zwei Fäden bei der gleichen Potentialstärke wie drei Fäden entbinden, wurde in Abschnitt 3.4.2 auf indirekte Weise geschlossen. Damit haben wir für $N < 5$ numerisch gezeigt, daß

$$\boxed{U_c^s(N) \equiv U_c^s}, \quad (3.86)$$

unabhängig von N gilt, wenn die Potentialreichweiten konstant sind. Es ist zu vermuten, daß dies für allgemeines N sowohl für Fäden als auch für Membranen gilt.

Die Universalität der kritischen Potentialtiefen steht in Widerspruch zu der beobachteten Nichtuniversalität der effektiven kritischen Exponenten. In Abb. 3.25(a) zeigen wir die Daten in einem Log-Log-Plot; der kleine Einsatz zeigt die ermittelten Exponenten in Abhängigkeit von N . Für $N = 2$ werden die Daten für die Abstände $\langle \delta l \rangle$ akkurat durch $\psi = 1.005 \pm 0.005$ beschrieben, in Übereinstimmung mit dem exakten Wert $\psi = 1$; für $N > 2$ gibt es kleine aber klare Abweichungen von diesem Wert für die erreichbaren Längenskalen. Darüberhinaus skalieren die inneren und äußeren Abstände im Falle der vier identischen Fäden verschieden, und zwar mit $\psi_O = \nu_{LO} = 0.93 \pm 0.02$ und $\psi_I = \nu_{LI} = 0.87 \pm 0.02$. Zusätzlich stellen wir das Ergebnis für ψ im Falle von drei Membranen dar, erhalten mit Monte Carlo Simulation, angedeutet durch den gefüllten Kreis. In Abb. 3.25(b) zeigen wir die Differenzfunktion des mittleren Abstandes $\Xi[\langle \delta l \rangle]$ für $N = 2$ und 3 mit $\psi' = 1$ (gefüllte Kreise); die Divergenz für $N = 3$ deutet an, daß hier $\psi < 1$ gilt. Wenn man nun Ξ für $N = 3$ mit $\psi' = 0.94$ plottet (Quadrate), erhalten wir eine ziemlich gerade Kurve über den gesamten Datenbereich. Das bedeutet, daß es keinen Crossover in den Daten gibt, wenn man sich dem Entbindungsübergang nähert. Für $\langle \delta l_O \rangle$ und $\langle \delta l_I \rangle$ für $N = 4$ berechnen wir Ξ mit $\psi' = 0.9$, was genau zwischen den Werten liegt, die wir für die Exponenten ψ_O und ψ_I erhalten haben. Wie man sehen kann, geht die Differenzfunktion für den äußeren (inneren) Abstand nach Null (Unendlich) wenn U nach U_c geht, was bedeutet, daß der Exponent größer (kleiner) als 0.9 ist. Für die Abstände zwischen den Fäden, die numerisch untersucht werden konnten, hängen die Exponenten also von der Anzahl der Fäden ab.

In Abb. 3.26 und 3.27 vergleichen wir die durch (3.43) definierte Wahrscheinlichkeitsverteilung $\mathcal{W}(l_{12}, l_{23})$ für drei identische Fäden ($\theta = \pi/3$) mit der für das separable Problem von einer harten Wand zwischen zwei identischen Fäden ($\theta = \pi/2$). Für den letzteren Fall erhält man für die Verteilung, die der Lösung der korrespondierenden Schrödingergleichung entspricht, $\mathcal{W} \sim e^{-\sqrt{-f}(l_{12}+l_{23})}$, was durch die geraden Konturlinien angedeutet wird (Anhang A.2). In Abb. 3.27 weisen die Konturlinien eine Krümmung auf, was zeigt, daß die Lösung hier eine kompliziertere Struktur besitzt.

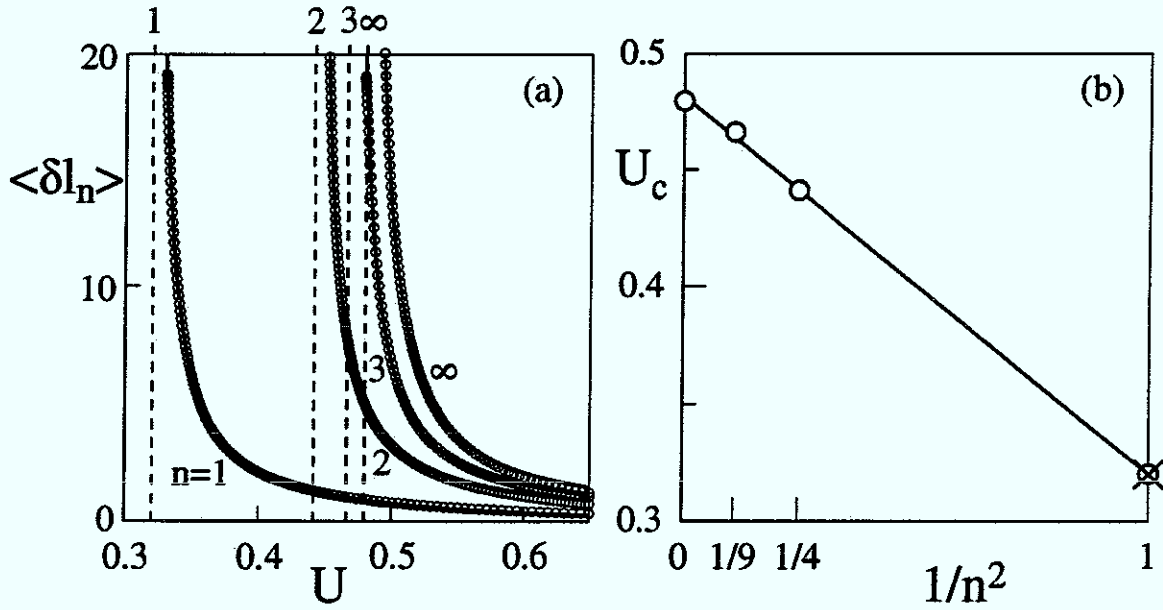


Abbildung 3.28: Transfermatrixergebnisse für den Fall von $N - 1$ identischen Fäden an einem flachen Substrat mit $N = 2, 3$ und 4 . (a) Mittlere Abstände der Fäden, $\langle \delta l_n \rangle$, als Funktion der Potentialstärke U , wobei $n = 1$ dem Abstand zwischen dem Substrat und dem untersten Faden entspricht; $n = \infty$ entspricht dem Abstand zwischen zwei freien Fäden. Die durchgezogenen Linien sind die Fits mit Exponenten $\psi = 1.00 \pm 0.02$ für alle Abstände, die gestrichelten Linien geben die kritischen Potentialstärken $U_c^a(n)$ an. (b) Die kritischen Potentialstärken $U_c^a(n)$ als Funktion von $1/n^2$ liegen auf einer Geraden. Das Kreuz bezeichnet das im Appendix C hergeleitete exakte Ergebnis.

3.6.3 Flächen an einem flachen Substrat

Für drei gleiche Fäden an einem flachen Substrat erhält man nach der Orthogonaltransformation eine dreidimensionale Potentialecke mit den Öffnungswinkeln $\theta_1 = \arccos(1/\sqrt{3}) \simeq 54.7^\circ$, $\theta_2 = \arccos(1/\sqrt{2}) = 45^\circ$ und $\theta_3 = \arccos(\sqrt{2/3}) \simeq 35.3^\circ$, wobei das attraktive Kastenpotential an der Seite mit Öffnungswinkel $\theta_2 = 45^\circ$ eine um einen Faktor $\sqrt{2}$ größere Reichweite hat. Die Diskretisierung erfolgt wieder auf einem kubischen Gitter.

Abb. 3.28 zeigt mittlere Abstände für die Entbindung von bis zu drei Fäden vom flachen Substrat. Wir zeigen hier Daten für $\langle \delta l_n \rangle$, wobei die Gesamtzahl der Fäden immer gegeben ist durch $N = n + 1$; der geplottete Abstand ist also immer der zwischen dem obersten und dem darunterliegenden Faden (siehe Abb. 3.22, wo die Notation verdeutlicht wird). Die Potentialreichweite ist $\hat{l}^o = 1/\sqrt{2}$. Zusätzlich

zeigen wir auch Daten für die Entbindung von zwei identischen Fäden, die durch ∞ gekennzeichnet sind, was später motiviert wird. Für einen gegebenen Wert des Potentials U finden wir $\langle \delta l_i \rangle < \langle \delta l_j \rangle$ für $i < j$; dies verdeutlicht den Einfluß des flachen Substrats auf die benachbarten Fäden, deren Rauigkeit und Abstand zu den nächsten Nachbarn abnimmt. Dieser Einfluß, der durch benachbarte Fäden weitergeleitet wird, nimmt natürlich mit wachsendem n ab; für $n \rightarrow \infty$ sollte der Einfluß des Substrats abgeklungen sein, und das Verhalten sollte dort gleich dem eines freien Bündels sein. Die kritischen Exponenten aller Entbindungen sind universell und gegeben durch $\psi = 1 \pm 0.02$; die kritischen Potentialstärken U_c^a sind in Abb. 3.28(b) als Funktion von $1/n^2$ aufgetragen. Diese Auftragung ergibt in guter Näherung eine gerade Linie. Der Wert für zwei identische Fäden ist bei $1/n^2 = 0$ eingezeichnet, die Daten extrapolieren sehr gut zu diesem Wert hin. Dies ist die numerische Bestätigung für die intuitive Erwartung, daß der oberste Faden eines halbumendlichen Fadenbündels an einem flachen Substrat bei der gleichen Potentialstärke wie ein symmetrisches Bündel entbindet, also $U_c^a(n = \infty) = U_c^s$.

Die kritische Potentialstärke für die Entbindung des n ten Fadens von einem an ein Substrat gebundenes Bündel ist damit gegeben durch

$$U_c^a(n) = U_c^a(\infty) - \frac{U_c^a(\infty) - U_c^a(1)}{n^\lambda}, \quad (3.87)$$

wobei $\lambda = 2.0 \pm 0.2$ und $U_c^a(n = \infty) = U_c^s$.

In Abb. 3.29 zeigen wir Monte Carlo Ergebnisse für die Entbindung von bis zu zwei Membranen von einem flachen Substrat. Die Abstände $\langle \delta l_1 \rangle$ und $\langle \delta l_2 \rangle$ für $N = 3$ (offene und gefüllte Kreise) divergieren offensichtlich für verschiedene Werte der Potentialtiefe $U_c^a(n = 1)$ und $U_c^a(n = 2)$. Unterhalb von $U_c^a(2)$ sind die Werte für $\langle \delta l_1 \rangle$ für $N = 3$ gleich den Werten für $N = 2$ (offene Quadrate), wie man erwartet: nachdem die oberste Membran eines asymmetrischen Stapels mit N Membranen entbunden hat, ist das Problem reduziert auf einen Stapel mit nunmehr $N - 1$ Membranen. Oberhalb von $U_c^a(2)$ drückt die obere Membran die untere näher an das flache Substrat, wie aus dem Unterschied zwischen $\langle \delta l_1 \rangle$ für $N = 2$ und $N = 3$ gesehen werden kann; die obere Membran übt einen Druck auf die untere aus. Indem wir $\langle \delta l_1 \rangle$ für $N = 2$ und $\langle \delta l_2 \rangle$ für $N = 3$ an ein Potenzgesetz anfitzen, erhalten wir $U_c^a(1) = 2.44 \pm 0.01$ mit $\psi = 0.99 \pm 0.03$ und $U_c^a(2) = 2.67 \pm 0.03$ mit $\psi = 1.0 \pm 0.2$. Wieder sind die Einzelentbindungen universell. Die durchgezogenen Linien in Abb. 3.29(a) geben die erhaltenen Fits an, die gestrichelten Linien bezeichnen die kritischen Potentialtiefen. Wir zeigen auch die Ergebnisse für die Entbindung von zwei identischen Membranen, wieder mit ∞ bezeichnet; hier erhalten wir $U_c^s = 2.78 \pm 0.01$ und $\psi = 0.99 \pm 0.05$. In Abb. 3.29(b) plotten wir die drei kritischen Potentialtiefen als Funktion von $1/n^2$, auch hier sind die Daten konsistent mit einem Potenzgesetz der Form (3.87). Abb. 3.30 zeigt Schnitte durch zwei typische Konfigurationen der Monte Carlo Simulation von zwei Membranen an einem flachen Substrat.

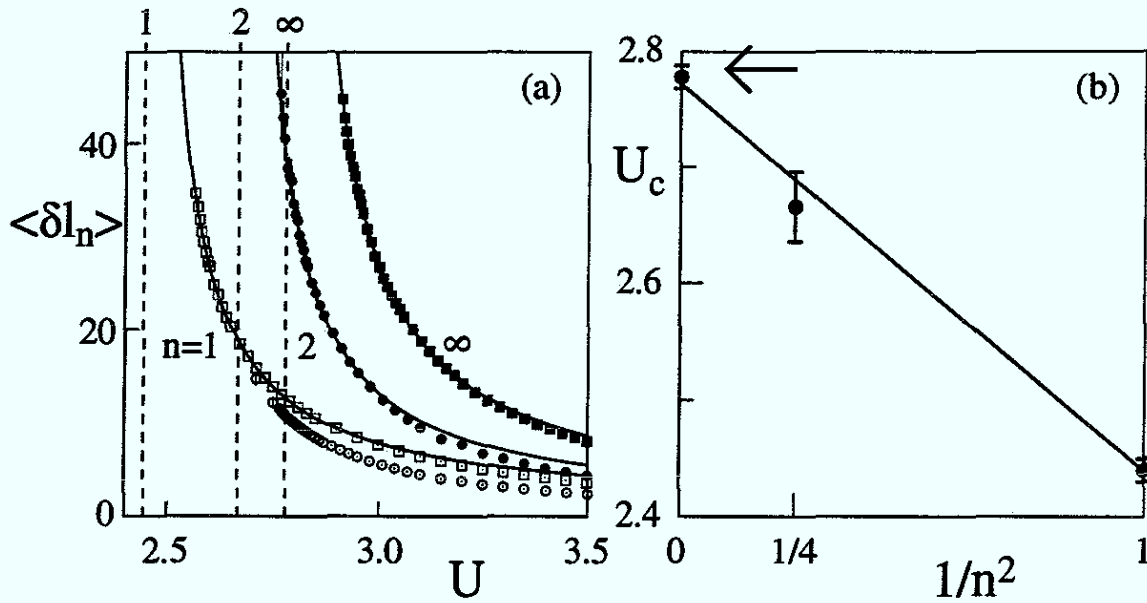


Abbildung 3.29: Monte Carlo Ergebnisse für Membranen an einem flachen Substrat. (a) Erwartungswerte des mittleren Abstandes $\langle \delta l_n \rangle$ für eine Membran an einem Substrat, ($\square$), und für zwei identische Membranen, ($\blacksquare$). Die Kreise bezeichnen die beiden Abstände für ein System von zwei Membranen an einem flachen Substrat. (b) Kritische Potentialtiefen $U_c^a(n)$ als Funktion von $1/n^2$. Der Pfeil bezeichnet den in Abschnitt 3.6.2 ermittelten Wert für drei identische Membranen.

Aus den in diesem Abschnitt vorgestellten Ergebnissen folgt, daß alle Aussagen für Fäden direkt übertragbar auf Membranen sind. Das Funktionalrenormierungsgruppenargument aus Abschnitt 3.2 ist also numerisch bestätigt.

Im Kontinuumslimites mit $\Delta x \rightarrow 0$ sieht man, daß sich die Parameter T , K , V° , und l° auf einen einzigen Parameter der Form $v \equiv V^\circ K (l^\circ/T)^2$ reduzieren lassen. Für die kritischen Temperaturen findet man dann

$$T_c^s(N) = T_c^s \quad (3.88)$$

für den symmetrischen Fall identischer Flächen. Im asymmetrischen Fall hat man ein (3.87) entsprechendes Gesetz, nämlich

$$1 - [T_c^a(\infty)/T_c^a(n)]^2 \sim 1/n^\lambda \quad (3.89)$$

mit $\lambda = 2.0 \pm 0.2$. Im Kontinuumslimites findet man auch, daß $U_c^a(\infty) = U_c^s = 2U_c^a(1)$ ist, woraus folgt, daß

$$T_c^a(\infty) = T_c^a(1)/\sqrt{2} = T_c^s \quad (3.90)$$

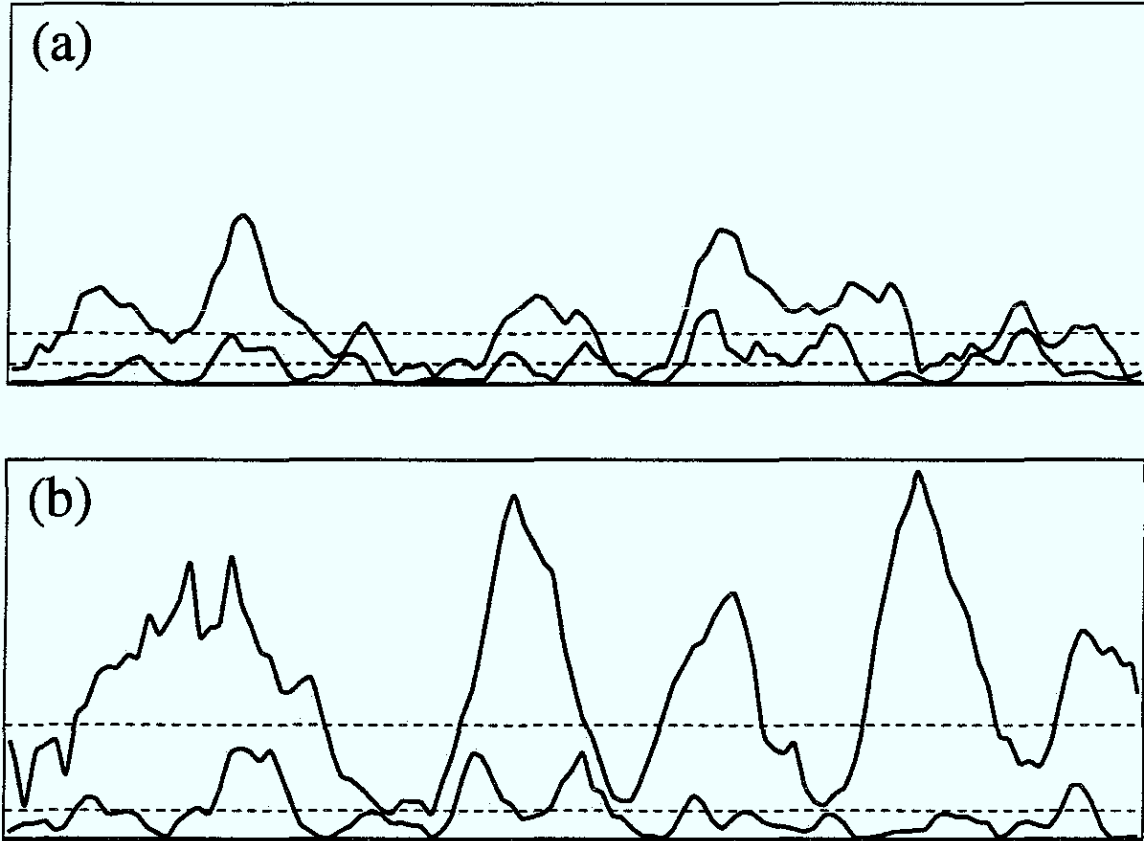


Abbildung 3.30: Schnitt durch typische Konfigurationen der zwei Membranen an einem flachen Substrat bei der Monte Carlo Simulation. Der Schnitt enthält 112 diskrete Konfigurationsdaten. Die Dicken der Membranen entsprechen den Reichweiten der Kastenpotentiale, $l^o = 1$. Der Adhäsionsübergang der unteren Membran findet bei $U_c^a(1) = 2.44 \pm 0.01$, der der oberen Membran bei $U_c^a(2) = 2.67 \pm 0.03$ statt. (a) Konfiguration für $U = 2.89$; hier ist der untere mittlere Abstand $\langle \delta l_1 \rangle = 7.6$ und der obere mittlere Abstand $\langle \delta l_2 \rangle = 19.6$, wie durch die gestrichelten Linien angedeutet wird. (b) Konfiguration für $U = 2.765$; hier ist $\langle \delta l_1 \rangle = 11.6$ und $\langle \delta l_2 \rangle = 45.5$.

gilt. Dadurch ist ein Temperaturfenster gegeben, in dem alle Entbindungen eines halbumendlichen Stapels stattfinden. Dieses Fenster wird reduziert durch die Einführung eines endlichen Cutoffs, wie man aus den numerischen Ergebnissen, Abb. 3.28 und 3.29 sieht.

Im Falle asymmetrischer Stapel oder Bündel läßt sich eine Aussage über die makroskopische Gestalt eines halbumendlichen Systems machen: alle Übergänge sind universell, der mittlere Abstand zwischen zwei Flächen $\langle \delta l_n \rangle$ ist also gegeben durch $\langle \delta l_n \rangle \sim (T_c^a(n) - T)^{-\psi}$, wobei $\psi = 1$. Daraus folgt mit (3.87), daß ein halbumendlicher Stapel bei $T = T_c^s$ durch ein selbstähnliches Dichteprofil $\rho(z) \sim z^{-\mu}$ charakterisiert ist, wobei z den Abstand vom flachen Substrat bezeichnet und $\mu = \lambda\psi/(1 + \lambda\psi) \simeq 2/3$ ist.

Im Falle von Stufen auf einer Oberfläche folgt aus dieser Dichteverteilung, daß ein sogenannter Makrostep an einer attraktiven Kante durch eine Höhenfunktion $h(z)$ beschrieben wird, die eine Singularität an der Kante besitzt, $h(z) \sim z^\Theta$, wobei $\Theta = 1/3$. Für nicht wechselwirkende Stufen erhält man für das Höhenprofil an einer Facettenkante den Wert $\Theta = 3/2$. [89]

3.7 Diskussion

In den letzten Abschnitten haben wir mit Hilfe von numerischen Methoden das Adhäsionsverhalten von Fäden und Membranen unter der Wirkung von kurzreichweitigen Potentialen studiert. Dabei zeigen Membranenstapel und Fadenbündel vollkommen analoges Verhalten, was eine numerische Bestätigung für das in Abschnitt 3.2 formulierte Funktionalrenormierungsargument ist.

Zum einen machen wir Aussagen über die Entbindungstemperaturen beziehungsweise die kritischen Potentialtiefen, und finden einen grundlegenden Unterschied zwischen symmetrischen und asymmetrischen Systemen (Gleichungen (3.86) und (3.87) bzw. (3.88) und (3.89)); hierbei sind die verwendeten Methoden, Transfer Matrix Iterationen für die Fäden und Monte Carlo Simulationen für die Membranen, sehr verläßlich und die Resultate robust gegenüber Finite-Size Effekten und anderen systematischen Fehlern.

Zum anderen berechnen wir effektive kritische Exponenten, die aber wegen der durch die Numerik bedingte Einschränkung auf endliche Längenskalen nicht notwendigerweise mit den kritischen Exponenten für das asymptotische universelle Verhalten übereinstimmen. Auch hier unterscheiden sich die symmetrischen Systeme grundlegend von den asymmetrischen. Die asymmetrischen Adhäsionsübergänge, hierbei divergiert immer nur *eine* Abstandsvariable, sind durch universelle Exponenten gekennzeichnet. Bei den symmetrischen Systemen, hier divergieren *alle* Abstandsvariablen gleichzeitig, stellen wir Abweichungen von dem universellen Wert auf den numerisch erreichbaren Längenskalen fest.

Es gibt inzwischen mehrere analytische Berechnungen für ähnliche Systeme, die aber alle universelles kritisches Verhalten vorhersagen: Zwei kontinuierliche Mean-Field Theorien für den Entbindungsübergang,[69, 35] eine approximative Abbildung des N -Faden Problems auf ein exakt lösbares Quantenspin-Problem,[7] und eine Bethe-Ansatz Lösung des N -Faden Problems im Limes verschwindender Potentialreichweite.[36] Zusätzlich berechnen wir mit einer Störungstheorie den Effekt von einem Potentialwinkel $\theta < \pi/2$ (Anhang D.1), was den Fluktuationseffekt eines Fadens zwischen zwei anderen Fäden beschreibt, und den Effekt einer Dreipunktwechselwirkung (Anhang D.2); in beiden Fällen ist die Störung irrelevant in linearer Ordnung.

Die Frage ist also, ob die in den numerischen Ergebnissen beobachtete Nicht-universalität ein Crossoverphänomen ist, hervorgerufen durch die Nähe eines anderen Fixpunktes im globalen Funktionalrenormierungsraum. Die erweiterte Datenanalyse in Abschnitt 3.4.3 macht deutlich, daß die Daten auf den berechneten Längenskalen keinen systematischen Trend hin zu universellen Exponenten zeigen. Natürlich könnte der Crossover zu anderen, asymptotischen Exponenten auf sehr großen Längenskalen einsetzen, die mit den hier verwendeten numerischen Methoden nicht erreichbar sind.

Universelles Verhalten bei der Entbindung von N identischen Flächen könnte darauf hindeuten, daß das System faktisch separiert, da dann sowohl die Entbindungstemperaturen als auch die kritischen Exponenten dem des Zweiflächen Problems entsprächen. Auf der anderen Seite separiert das N -Flächen Problem im asymmetrischen Fall faktisch nicht. Dies kann dadurch gesehen werden, daß $N - 1$ Flächen an einem flachen Substrat alle bei unterschiedlichen Potentialtiefen entbinden (gegeben durch (3.87)), und nicht, wie es faktische Separabilität nahelegen würde, alle bei der Entbindungstemperatur eines symmetrischen N -Flächen Systems (mit Ausnahme der untersten, an das Substrat gebundenen Fläche).

Die Frage nach den asymptotischen kritischen Exponenten des N -Flächen Problems ist also noch offen.

Kapitel 4

Adhäsion durch äußeren Druck

In diesem Kapitel besprechen wir die Entbindung von Fäden und Membranen unter der Wirkung eines äußeren Druckes. Dieser Vorgang läuft in Analogie zur vollständigen Benetzung ab.[47] Der Druck wird dabei durch eine lineare Wechselwirkung zwischen den Flächen beschrieben. Wie in der Einführung besprochen, gehört ein lineares Potential zu dem schwach-fluktuierenden Regime, und das kritische Verhalten folgt aus der einfachen Superposition von direkter Wechselwirkung, dem Druck, und der fluktuationsinduzierten effektiven Wechselwirkung. Insbesondere findet der Adhäsionsübergang bei verschwindendem Druck statt.

Dieses Skalenbild wird zuerst getestet und bestätigt für den Fall von zwei Fäden, welcher im Schrödingerformalismus exakt gelöst werden kann. Diese Rechnung erlaubt es, die Amplitude c_{FI} der fluktuationsinduzierten Wechselwirkung zu bestimmen. Diese Konstante wurde theoretisch für den Fall von Membranen mit verschiedenen Näherungsmethoden abgeschätzt[31, 15] und auch mit Hilfe von Monte Carlo Simulationen[40, 41, 28] bestimmt; auch experimentell ist diese Konstante durch Röntgenstreuung an Multischichtsystemen zugänglich.[92, 93, 90] Dabei wurde eine quantitative Übereinstimmung einer harmonischen Approximation von Helfrich mit den experimentellen Ergebnissen festgestellt; Monte-Carlo Simulationen liefern jedoch einen Wert, der um einen Faktor zwei davon abweicht. Diese Diskrepanz wird in Abschnitt 4.6 diskutiert.

Experimentell kann der Druck zwischen Membranen in einem Stapel auf verschiedene Weisen über mehrere Größenordnungen variiert werden,[81, 86] und ist damit als Kontrollparameter gut geeignet. Andererseits ist in vielen experimentellen Situationen der Abstand zwischen den Membranen durch die Lipid-Konzentration festgelegt. Der Abstand ist die zum Druck thermodynamisch konjugierte Größe. Die beiden Ensembles (konstanter Druck oder konstanter Abstand) sind einander äquivalent. Die Beziehung zwischen beiden Ensembles wird hergestellt durch den Druck, der die Rolle eines Lagrangemultiplikators spielt, mit dem der entsprechende Abstand eingestellt wird.

Die Ergebnisse der folgenden Kapitel zeigen, daß die Analogie zwischen Membranen und Fäden auch auf Amplitudenverhältnisse der verschiedenen relevanten Längenskalen zutrifft.

4.1 Zwei Fäden

Der Hamiltonian für zwei Fäden mit Steifigkeit K ist nach der Abspaltung der Schwerpunktkoordinate (siehe Abschnitt 2.2.2) gegeben durch

$$\mathcal{H} = \int dx \frac{K}{4} \left(\frac{dl}{dx} \right)^2 + Pl. \quad (4.1)$$

Der zwischen den Fäden herrschende Druck P wirkt nur auf die Abstandsvariable l , und eine harte Wand für $l = 0$ ist implizit vorausgesetzt. Die aus (4.1) folgende Schrödingergleichung lautet

$$\left[-\frac{T^2}{K} \frac{\partial^2}{\partial l^2} + Pl - E_n \right] \Phi(l) = 0, \quad (4.2)$$

die sich mit den Variablentransformationen

$$y \equiv (PK)^{1/3} T^{-2/3} l, \quad (4.3)$$

$$\varepsilon_n \equiv (PT)^{-2/3} K^{1/3} E_n \quad (4.4)$$

auf folgende Form bringen läßt:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial y^2} + y - \varepsilon_n \right] \Psi(y) = 0. \quad (4.5)$$

Mit der Randbedingung $\Psi(y = \infty) = 0$ ist die Lösung gegeben durch

$$\Psi(y) = C \mathcal{A}_i(y - \varepsilon_n), \quad (4.6)$$

wobei $\mathcal{A}_i$ eine Airyfunktion und C eine durch die Normierung festgelegte Konstante ist. Die harte Wand bei $l = 0$ erzwingt $\Psi(0) = 0$, woraus $\mathcal{A}_i(-\varepsilon_n) = 0$ folgt. Das Energiespektrum der Schrödingergleichung (4.5) ist also gegeben durch die Nullstellen der Airyfunktion, somit $\varepsilon_0 = 2.3381$, $\varepsilon_1 = 4.0879$, und so weiter.[2, 48] Für die Grundzustandsenergie E_0 der Schrödingergleichung (4.1), und damit die freie Energie f des Zwei-Faden-Problems, gilt

$$f \equiv E_0 = \varepsilon_0 (PT)^{2/3} K^{-1/3}. \quad (4.7)$$

Daraus kann direkt die interne Energie U und der Abstandserwartungswert $\langle l \rangle$ berechnet werden:

$$U \equiv \langle \mathcal{H} \rangle = -T^2 \frac{\partial f/T}{\partial T} = \frac{1}{3}f, \quad (4.8)$$

$$\langle l \rangle = T \frac{\partial f/T}{\partial P} = \frac{2}{3}f/P = \varepsilon_0 \frac{2}{3} \left(\frac{T^2}{KP} \right)^{1/3}. \quad (4.9)$$

Mit $f = U - TS$ folgt für den entropischen Beitrag zur freien Energie

$$TS = -T \frac{\partial f}{\partial T} = -\frac{2}{3}f. \quad (4.10)$$

Für den elastischen Anteil zur freien Energie erhalten wir

$$\langle \mathcal{H}_{el} \rangle \equiv U - P\langle l \rangle = -\frac{1}{3}f, \quad (4.11)$$

das heißt die elastische freie Energie ist maximal im entbundenen Zustand. Es ist sinnvoll, einen Fluktuationsanteil an der freien Energie zu definieren, der aus der Summe vom elastischen und entropischen Anteil gebildet wird: $V_{Fl} \equiv \langle \mathcal{H}_{el} \rangle - TS = f/3$. Dieses effektive Fluktuationspotential läßt sich mit (4.9) als Funktion des mittleren Abstandes schreiben,

$$V_{Fl}(\langle l \rangle) = \frac{c_{Fl} T^2}{K \langle l \rangle^2}, \quad (4.12)$$

wobei die Amplitude den Wert

$$\boxed{c_{Fl} = (2\varepsilon_0/3)^3/2 = 1.8936} \quad (4.13)$$

hat. Die freie Energie läßt sich somit als Superposition der direkten Wechselwirkung Pl und der effektiven Wechselwirkung $V_{Fl}(l)$ auffassen. Die Minimierung von $Pl + V_{Fl}(l)$ führt in selbstkonsistenter Weise wieder auf (4.9) zurück, wie zu erwarten für eine direkte Wechselwirkung des Regimes der schwachen Fluktuationen.

In umgekehrter Weise können wir im Falle von Membranen mit Hilfe der Funktionalen Form von $V_{Fl}(l)$ (die analog zu (4.12) ist, siehe Abschnitt 2.2.5) durch Berechnung von $\langle l \rangle$ als Funktion von P den Wert von c_{Fl} als Fitparameter bestimmen; dabei benutzen wir Monte Carlo Simulationsdaten (Abschnitt 4.2).

Die parallele Korrelationslänge $\xi_{||}$ ist im Schrödingerformalismus gegeben durch

$$\xi_{||} = \frac{T}{E_1 - E_0} = \left(\frac{TK}{P^2} \right)^{1/3} \frac{1}{\varepsilon_1 - \varepsilon_0}, \quad (4.14)$$

wobei $\varepsilon_1 - \varepsilon_0 = 1.7498$ ist.

Für die Bestimmung der senkrechten Korrelationslänge $\xi_{\perp}$ berechnen wir zunächst

$$\langle y^2 \rangle = \frac{\int_0^\infty y^2 \mathcal{A}^2(y - \varepsilon_0) dy}{\int_0^\infty \mathcal{A}^2(y - \varepsilon_0) dy} = \varepsilon_0^2 \frac{8}{15}, \quad (4.15)$$

für die Rauigkeit erhalten wir dann

$$\xi_{\perp} \equiv \sqrt{\langle l^2 \rangle - \langle l \rangle^2} = \varepsilon_0 \frac{2}{3\sqrt{5}} \left(\frac{T^2}{KP} \right)^{1/3}. \quad (4.16)$$

Das Verhältnis des Abstandes zur Rauigkeit ergibt sich damit zu

$$\boxed{\frac{\langle l \rangle}{\xi_{\perp}} = \sqrt{5}}, \quad (4.17)$$

das Verhältnis des Abstandes zur parallelen Korrelationslänge ist gegeben durch

$$\boxed{\frac{\langle l \rangle}{\xi_{\parallel}^{1/2}} = \frac{2\varepsilon_0\sqrt{\varepsilon_1 - \varepsilon_0}}{3} \left(\frac{T}{K} \right)^{1/2} = 2.0619 \left(\frac{T}{K} \right)^{1/2}}. \quad (4.18)$$

Prinzipiell können die Werte für c_{Fl} und für die Verhältnisse der Längenskalen, (4.17) und (4.18), von der Anzahl der Fäden abhängen. In Abschnitt 4.2 stellen wir fest, daß der Wert von c_{Fl} für Membranen nur eine schwache Abhängigkeit von der Anzahl der Membranen zeigt. Wegen der Analogie zwischen Fäden und Membranen ist es plausibel, daß das gleiche für Fäden gilt. Gompfer und Kroll[28] bestimmten c_{Fl} für den Fall von N Fäden zwischen zwei harten Wänden und erhielten

$$c_{Fl}(N) = \frac{(2N + 1)\pi^2}{12(N + 1)}, \quad (4.19)$$

woraus $c_{Fl}(N = \infty) \simeq 1.645$ folgt. Hier kommt die N -Abhängigkeit in erster Linie durch den Einfluß der harten Wände, der sich mit größer werdendem N verliert. Es ist nicht klar, ob die Abweichung dieses Wertes von unserem Ergebnis auf einen prinzipiellen Unterschied zwischen den beiden Berechnungsmethoden zurückzuführen ist, oder ob sie auf eine N -Abhängigkeit von c_{Fl} für N durch Druck zusammengehaltene Fäden hinweist.

4.2 Identische Membranen

Die Konfigurations-Energie für N identische Membranen ist gegeben durch

$$\mathcal{H}\{l_N\} = \int d^2x \left\{ \sum_{n=0}^{N-1} \frac{K_n}{2} (\nabla^2 l_n)^2 + \sum_{n=0}^{N-2} P_{n+1} (l_{n+1} - l_n) \right\}. \quad (4.20)$$

Der Nichtdurchdringbarkeit der Membranen wird durch die Bedingung $l_1 < l_2 \cdots < l_{N-1}$ Rechnung getragen. P_{n+1} ist der Druck zwischen der n ten und der $(n+1)$ ten Membran. Wegen der Linearität dieser Wechselwirkung kann man den Term der potentiellen Energie für $P \equiv P_{n+1}$ ersetzen durch

$$P(l_{N-1} - l_0) = P \sum_{n=0}^{N-2} (l_{n+1} - l_n). \quad (4.21)$$

Dann wirkt der Druck nur auf die beiden äußeren Membranen. Nach der Diskretisierung der Membranenkonfigurationen mit $l_n^{(i,j)} \equiv l(x^{(i,j)})$ und einer Gitterkonstanten Δx ist der Hamiltonian für den Fall N identischer Membranen mit $K \equiv K_n$ gegeben durch

$$\mathcal{H}\{z_N^{(i,j)}\}/T = \sum_{i,j} \left\{ \sum_{n=0}^{N-1} \frac{1}{2} \left(\nabla_d^2 z_n^{(i,j)} \right)^2 + p(z_{N-1}^{(i,j)} - z_0^{(i,j)}) \right\}, \quad (4.22)$$

mit $p \equiv (\Delta x)^3 P / (TK)^{1/2}$ und $z_n^{(i,j)} \equiv (K/T)^{1/2} l_n^{(i,j)} / \Delta x$. Das Problem hängt also nur noch von dem Parameter p ab; insbesondere ist der Kontinuums limites $\Delta x \rightarrow 0$ für $p \rightarrow 0$ gegeben. Die reskalierten Abstände zwischen den Membranen sind definiert als

$$\langle \delta z_n \rangle \equiv \langle z_n - z_{n-1} \rangle, \quad (4.23)$$

und entsprechend die Rauigkeiten (oder senkrechten Korrelationslängen)

$$\xi_{\perp} \equiv \langle \delta z^2 \rangle_c^{1/2} = (\langle \delta z^2 \rangle - \langle \delta z \rangle^2)^{1/2}. \quad (4.24)$$

Wir berechnen außerdem die parallelen Korrelationslängen $\xi_{\parallel}$ mit der in Abschnitt 4.5 vorgestellten Methode.

In Abb. 4.1 zeigen wir die Ergebnisse für ein System bestehend aus zwei Membranen. Die Daten skalen wie $\xi_{\perp} \sim \xi_{\parallel} \sim \langle \delta z \rangle \sim p^{-\psi}$, was zeigt, daß der Rauigkeitsexponent den Wert $\zeta = 1$ hat (wie man es für Membranen erwartet); der Adhäsionsexponent ist gegeben durch $\psi = 1/3$, was aus der im letzten Abschnitt besprochenen Überlagerung von direkter Wechselwirkung $P\delta l$ und fluktuationsinduzierter Wechselwirkung $V_{Fl}(\delta l)$,

$$F(\delta l)/T = \frac{P\delta l}{T} + c_{Fl} \frac{T}{K(\delta l)^2} = p\delta z + \frac{c_{Fl}}{(\delta z)^2} \equiv \hat{F}(\delta z), \quad (4.25)$$

durch Minimierung mit $\partial F(\delta l)/\partial \delta l = 0 = \partial \hat{F}(\delta z)/\partial \delta z$ folgt:

$$\langle \delta l \rangle = \left(\frac{2c_{Fl}T^2}{KP} \right)^{1/3} \quad \text{und} \quad \langle \delta z \rangle = \left(\frac{2c_{Fl}}{p} \right)^{1/3}. \quad (4.26)$$

Aus den Daten für zwei Membranen erhalten wir für die Amplitude der Fluktuationswechselwirkung $c_{Fl} = 0.1161 \pm 0.002$. In Abb. 4.2 zeigen wir das Verhältnis

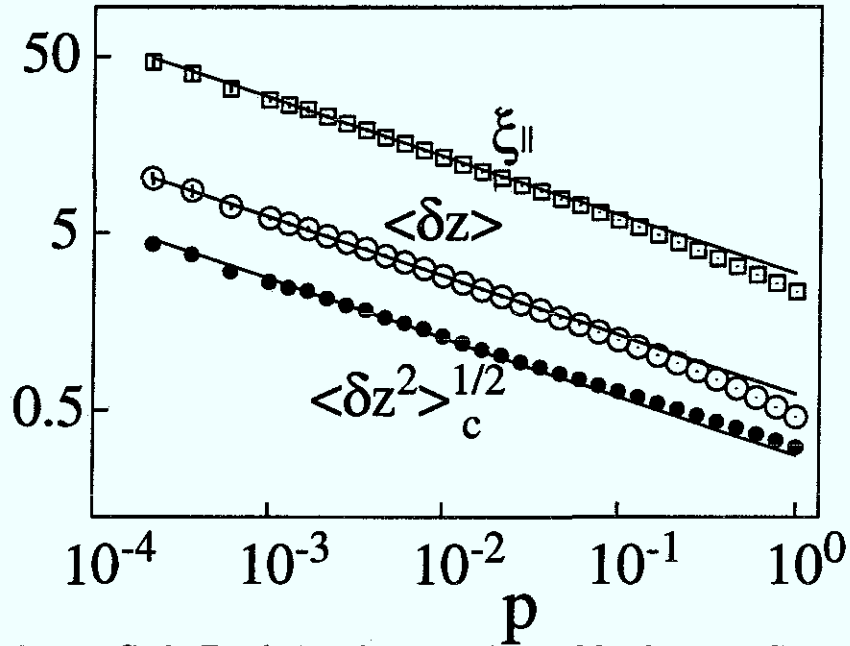


Abbildung 4.1: Monte Carlo Ergebnisse für zwei gleiche Membranen. Gezeigt werden der reskalierte mittlere Abstand $\langle \delta z \rangle$, die Rauigkeit $\langle \delta z^2 \rangle_c^{1/2}$ und die parallele Korrelationslänge $\xi_{||}$ als Funktion des äußeren Druckes $p \equiv (\Delta x)^3 P / (TK)^{1/2}$. Die Daten skalieren wie $\sim p^{-1/3}$, wie durch die Geraden verdeutlicht wird. Der Vorfaktor ist für $\langle \delta z \rangle$ gegeben durch $0.6146 = (2c_{Fl})^{1/3}$.

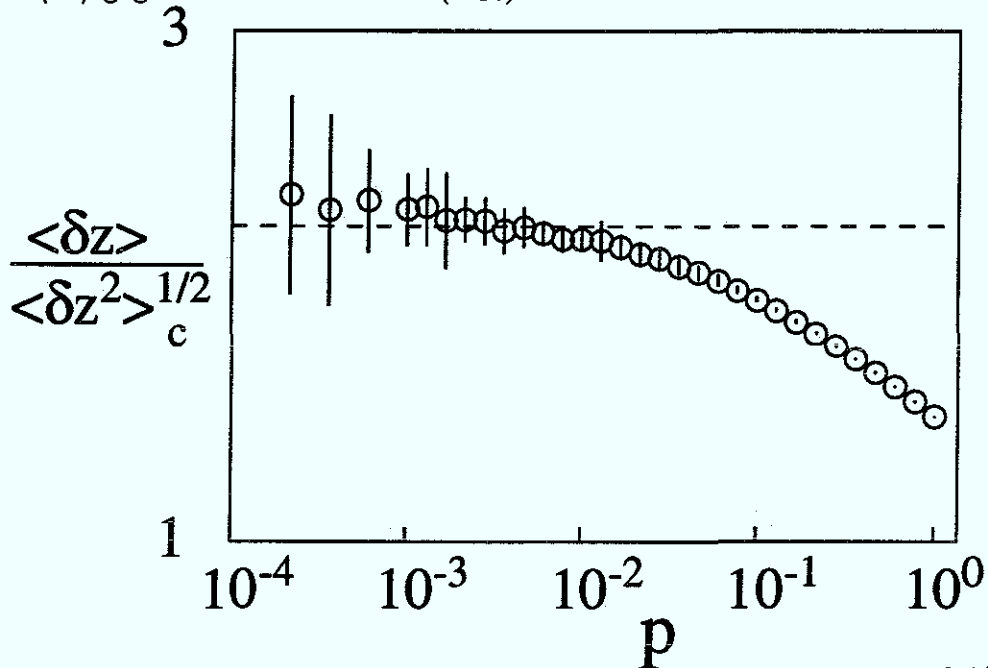


Abbildung 4.2: Verhältnis vom Abstand $\langle \delta z \rangle$ zur Rauigkeit $\xi_{\perp} = \langle \delta z^2 \rangle_c^{1/2}$; das Ergebnis für Fäden, $\langle \delta z \rangle / \xi_{\perp} = \sqrt{5}$, ist durch die gestrichelte Linie angedeutet.

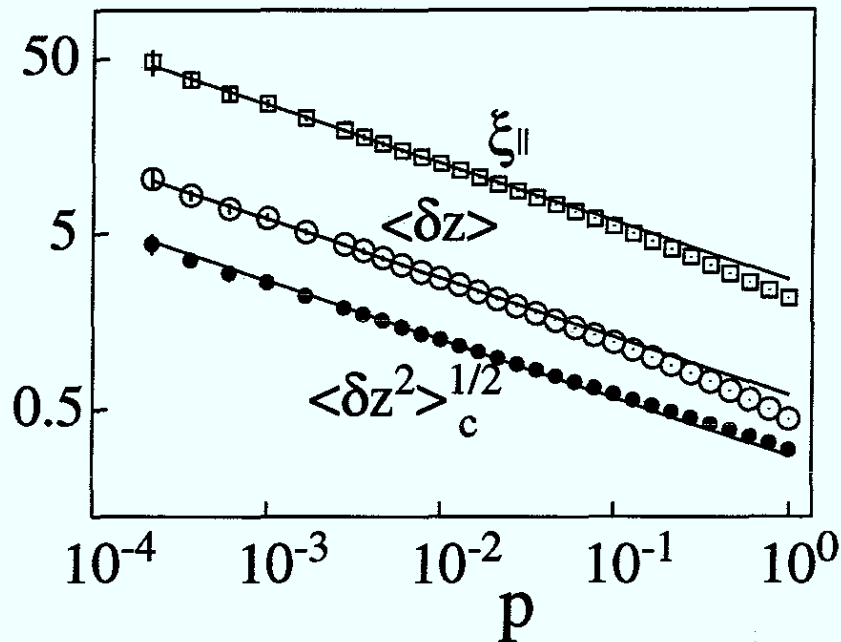


Abbildung 4.3: Monte Carlo Ergebnisse für drei gleiche Membranen. Gezeigt werden die über die beiden Membranenabstände gemittelten Daten für $\langle \delta z \rangle$, $\langle \delta z^2 \rangle_c^{1/2}$ und $\xi_{||}$. Der Vorfaktor ist für $\langle \delta z \rangle$ gegeben durch $0.6093 = (2c_{Fl})^{1/3}$.

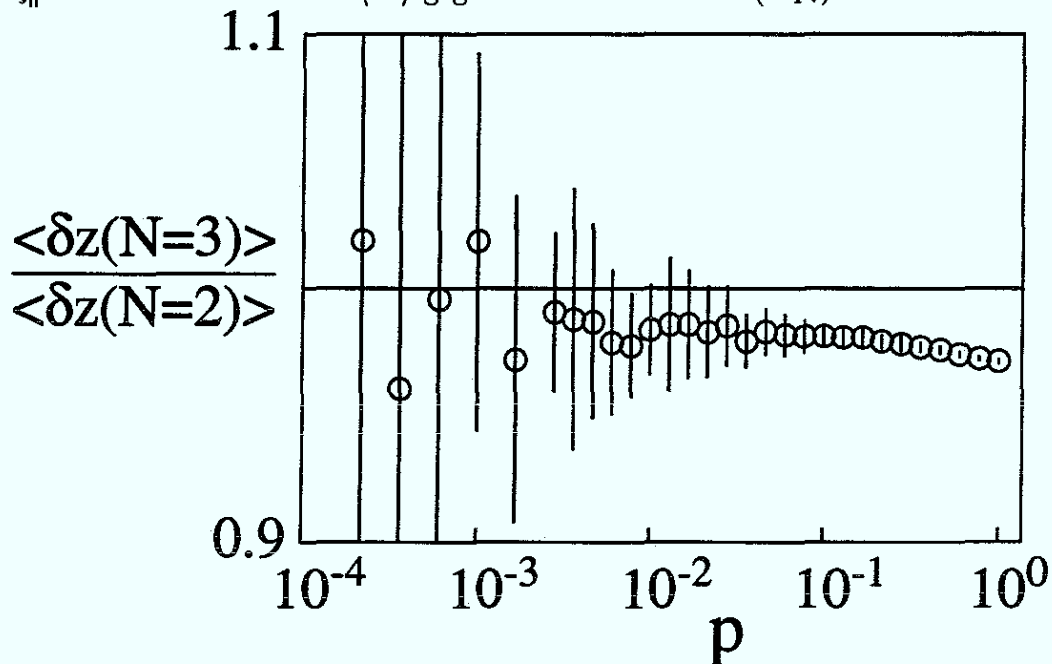


Abbildung 4.4: Verhältnis der Abstände für ein System von drei Membranen und ein System von zwei Membranen. Für genügend kleinen Druck ist das Verhältnis größer als 0.98 und der Unterschied zu 1 ist dann kleiner als der numerische Fehler.

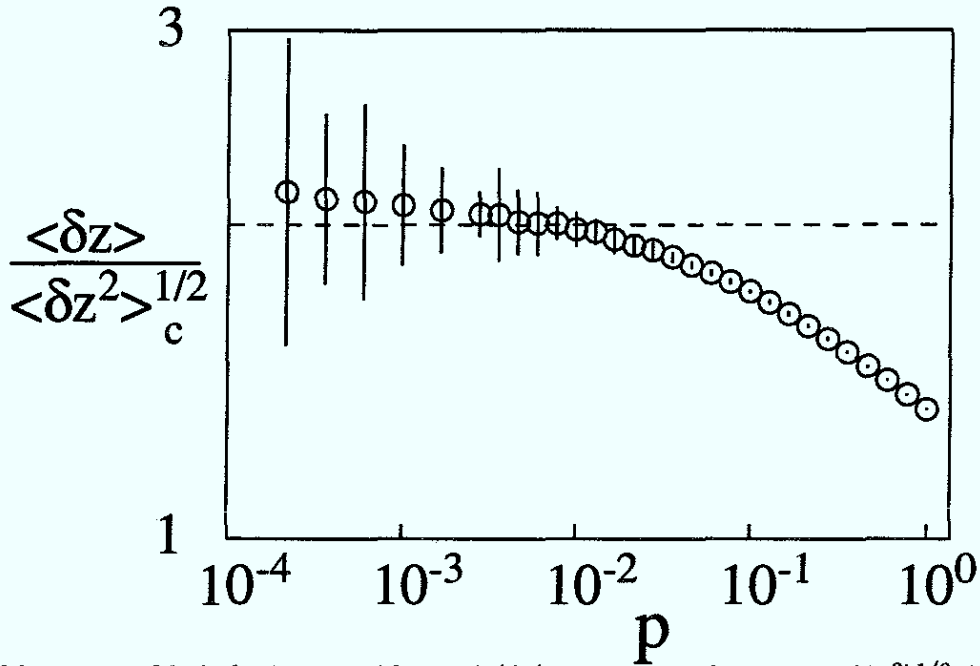


Abbildung 4.5: Verhältnis vom Abstand $\langle \delta z \rangle$ zur Rauigkeit $\xi_{\perp} = \langle \delta z^2 \rangle_c^{1/2}$ für drei Membranen; die gestrichelte Linie bezeichnet $\sqrt{5}$.

$\langle \delta z \rangle / \xi_{\perp}$ als Funktion vom Druck; für genügend kleinen Druck ist das Verhältnis in guter Näherung durch $\sqrt{5}$ gegeben, wie durch die gestrichelte Linie verdeutlicht wird. Der in Abschnitt 4.1 für zwei Fäden berechnete Wert für das Verhältnis zwischen diesen beiden Längenskalen, Gleichung (4.17), scheint also auch für Membranen zu gelten. Die in Abb. 4.1. gezeigte parallele Korrelationslänge $\xi_{\parallel}$ ist nur bis auf einen Faktor bestimmt; deshalb können wir das Verhältnis $\langle \delta z \rangle / \xi_{\parallel}$ nicht direkt mit dem für Fäden ermittelten Wert (4.18) vergleichen. In Abschnitt 5.3 ermitteln wir die "echte" parallele Korrelationslänge, deren Verhältnis mit dem Abstand sich näherungsweise durch (4.18) beschreiben läßt.

In Abb. 4.3 zeigen wir Daten für ein System bestehend aus drei Membranen; da die beiden mittleren Membranenabstände aus Symmetriegründen gleich sein sollten, betrachten wir den Mittelwert

$$\langle \delta z \rangle \equiv \frac{\langle \delta z_1 \rangle + \langle \delta z_2 \rangle}{2}, \quad (4.27)$$

und entsprechende Mittelwerte für $\xi_{\perp}$ und $\xi_{\parallel}$. Hier erhalten wir durch Fitten des Abstandes $\langle \delta z \rangle$ für die Amplitude der Fluktuationswechselwirkung $c_{FI} = 0.1131 \pm 0.003$; innerhalb der Fehlergrenzen ist dieser Wert gerade noch mit dem Wert für das System aus zwei Membranen vereinbar.

In Abb. 4.4 zeigen wir das Verhältnis der mittleren Abstände für einen Stapel aus drei Membranen und einen Stapel aus zwei Membranen als Funktion vom

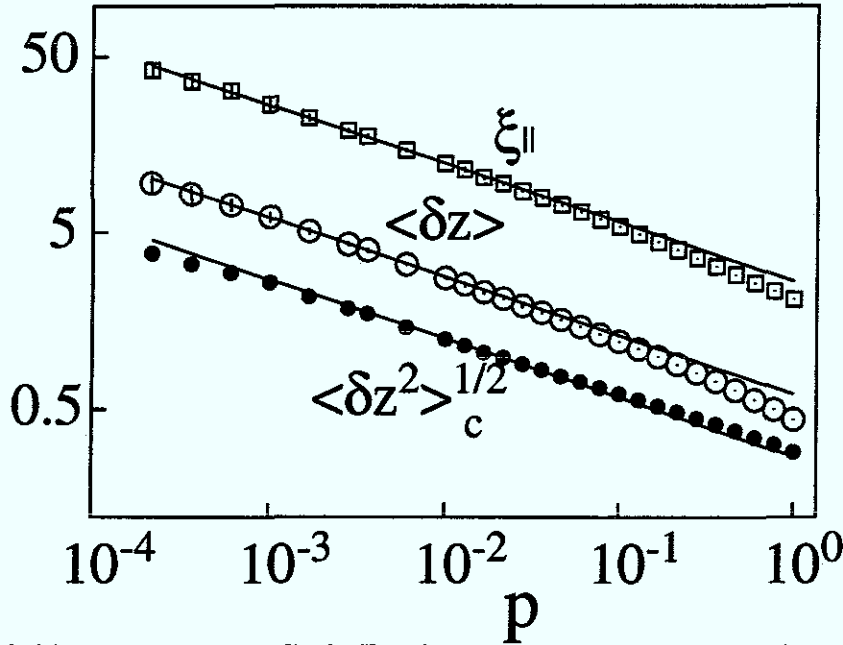


Abbildung 4.6: Monte Carlo Ergebnisse für vier gleiche Membranen. Gezeigt werden die über die drei Membranenabstände gemittelten Daten für $\langle \delta z \rangle$, $\langle \delta z^2 \rangle_c^{1/2}$ und $\xi_{||}$. Unterschiede zwischen dem inneren Abstand und den beiden äußeren Abständen sind auf diesen Skalen nicht zu erkennen. Der Vorfaktor ist für $\langle \delta z \rangle$ gegeben durch $0.6075 = (2c_{Fl})^{1/3}$.

Druck. Die Ergebnisse zeigen deutlich, daß der Abstand zwischen den Membranen in beiden Systemen ziemlich gleich ist. Für kleine Drücke $p < 0.1$ ist das Verhältnis größer als 0.98, wobei für noch kleinere Drücke der numerische Fehler zunimmt und keine klare Aussage möglich macht: ob das Verhältnis asymptotisch eins wird, ist also nicht klar. Ein Verhältnis von eins würde bedeuten, daß die Stärke der Fluktuationswechselwirkungen für Stapel aus zwei und Stapel aus drei Membranen gleich ist.

In Abb. 4.5 zeigen wir das Verhältnis $\langle \delta z \rangle / \xi_{\perp}$ als Funktion vom Druck; wieder ist das Verhältnis für genügend kleinen Druck in guter Näherung durch $\sqrt{5}$ gegeben, wie durch die gestrichelte Linie verdeutlicht wird.

Für einen Membranenstapel aus vier Membranen (siehe Abb. 4.6) unterscheiden wir zwischen den äußeren Membranenabständen,

$$\langle \delta z_O \rangle \equiv \frac{\langle \delta z_1 \rangle + \langle \delta z_3 \rangle}{2}, \quad (4.28)$$

und dem inneren Abstand,

$$\langle \delta z_I \rangle \equiv \langle \delta z_2 \rangle. \quad (4.29)$$

In der Abb. 4.6 mitteln wir tatsächlich über alle drei Abstände, da auf den Skalen der

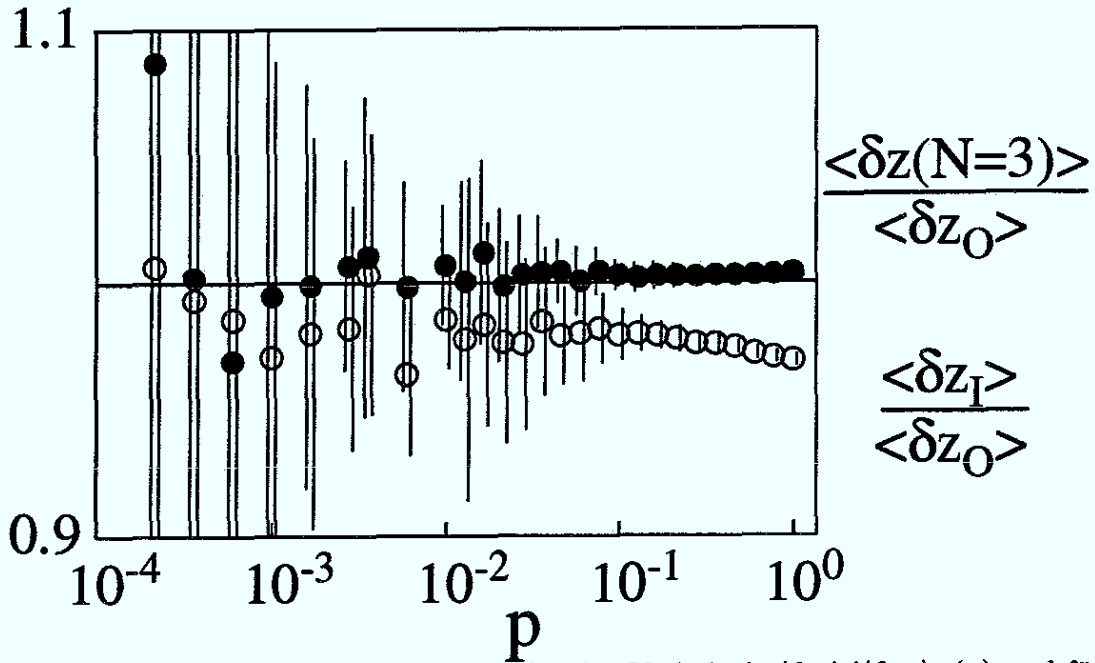


Abbildung 4.7: Monte Carlo Ergebnisse für das Verhältnis $\langle \delta z_I \rangle / \langle \delta z_O \rangle$, (o) und für $\langle \delta z(N=3) \rangle / \langle \delta z_O \rangle$, (•).

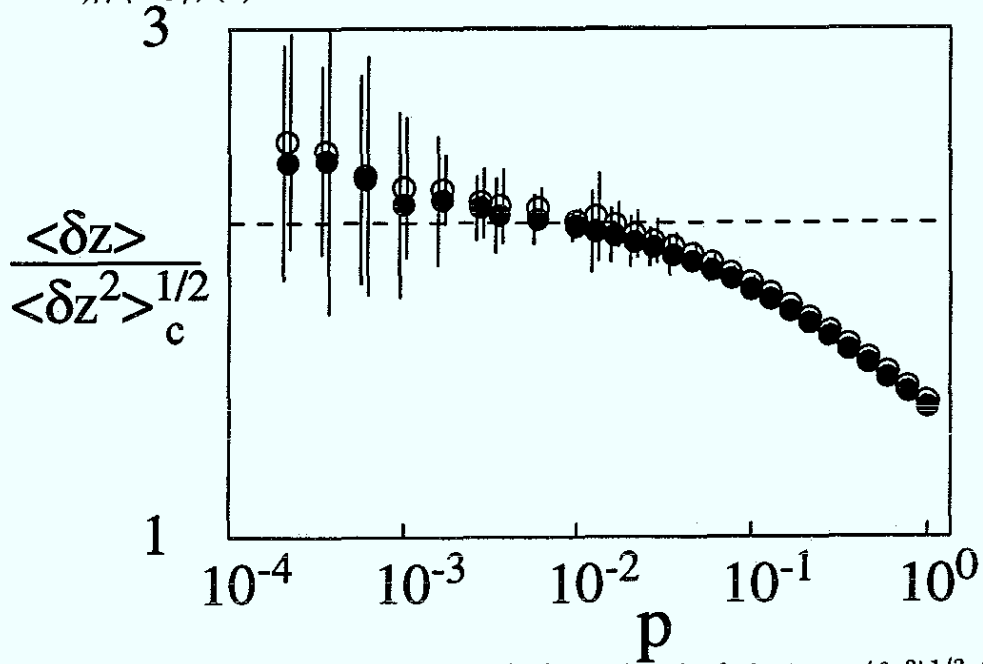


Abbildung 4.8: Verhältnis vom Abstand $\langle \delta z \rangle$ zur Rauigkeit $\xi_{\perp} = \langle \delta z^2 \rangle_c^{1/2}$ für die innere Abstandskoordinate (o) und die äußeren Abstandskoordinaten (•) für vier Membranen; die gestrichelte Linie bezeichnet $\sqrt{5}$.

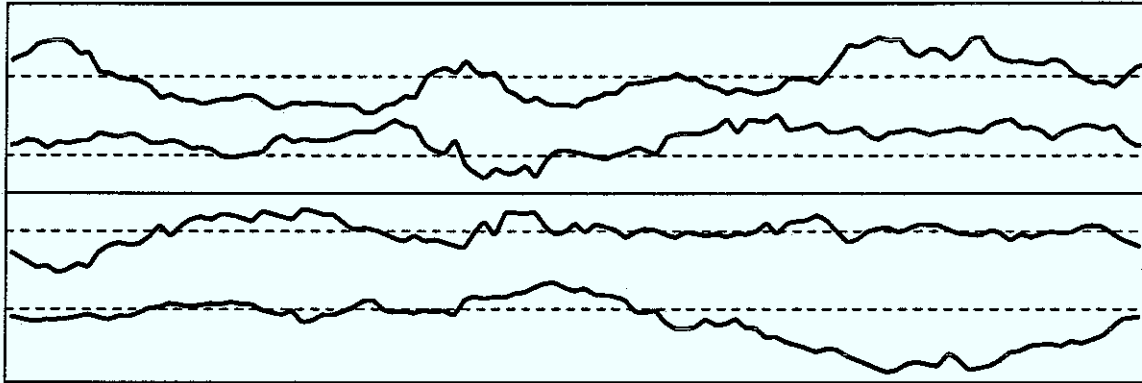


Abbildung 4.9: Schnitt durch typische Konfigurationen der vier Membranen bei der Monte Carlo Simulation für $p = 0.001$. Der Schnitt enthält 112 diskrete Konfigurationsdaten. Die Abstände zwischen den Membranen sind gegeben durch $\langle \delta l_3 \rangle = 6.27 \pm 0.3$, $\langle \delta l_2 \rangle = 6.02 \pm 0.53$, $\langle \delta l_1 \rangle = 6.14 \pm 0.35$, wie durch die gestrichelten Linien angedeutet wird. Die Position der Schwerpunktkoordinate wird durch die durchgezogene Linie angegeben und wird konstant gehalten.

Grafik ein Unterschied zwischen inneren und äußeren Abständen nicht zu erkennen wäre. Hier erhalten wir $c_{Fl} = 0.1121 \pm 0.005$.

In Abb. 4.7 zeigen wir das Verhältnis zwischen dem inneren Abstand, $\langle \delta z_I \rangle$, und den äußeren Abständen, $\langle \delta z_O \rangle$, als Funktion vom Druck (offene Kreise). Der Graph gleicht quantitativ dem in Abb. 4.4 gezeigten, auch hier ist das Verhältnis für Drücke um $p \simeq 0.1$ ungefähr 0.98. Zur Verdeutlichung dieser Analogie zeigen wir das Verhältnis der Abstände in einem Stapel aus drei Membranen, $\langle \delta z(N=3) \rangle$, und der äußeren Abstände im Stapel aus vier Membranen, $\langle \delta z_O \rangle$, (gefüllte Kreise). Dieses Verhältnis ist für alle Drücke in sehr guter Näherung durch eins gegeben. Die äußeren Membranenabstände in einem Viererstapel haben also den gleichen Wert wie die Abstände in einem Dreierstapel. Die Fluktuationskonstante c_{Fl} ist grafisch in Abb. 4.6 durch die durch die Daten für $\langle \delta z \rangle$ gezogene Gerade bestimmt. Sie ergibt sich durch arithmetische Mittelung der separat bestimmten Konstanten für die äußeren Abstände, $c_{Fl} = 0.1131 \pm 0.003$, und für den inneren Abstand, $c_{Fl} = 0.1101 \pm 0.005$. Die Fluktuationsamplituden in einem Viererstapel zeigen also ein von den äußeren Membranenabständen zu dem inneren Abstand linear abfallendes Verhalten; dies erinnert an das Verhalten der effektiven Exponenten im Falle von kurzreichweitiger Anziehung zwischen vier Fäden (Abschnitt 3.6.2).

In Abb. 4.8 zeigen wir die Verhältnisse des Abstandes $\langle \delta z \rangle$ zur Rauigkeit $\xi_\perp$, getrennt für die äußeren (gefüllte Kreise) und inneren Abstände (offene Kreise). Diese Verhältnisse sind tatsächlich kaum voneinander zu unterscheiden, woraus folgt, daß der Wert dieses Verhältnisses universeller als die Fluktuationskonstante zu sein scheint. Die Abweichungen weg vom Wert $\sqrt{5}$ für sehr kleinen Druck sind wahr-

scheinlich durch Finite-Size Effekte verursacht, wie auch aus Abb. 4.6 deutlich wird, wo die Abweichungen vom $p^{-1/3}$ Gesetz für die Rauigkeit stärker als für den Abstand ist.

Eine Momentaufnahme eines Schnittes durch die Konfigurationen von vier Membranen wird in Abb. 4.9 gezeigt. Die Schwerpunktkoordinate ist durch eine durchgezogene Linie angedeutet; verglichen mit Abb. 3.24 für den Fall von drei kurzreichweitig wechselwirkenden Membranen fällt die geringere relative Rauigkeit ins Auge. Kollisionen zwischen den Membranen, in Abb. 3.24 durch die kurzreichweitige Anziehung verursacht, kommen praktisch nicht vor.

Die Ergebnisse der verschiedenen Berechnungen zusammenfassend, ist es numerisch also nicht klar, ob die Fluktuationskonstante c_{Fl} asymptotisch von der Anzahl der Membranen abhängt. Der Trend in c_{Fl} als Funktion von N ist innerhalb der numerischen Fehlergrenzen und kann auf eine solche Abhängigkeit hindeuten, kann aber auch auf andere Effekte zurückzuführen sein; dann wäre der für zwei Membranen ermittelte Wert gültig für allgemeines N . Das Verhältnis von Abstand zu Rauigkeit dagegen ist unabhängig von N und wird zusammenfassend durch $\langle \delta z \rangle / \xi_{\perp} = \sqrt{5} \pm 0.2$ beschrieben.

Ein Vergleich mit bereits existierenden numerischen Abschätzungen von c_{Fl} und experimentellen Ergebnissen erfolgt in Abschnitt 4.6.

4.3 Membranen an einem flachen Substrat

Hier studieren wir das Verhalten von identischen Membranen, die mit einem Druck P an ein flaches Substrat gepreßt werden. In dem Energieausdruck (4.20) entspricht dieser Fall der Parameterwahl $P_n = P$, $K_0 = \infty$ und $K_n = K$ sonst. Der Fall von einer Membran an einer harten Wand ist trivial: Mit der in Abschnitt 2.2.2 explizit vorgeführten Transformation auf Relativkoordinaten sieht man, daß eine Membran an einer harten Wand dem Fall von zwei Membranen mit doppelter Biegesteifigkeit entspricht. Die in Abb. 4.1 gezeigten Resultate für zwei identische Membranen gelten, mit entsprechender Reskalierung, also auch für eine Membran an einer harten Wand.

Für den Fall von zwei identischen Membranen an einer harten Wand zeigen wir Monte Carlo Ergebnisse in Abb. 4.10 und Abb. 4.11. Wieder folgen die Daten dem Potenzgesetz (4.26) mit einem Exponenten $\psi = 1/3$. Die Amplituden aller Längenskalen unterscheiden sich nun aber für die beiden Abstände. In Abb. 4.11 zeigen wir das Verhältnis der beiden Membranenabstände, $\langle \delta z_2 \rangle / \langle \delta z_1 \rangle$, (offene Kreise), welches für genügend kleinen Druck durch $\simeq 2^{1/3}$ gegeben ist, wie durch die gestrichelte Linie angedeutet wird. Dieser Wert folgt aus (4.26), wenn man Separabilität der beiden Membranenabstände annimmt: die Biegesteifigkeit der Abstandskoordinate zwischen den beiden oberen Membranen ist gegeben durch $K/2$, die der

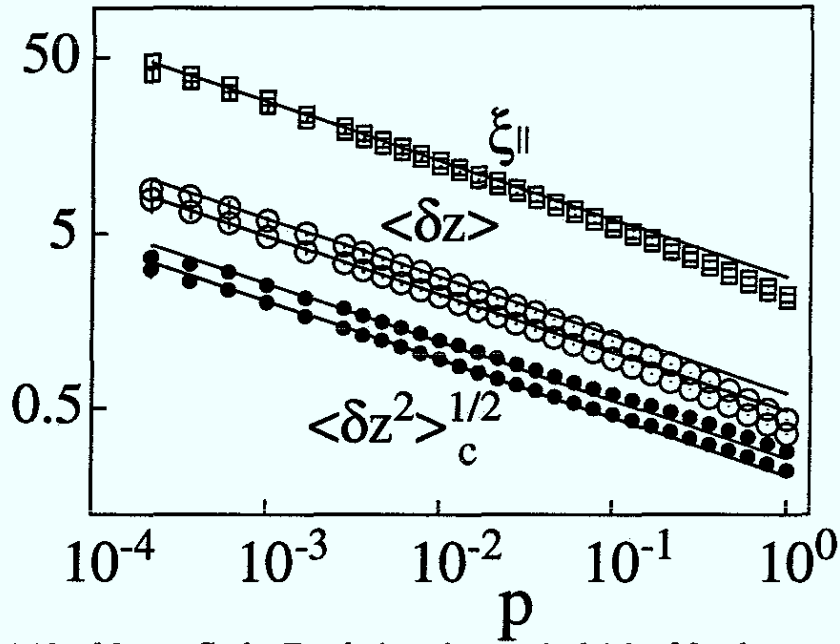


Abbildung 4.10: Monte Carlo Ergebnisse für zwei gleiche Membranen an einem flachen Substrat. Gezeigt werden $\langle \delta z \rangle$, $\langle \delta z^2 \rangle_c^{1/2}$ und $\xi_{||}$ für die beiden Abstände zwischen den Membranen. Wieder gehen alle Daten wie $\sim p^{-1/3}$, wobei der Vorfaktor für den Abstand zwischen den beiden oberen Membranen, $\langle \delta z_2 \rangle$, gegeben ist durch $0.6080 = (2c_{Fl})^{1/3}$ und der für $\langle \delta z_1 \rangle$ durch $0.4826 = (c_{Fl})^{1/3}$.

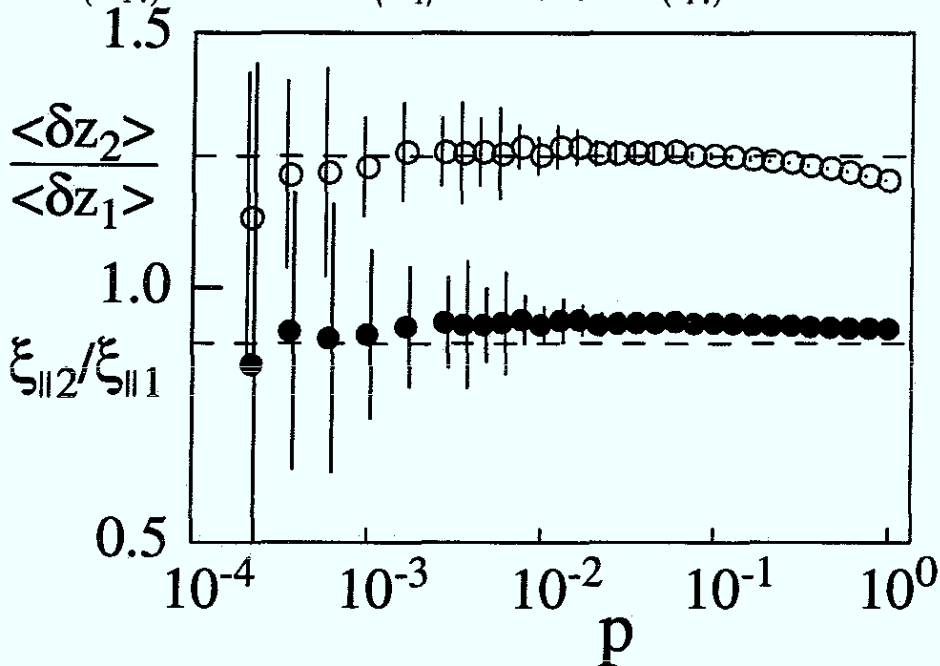


Abbildung 4.11: Monte Carlo Ergebnisse für das Verhältnis der Abstände, $\langle \delta z_2 \rangle / \langle \delta z_1 \rangle$, ($\circ$), und das Verhältnis der parallelen Korrelationslängen, ξ_2 / ξ_1 , ($\bullet$); die gestrichelten Linien entsprechen $2^{1/3}$ und $2^{-1/6}$.

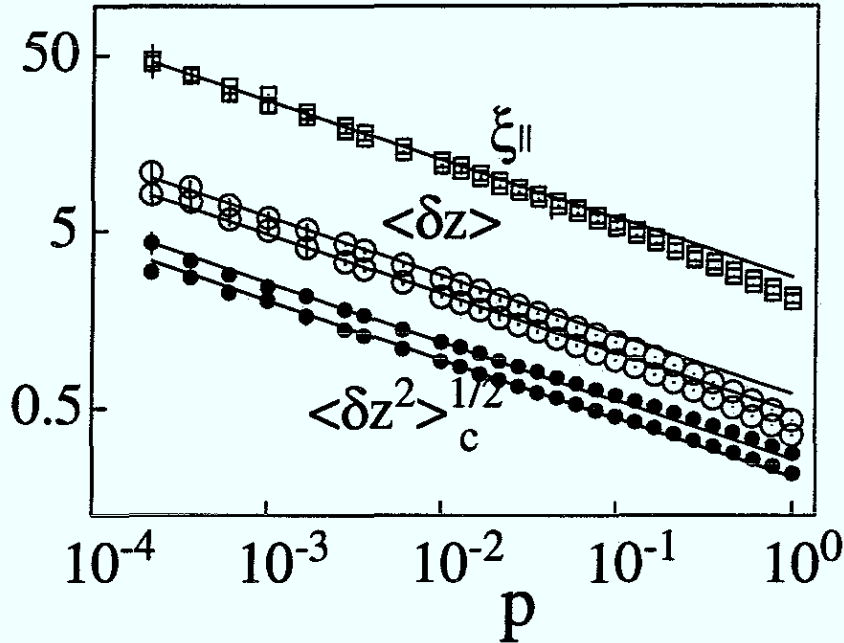


Abbildung 4.12: Monte Carlo Ergebnisse für drei gleiche Membranen an einem flachen Substrat. Gezeigt werden $\langle \delta z \rangle$, $\langle \delta z^2 \rangle_c^{1/2}$ und $\xi_{||}$ für den Abstand der unteren Membran vom Substrat und dem Mittelwert der beiden anderen Membranenabstände. Wieder gehen alle Daten wie $\sim p^{-1/3}$, wobei der Vorfaktor für den gemittelten Abstand zwischen den drei oberen Membranen, $\langle \delta z_2 + \delta z_3 \rangle / 2$, gegeben ist durch $0.6075 = (2c_{Fl})^{1/3}$, und der für $\langle \delta z_1 \rangle$ durch $0.4822 = (c_{Fl})^{1/3}$.

Abstandskoordinate zwischen der Wand und der unteren Membran durch K ; einsetzen dieser Konstanten in (4.26) ergibt gerade ein Verhältnis von $2^{1/3}$. Wie im letzten Abschnitt gezeigt, beeinflussen sich die fluktuierenden Abstandskoordinaten benachbarter Membranen nur wenig; deshalb stimmt der Wert $2^{1/3}$ auch gut mit dem tatsächlichen Verhältnis überein.

Das Verhältnis der beiden parallelen Korrelationslängen, $\xi_{||2}/\xi_{||1}$, (Abb. 4.11, gefüllte Kreise), geht für kleinen Druck gegen $\simeq 2^{-1/6}$, wie durch die zweite gestrichelte Linie angedeutet wird. Dies folgt wieder durch Annahme der Separabilität aus der Beziehung $\xi_{||} \simeq (TK/P^2)^{1/6}$, die man aus (4.26) mit $\langle \delta l \rangle \simeq (T/K)^{1/2} \xi_{||}^c$ erhält. Tatsächlich wird die parallele Korrelationslänge also größer mit wachsender Biegesteifigkeit; dies steht in klarem Kontrast zu dem Fall der Adhäsion mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen. Die näherungsweise erfüllte Separabilität des Systems steht im Einklang mit den Ergebnissen des letzten Abschnittes für symmetrische Systeme. Die Amplitude der Fluktuationswechselwirkung der oberen Membranen ist gegeben durch $c_{Fl} = 0.1125 \pm 0.005$, also innerhalb des numerischen Fehlers gleich dem Wert für die freien Membranen. Das Verhältnis von Rauigkeit und mittlerem Abstand ist für beide Separationsvariablen durch den für symmetrische Systeme

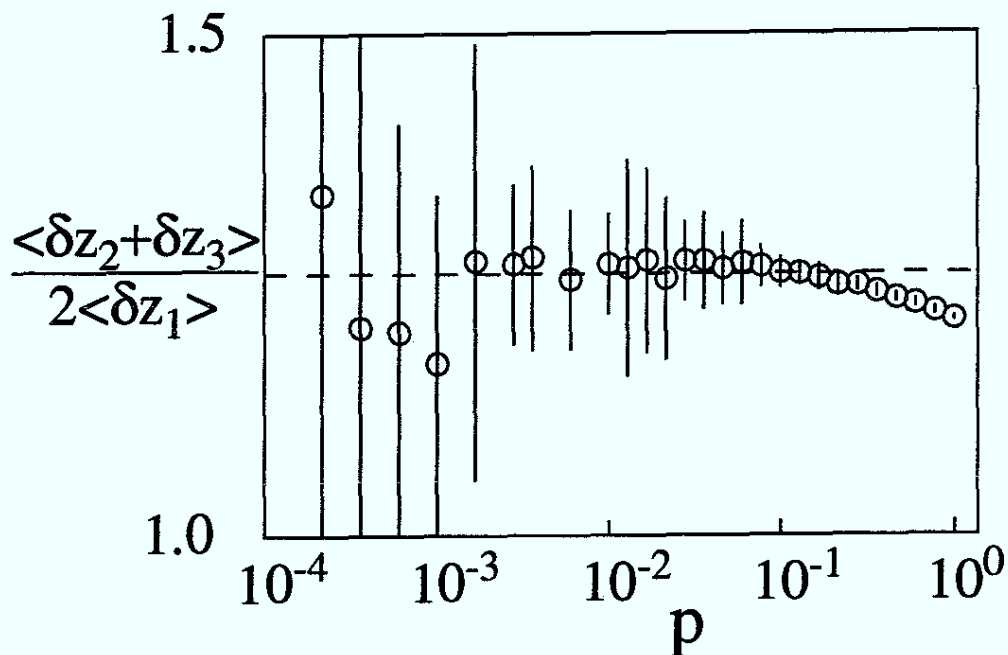


Abbildung 4.13: Monte Carlo Ergebnisse für Verhältnis zwischen den Abständen der oberen Membranen, $\langle \delta z_2 + \delta z_3 \rangle / 2$, und dem Abstand der unteren Membran vom Substrat, $\langle \delta z_1 \rangle$. Für kleinen Druck p ist die Differenz gegeben durch $2^{1/3}$.

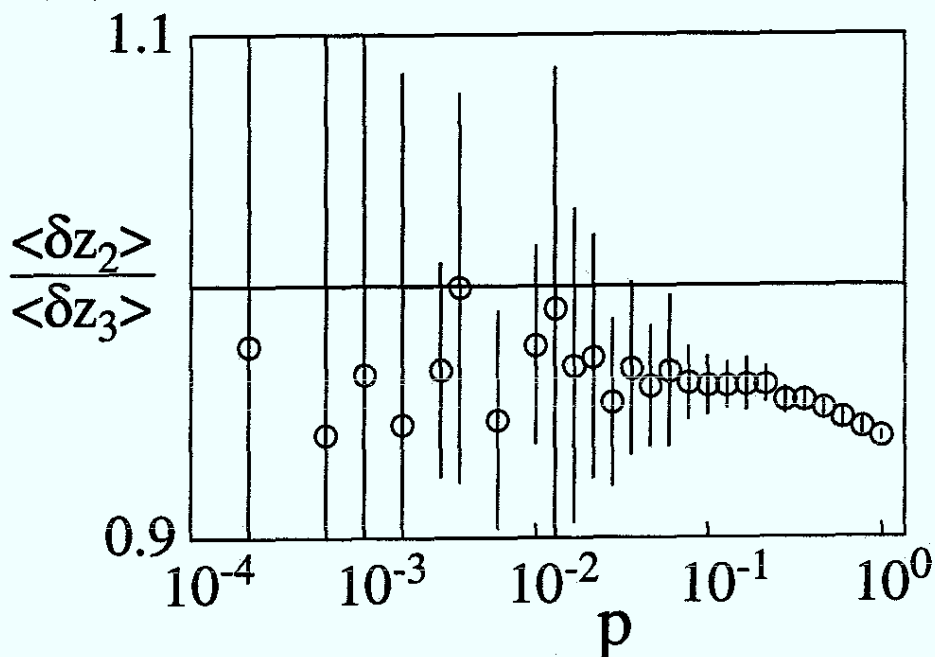


Abbildung 4.14: Monte Carlo Ergebnisse für das Verhältnis zwischen den Abständen der drei oberen Membranen an einem flachen Substrat, $\langle \delta z_2 \rangle / \langle \delta z_3 \rangle$.

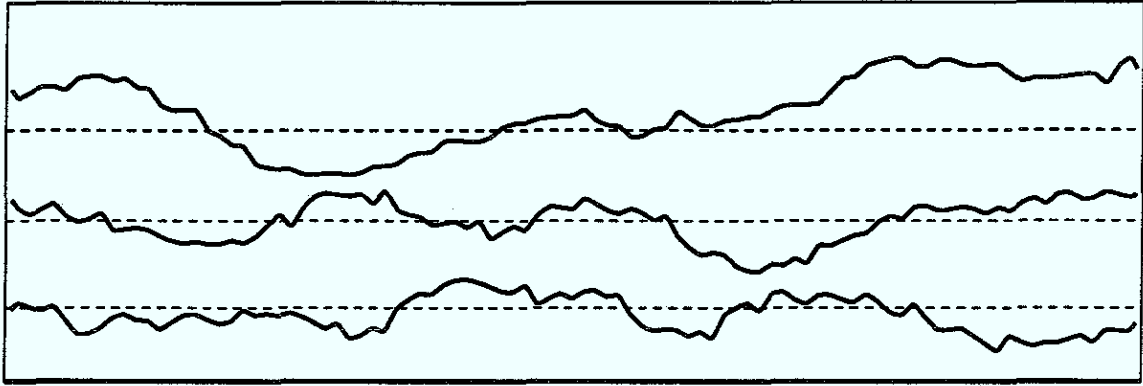


Abbildung 4.15: Schnitt durch typische Konfigurationen der drei Membranen an einem flachen Substrat bei der Monte Carlo Simulation für $p = 0.001$. Der Schnitt enthält 112 diskrete Konfigurationsdaten. Die Abstände zwischen den Membranen sind gegeben durch $\langle \delta l_3 \rangle = 7.25 \pm 0.56$, $\langle \delta l_2 \rangle = 6.83 \pm 0.71$, $\langle \delta l_1 \rangle = 5.86 \pm 0.48$, wie durch die gestrichelten Linien angedeutet wird.

gültigen Wert, $\langle \delta z \rangle / \xi_{\perp} = \sqrt{5} \pm 0.2$, gegeben.

In Abb. 4.12 zeigen wir analoge Daten für ein System von drei identischen Membranen an einem flachen Substrat; hier haben wir über die beiden Abstände der oberen drei Membranen gemittelt, da sie sich auf den Skalen der Abbildung nicht voneinander unterscheiden lassen. Das Ergebnis ist analog zu dem von zwei Membranen am flachen Substrat: die untere Membran hat einen um $2^{1/3}$ kleineren Abstand von der Wand als die oberen Membranen voneinander (Abb. 4.13). Die Amplitude der Fluktuationswechselwirkung der oberen Membranen ist gegeben durch $c_{Fl} = 0.1121 \pm 0.005$. Die Abstände der beiden oberen Membranenpaare, $\langle \delta z_2 \rangle$ und $\langle \delta z_3 \rangle$, sind wieder sehr ähnlich, und der Verlauf des Verhältnisses dieser Abstände (siehe Abb. 4.14) ist analog zu den für die symmetrischen Systeme berechneten Kurven, siehe Abb. 4.7. Für kleine Drücke ist das Verhältnis größer als 0.97. Das Verhältnis von Abstand zu Rauigkeit ist für alle Separationsvariablen in guter Näherung durch $\sqrt{5}$ gegeben.

Die Konfiguration der drei Membranen an einem flachen Substrat bei $p = 0.001$ (Abb. 4.15) läßt den Einfluß des Substrats kaum erkennen, im Gegensatz zu dem Fall von kurzreichweitigen Wechselwirkungen, Abb. 3.30. Dort führte das Substrat zu einer Abfolge von separaten Adhäsionsübergängen; hier entbinden alle Membranen bei $p_c = 0$, und nur die Amplituden der verschiedenen Längenskalen sind geringfügig geändert.

Zusammenfassend ist der Einfluß des flachen Substrats anders als bei den durch kurzreichweitige Potentiale gebundenen Flächen geringfügig: abgesehen von einem um den Faktor $2^{1/3}$ verringerten Abstand der untersten Fläche vom Substrat, entsprechen alle Eigenschaften dem symmetrischen Fall.

4.4 Peristaltische Fluktuationen von gequollenen Membranen

Hier betrachten wir ein System aus drei Membranen, wobei die zwischen den beiden Membranenpaaren wirkenden reskalierten Drücke p_1 und p_2 nun unterschiedlich sein können. Und zwar halten wir p_1 konstant auf einem Wert von $p_1 = 0.1$ und variieren p_2 im Bereich $0.001 > p_2 > 10$. Dies erlaubt uns, die Kopplung zwischen den beiden Abstandsvariablen zu untersuchen, also der Frage nachzugehen, inwieweit sich ein unter Druck stehender Membranenstapel wie ein separables System von Membranenpaaren verhält.

Abgesehen von dieser theoretischen Fragestellung entspricht dieser Fall der experimentell relevanten Situation, wo der mittlere Abstand zwischen benachbarten Membranenpaaren variabel ist, wie zum Beispiel in ternären Systemen.[92, 90] Dort sind die amphiphilen Monoschichten durch abwechselnde Lagen von Wasser und Öl getrennt, und durch variable Verdünnung mit Wasser und/oder Öl können die Abstände zwischen den Monoschichten beliebig variiert werden. Der von uns simulierte Fall entspricht der Situation, wo man den Anteil des einen Lösungsmittels konstant läßt und nur mit dem anderen Lösungsmittel verdünnt. Ist der Anteil des einen Lösungsmittels sehr gering, spricht man von peristaltischen Fluktuationen der entsprechenden Abstandsvariablen. Tatsächlich haben Monoschichten im allgemeinen eine spontane Krümmung, die aber in diesen Simulationen nicht berücksichtigt wird.

In Abb. 4.16 zeigen wir die Ergebnisse für die beiden geeignet reskalierten mittleren Membranenabstände. Und zwar teilen wir den Abstand $\langle \delta z_1 \rangle$ zwischen den Membranen mit dem konstanten Druck, $p_1 = 0.1$, durch den Abstand von einem einzelnen Membranenpaar bei demselben Druck $p = 0.1$ (gefüllte Kreise). Wie man erwartet, geht dieses Verhältnis gegen eins für kleinen Druck p_2 , da dann die durch den Druck p_2 sehr locker gebundene Membran das durch p_1 stark gebundene Membranenpaar nur wenig beeinflusst.

Den Abstand $\langle \delta z_2 \rangle$ zwischen den Membranen mit dem variierenden Druck, p_2 , teilen wir durch den Abstand von einem einzelnen Membranenpaar bei demselben Druck p_2 (offene Kreise). Beide Graphen treffen sich natürlich für $p_2 \simeq 0.1$ bei einem Verhältnis von ~ 0.98 , vgl. Abb. 4.4. Für kleinen Druck p_2 sollte das Verhältnis $\langle \delta z_2 / \delta z(N=2, p_2) \rangle$ gegen $(3/4)^{1/3}$ konvergieren (die gestrichelte Linie), was man wie folgt verstehen kann: Für kleinen Druck p_2 wirken die beiden durch den Druck $p_1 = 0.1$ fest aneinandergebundenen Membranen wie eine einzige Membran mit doppelter Biegesteifigkeit $2K$; die Biegesteifigkeit der Abstandskoordinate δz_2 ist dann um den Faktor $4/3$ erhöht gegenüber dem Fall von zwei freien Membranen, wodurch sich mit (4.26) ein Verhältnis von $(3/4)^{1/3}$ für die mittleren Abstände ergibt. Die gleiche Überlegung gilt für die durch die gefüllten Kreise dargestellten Daten im Falle von großem Druck p_2 . Tatsächlich sind die Daten mit diesem Grenzwert

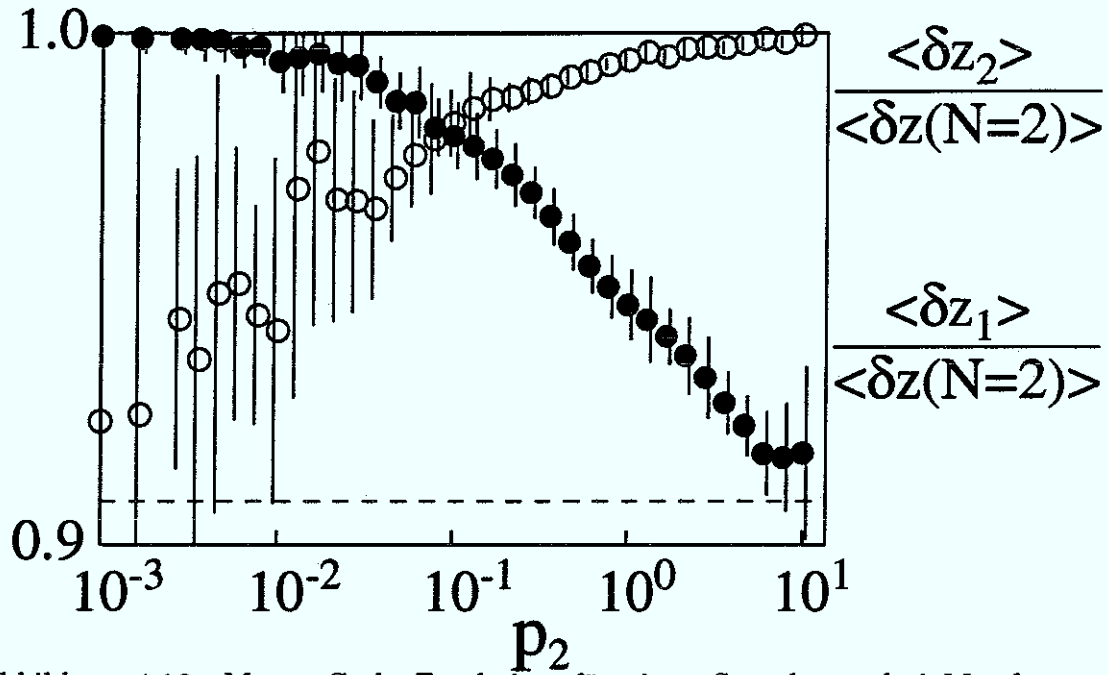


Abbildung 4.16: Monte Carlo Ergebnisse für einen Stapel aus drei Membranen, wobei der Druck zwischen dem einen Membranenpaar konstant ist, $p_1 = 0.1$. Gezeigt werden die reskalierten Abstände $\langle \delta z_1 / \delta z(N = 2, p = 0.1) \rangle$, ($\bullet$), und $\langle \delta z_2 / \delta z(N = 2, p_2) \rangle$, ($\circ$).

verträglich, siehe Abb. 4.16.

Als Ergebnis halten wir also fest: die beiden Abstandskoordinaten sind gekoppelt; drei Membranen verhalten sich nicht wie zwei getrennte Membranenpaare. Dies wird durch die Grenzfälle $p_1 \gg p_2$ und $p_1 \ll p_2$ klar demonstriert. Der Crossover zwischen diesen beiden Grenzfällen ist allerdings sehr langsam und spielt sich auf etwa sechs Größenordnungen des Druckes ab. Hierbei ist noch zu beachten, daß die Form der in Abb. 4.16 gezeigten Kurven im allgemeinen auch vom Wert des fest gehaltenen Druckes p_1 abhängen wird, also nicht notwendigerweise universell ist. Insbesondere der Wert der in Abb. 4.16 gezeigten reskalierten Abstände für $p_1 = p_2$ wird von dem gewählten Druck abhängen, was uns auf die in Abschnitt 4.2 behandelte Frage zurückführt, ob die Fluktuationskonstante c_{FI} asymptotisch von der Anzahl der Membranen abhängt. Auch die in Abb. 4.16 gezeigten Daten können keine klare Antwort auf diese Frage geben, da asymptotisches Verhalten nur für $p_1 \rightarrow 0$ erwartet wird.

Für ternäre Systeme folgt aus diesen Berechnungen, daß die sogenannten peristaltischen Fluktuationen erst vernachlässigbar sind, wenn der Abstand zwischen den als Doppelschichten betrachteten Einheiten um mindestens eine Größenordnung größer als der Abstand zwischen den Monoschichten in einer Doppelschicht ist (da $\delta l \sim p^{-1/3}$, entsprechen drei Größenordnungen des Druckes einer Größenordnung

des Abstandes). Ansonsten muß man die Einzelfluktuationen der Monoschichten berücksichtigen, die eine um den Faktor zwei kleinere Biegesteifigkeit als die Doppelschichten haben.

4.5 Gaußsche Membranen

Hier behandeln wir eine Membran in einem harmonischen Potential, in welchem Fall die Zustandssumme und damit das gesamte thermodynamische Verhalten exakt berechnet werden kann. Unter anderem erhalten wir dadurch den von Helfrich hergeleiteten approximativen Ausdruck für die Fluktuationswechselwirkung zwischen Membranen.

Am Ausgangspunkt steht der Hamiltonian für eine Membran in harmonischer Näherung,

$$\mathcal{H} = \int d^2x \frac{K}{2} (\nabla l)^2 + \frac{\sigma}{2} (\Delta l)^2 + \frac{m}{2} l^2, \quad (4.30)$$

wobei für Berechnungszwecke ein Oberflächenspannungsterm proportional zu σ mitgenommen wird. Nach Fouriertransformation ergibt sich

$$\mathcal{H} = \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \left[\frac{K}{2} q^4 + \frac{\sigma}{2} q^2 + \frac{m}{2} \right] |l(q)|^2. \quad (4.31)$$

Die Zustandssumme

$$Z = \int \mathcal{D}l(q) \exp \left(-\frac{1}{T} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \left[\frac{K}{2} q^4 + \frac{\sigma}{2} q^2 + \frac{m}{2} \right] |l(q)|^2 \right) \quad (4.32)$$

läßt sich dann mit Gaußschen Integralen exakt berechnen, und man erhält für die freie Energie pro projizierte Membranenfläche A_o

$$\frac{f}{T} = -\frac{\log(Z)}{A_o} = \frac{1}{2} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \log \frac{1}{T} \left[K q^4 + \sigma q^2 + m \right]. \quad (4.33)$$

Durch Berechnung der Korrelationsfunktion $C(\mathbf{x}) \sim \langle l(0)l(\mathbf{x}) \rangle$ (siehe Abschnitt 5.3) sieht man, daß die parallele Korrelationslänge $\xi_{\parallel}$ gegeben ist durch

$$\xi_{\parallel} = (4K/m)^{1/4}. \quad (4.34)$$

Zuerst berechnen wir die relative Exzeßfläche, $(A - A_o)/A_o \simeq \langle (\nabla l)^2 \rangle / 2$,

$$\frac{\langle (\nabla l)^2 \rangle_{\sigma=0}}{2} = -\frac{T}{A_o} \frac{\partial \log(Z)}{\partial \sigma} \Big|_{\sigma=0} = \frac{T}{2} \int_{-1/a}^{1/a} \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \frac{q^2}{K q^4 + m}. \quad (4.35)$$

Hier gibt a den unteren Cutoff an, der in realen Membranen in etwa der Molekülgröße entspricht. Im restlichen Teil dieses Abschnitts ist die Oberflächenspannung $\sigma = 0$ gesetzt; das Integral ergibt

$$\boxed{\frac{\langle (\nabla l)^2 \rangle}{2} = \frac{T}{4\pi K} \log \left(\frac{(K/m)^{1/4}}{a} \right) = \frac{T}{4\pi K} \log \left(\frac{\xi_{\parallel}}{\sqrt{2a}} \right)}. \quad (4.36)$$

Die Exzeßfläche divergiert also logarithmisch mit der parallelen Korrelationslänge, was auf einen gekrumpelten Zustand für eine freie Membran hinweist. In unseren Monte Carlo Simulationen benutzen wir den Ausdruck (4.36), um über den Erwartungswert $\langle (\nabla l)^2 \rangle$ die parallele Korrelationslänge zu bestimmen; tatsächlich erhält man so nur das Verhältnis $\xi_{\parallel}/a$, wobei a der mikroskopische Cutoff ist. In Abschnitt 5.3 schätzen wir $\xi_{\parallel}$ direkt aus dem Verlauf der Korrelationsfunktion ab.

Die Rauigkeit kann bestimmt werden über den Erwartungswert von $\langle l^2 \rangle$, der gegeben ist durch

$$\langle l^2 \rangle = -\frac{1}{A_o} \frac{\partial \log(Z)}{\partial (m/2T)} = T \int_{-1/a}^{1/a} \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \frac{1}{Kq^4 + m}. \quad (4.37)$$

Hier kann der obere Cutoff gleich Unendlich gesetzt werden und das Integral ergibt

$$\boxed{\langle l^2 \rangle = \frac{T}{8\sqrt{Km}} = \frac{T\xi_{\parallel}^2}{16K}}. \quad (4.38)$$

Für die elastische Energie der Membran erhält man

$$\langle \mathcal{H}_{el} \rangle = \frac{K}{2} \langle (\Delta l)^2 \rangle = -\frac{K}{2A_o} \frac{\partial \log(Z)}{\partial (K/2T)} = \frac{T}{2} \int_{-1/a}^{1/a} \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \frac{q^4}{Kq^4 + m}, \quad (4.39)$$

was durch Integration zu folgendem Ergebnis führt:

$$\boxed{\langle \mathcal{H}_{el} \rangle = \frac{T}{16} \left(\frac{2}{a^2\pi} - \sqrt{\frac{m}{K}} \right) = \frac{T}{8} \left(\frac{1}{a^2\pi} - \frac{1}{\xi_{\parallel}^2} \right)}. \quad (4.40)$$

Der Unterschied der freien Energie einer freien Membran ($m = 0$) und einer im harmonischen Potential gebundenen Membran kann einfach bestimmt werden und ergibt sich zu

$$\Delta f = -\frac{T}{A_o} \log \left(\frac{Z_m}{Z_{m=0}} \right) = \frac{T}{2} \int_{-1/a}^{1/a} \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \log \left(\frac{Kq^4 + m}{Kq^4} \right), \quad (4.41)$$

woraus folgt daß

$$\Delta f = \frac{T}{8} \left(\frac{m}{K} \right)^{1/2} = \frac{T}{4\xi_{\parallel}^2} \quad (4.42)$$

ist. Die im letzten Abschnitt besprochene Fluktuationswechselwirkung V_{Fl} kann berechnet werden über $V_{Fl} = \Delta f - m\langle l^2 \rangle / 2$ [96] und ist gegeben durch

$$V_{Fl} = \frac{T}{16} \left(\frac{m}{K} \right)^{1/2} = \frac{T}{8\xi_{\parallel}^2}. \quad (4.43)$$

Mit dem Ausdruck (4.40) berechnen wir die Differenz zwischen der elastischen Energie einer gebundenen Membran und einer ungebundenen Membran zu $\langle \Delta \mathcal{H}_{el} \rangle = -T\sqrt{m/K}/16$, woraus folgt, daß

$$\langle \Delta \mathcal{H}_{el} \rangle = -V_{Fl} \quad (4.44)$$

gilt, genau wie für Fäden (4.11). Über die Beziehung zwischen m und $\langle l^2 \rangle$, (4.38), erhalten wir die ursprünglich von Helfrich [31, 32] hergeleitete Formel

$$V_{Fl} = \frac{T^2}{128K\langle l^2 \rangle} = \frac{T^2}{128KC_{\perp}^{-2}l^2} = c_{Fl} \frac{T^2}{Kl^2}. \quad (4.45)$$

Hier haben wir die von Helfrich eingeführte empirische Formel $\langle l^2 \rangle^{1/2} = \xi_{\perp} = C_{\perp}^{-1}l$ benutzt, die die Rauigkeit der Membran mit dem Abstand l zu einer benachbarten Membran oder harten Wand verknüpft. Helfrich schätzte den Wert von $C_{\perp}$ für einen Membranenstapel auf $C_{\perp} = 3\pi^2$ ab, womit sich für die Fluktuationskonstante der klassische Wert $c_{Fl}^{(Helf)} = 3\pi^2/128 \simeq 0.2313$ ergibt. Benutzt man den für Fadenbündel und Membranenstapel gleichermaßen gültigen Wert $C_{\perp} = \sqrt{5}$, ergibt sich für die Konstante der Wert $c_{Fl}^{(harm)} = 5/128 \simeq 0.0391$. Der tatsächlich mit Hilfe von Monte Carlo Simulationen bestimmte Wert von c_{Fl} für Membranen ist dagegen $c_{Fl} \simeq 0.116$, und ist damit ziemlich genau halb so groß wie die Helfrich-Abschätzung und 3 mal so groß wie der Wert der korrigierten harmonischen Näherung.

4.6 Vergleich mit Experimenten

Röntgenstreuung gibt normalerweise Auskunft über die Struktur eines studierten Systems. In dem Fall von multilamellaren Schichten kann man sogar wichtige Information über die Thermodynamik des Systems erhalten, wie in diesem Abschnitt erläutert wird.

Es ist eine altbekannte Tatsache, daß die untere kritische Dimension von Kristallen zwei ist. Für normale eindimensionale Systeme kann langreichweitige Translationsordnung nicht bestehen, da die Fluktuationen mit der Systemgröße divergieren. Für dreidimensionale Systeme haben Fluktuationen in der geordneten Phase keine Auswirkung. Genau für zwei Dimensionen divergieren die Fluktuationen der Translationsordnung logarithmisch mit der Systemgröße: der Strukturfaktor kann dann

noch Singularitäten aufweisen, wobei die Braggpeaks durch wie Potenzgesetze divergierende Singularitäten ersetzt werden.

Der Strukturfaktor in der Richtung parallel zu den Membranennormalen ist gegeben durch[9]

$$S(q_{\parallel}) \propto |q_{\parallel} - q_m|^{\eta_m - 2}, \quad (4.46)$$

wobei $q_{\parallel}$ der Impulsübertrag parallel zu den Membranennormalen ist und $q_m = 2\pi m/d$ ist, wobei d dem sogenannten Wiederholungsabstand entspricht. Der Exponent ist gegeben durch

$$\eta_m = \frac{T q_m^2}{8\pi \sqrt{B\kappa}}, \quad (4.47)$$

B und κ sind die Volumenmoduli für Kompressibilität und Krümmungswiderstand. Der Wiederholungsabstand ist definiert durch die Summe aus dem Abstand zwischen den Membranen, l , und der Dicke der Membranen, δ ,

$$d = l + \delta. \quad (4.48)$$

Die Kompressibilität hängt mit der Wechselwirkung $F(d)$ zwischen den Membranen zusammen über

$$B = d \frac{\partial^2 F(d)}{\partial d^2}, \quad (4.49)$$

der Volumenkrümmungsmodul κ ist gegeben durch $\kappa = K/d$. Die sterische Wechselwirkung $V_{Fl}(l)$ läßt sich auf folgende Weise als Funktion des Wiederholungsabstandes schreiben:

$$V_{Fl} = c_{Fl} \frac{T^2}{K l^2} = c_{Fl} \frac{T^2}{K d^2} \left(1 - \frac{\delta}{d}\right)^{-2}. \quad (4.50)$$

Der Exponent η_m läßt sich dann berechnen zu

$$\eta_m = \frac{\pi m^2}{2\sqrt{6c_{Fl}}} \left(1 - \frac{\delta}{d}\right)^2 = \eta^\infty m^2 \left(1 - \frac{\delta}{d}\right)^2. \quad (4.51)$$

Mit dem Helfrich-Wert für die Fluktuationsamplitude, $c_{Fl} = 3\pi^2/128$, erhält man $\eta^\infty = 4/3$, was quantitativ gut mit experimentellen Ergebnissen übereinstimmt.[92, 4, 90, 93, 70, 71, 72] Insbesondere ist für große Abstände, $d > \delta/(1 - (2\eta^\infty)^{-1/2})$, nur noch die erste Braggsingularität vorhanden.

Der hier durch Monte Carlo Simulationen bestimmte Wert für c_{Fl} ist kleiner als der Helfrich Wert und stimmt gut mit anderen numerischen Ergebnissen überein, bei denen Stapel von N Membranen zwischen zwei harten Wänden simuliert wurden.[40, 41, 28] Dabei wurde in [28] der Wert von c_{Fl} durch Vergleich mit (4.19) nach $N = \infty$ extrapoliert.

Die Diskrepanz mit den Experimenten wirft die Frage nach der Verlässlichkeit der experimentellen Ergebnisse auf. Dabei erstaunt vor allen Dingen die gute Übereinstimmung mit der harmonischen Näherung von Helfrich. Die Ursache könnte darin

liegen, daß die Herleitung von (4.47) auf genau der gleichen harmonischen Näherung beruht, wie die Herleitung der Helfrich Konstante.[9] Die Übereinstimmung könnte damit der bloße Ausdruck einer Art von Selbstkonsistenz sein. In jedem Falle stellt die Suche nach dem wahren Wert der Fluktuationskonstante c_{Fl} ein bis jetzt ungelöstes, für das grundlegende Verständnis der Membranenphysik wichtiges Problem dar.

Kapitel 5

Zusammenspiel von Wechselwirkung und Druck

In diesem Kapitel behandeln wir das Zusammenspiel von äußerem Druck und kurzreichweitiger Wechselwirkung zwischen den Flächen. Insbesondere soll dabei der Einfluß eines attraktiven oder repulsiven kurzreichweitigen Potentials auf die Amplitude c_{Fl} der Fluktuationswechselwirkung interessieren.

Experimentell treten auch in den nur durch äußeren Druck zusammengehaltenen multilamellaren Systemen schwache Van-der-Waals Kräfte auf. Auf sehr kleinen Abständen gibt es abstoßende Hydrationswechselwirkungen zwischen den Membranen. Eine eventuelle Modifikation der Amplitude des fluktuationsinduzierten Potentials durch kurzreichweitige Wechselwirkungen wäre darum experimentell relevant. Theoretisch gibt es bereits einige Ansätze, diesen Effekt abzuschätzen.[18, 82]

Hier wird das Problem zuerst für zwei Fäden exakt gelöst, wobei die kurzreichweitige Anziehung durch ein Kastenpotential gegeben ist. Monte Carlo Simulationen werden dann im Fall von zwei Membranen eingesetzt. Im letzten Abschnitt werden die verschiedenen Längenskalen, die bei der Adhäsion von Flächen relevant sind, durch Amplitudenverhältnisse in Beziehung gesetzt. Diese Amplitudenverhältnisse, die von den wirkenden Potentialen abhängen, sind für Fäden und Membranen gleich.

5.1 Zwei Fäden

Der Hamiltonian für zwei Fäden mit Steifigkeit K , äußerem Druck P und Potential $V(l)$ hat nach der Abspaltung der Schwerpunktkoordinate (siehe Abschnitt 2.2.2) die Form

$$\mathcal{H} = \int dx \frac{K}{4} \left(\frac{dl}{dx} \right)^2 + Pl + V(l), \quad (5.1)$$

wobei die kurzreichweitige Wechselwirkung wieder durch ein Kastenpotential der Reichweite l^o und Tiefe V^o gegeben ist:

$$V(l) = \begin{cases} \infty & \text{für } l < 0 \\ V^o & \text{für } 0 < l < l^o \\ 0 & \text{für } l^o < l \end{cases} . \quad (5.2)$$

Attraktive Wechselwirkungen entsprechen $V^o < 0$, repulsive Wechselwirkungen entsprechen $V^o > 0$. Das aus (5.1) und (5.2) folgende Schrödingergleichungssystem lautet

$$\left[-\frac{T^2}{K} \frac{\partial^2}{\partial l^2} + Pl - E_n + V^o \right] \Phi(l) = 0 \quad \text{für } l < l^o, \quad (5.3)$$

$$\left[-\frac{T^2}{K} \frac{\partial^2}{\partial l^2} + Pl - E_n \right] \Phi(l) = 0 \quad \text{für } l > l^o. \quad (5.4)$$

Mit den Variablentransformationen

$$y \equiv (PK)^{1/3} T^{-2/3} l, \quad (5.5)$$

$$y_o \equiv (PK)^{1/3} T^{-2/3} l^o, \quad (5.6)$$

$$\varepsilon_n \equiv (PT)^{-2/3} K^{1/3} E_n, \quad (5.7)$$

$$u \equiv -(PT)^{-2/3} K^{1/3} V^o, \quad (5.8)$$

lassen sich die Schrödingergleichungen auf folgende Form bringen:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial y^2} + y - \varepsilon_n - u \right] \Psi(y) = 0 \quad \text{für } y < y_o, \quad (5.9)$$

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial y^2} + y - \varepsilon_n \right] \Psi(y) = 0 \quad \text{für } y > y_o. \quad (5.10)$$

Die allgemeine Lösung ist durch eine Kombination von Airyfunktionen gegeben,

$$\Psi(y) = A \mathcal{A}_i(y - \varepsilon_n - u) + B \mathcal{B}_i(y - \varepsilon_n - u) \quad \text{für } y < y_o, \quad (5.11)$$

$$\Psi(y) = C \mathcal{A}_i(y - \varepsilon_n) \quad \text{für } y > y_o. \quad (5.12)$$

Die harte Wand für $y = 0$ erzwingt $\Psi(0) = 0$, woraus mit (5.11) die Beziehung

$$B = -A \frac{\mathcal{A}_i(-\varepsilon_n - u)}{\mathcal{B}_i(-\varepsilon_n - u)} \quad (5.13)$$

folgt. Aus der Stetigkeit der Wellenfunktion und ihrer Ableitung am Punkt $y = y_o$ folgt die Bestimmungsgleichung

$$\mathcal{G} \equiv \frac{\mathcal{A}_i'(y_o - \varepsilon_n - u) - \mathcal{B}_i'(y_o - \varepsilon_n - u) \frac{\mathcal{A}_i(-\varepsilon_n - u)}{\mathcal{B}_i(-\varepsilon_n - u)}}{\mathcal{A}_i(y_o - \varepsilon_n - u) - \mathcal{B}_i(y_o - \varepsilon_n - u) \frac{\mathcal{A}_i(-\varepsilon_n - u)}{\mathcal{B}_i(-\varepsilon_n - u)}} = \frac{\mathcal{A}_i'(y_o - \varepsilon_n)}{\mathcal{A}_i(y_o - \varepsilon_n)} \quad (5.14)$$

5.1.1 Repulsive Wechselwirkung

Wir sind an dem Verhalten für $V^o = \text{const}$ und $P \rightarrow 0$ interessiert; für repulsive Wechselwirkungen ist u eine große negative Zahl, ε_n geht für $P \rightarrow 0$ gegen eine Konstante und y_o geht für $P \rightarrow 0$ gegen Null. Die Argumente der Airyfunktionen auf der linken Seite der Bestimmungsgleichung gehen also für $P \rightarrow 0$ gegen unendlich. Für $x \rightarrow \infty$ sind die Airyfunktionen $\mathcal{A}_i(x)$ und $\mathcal{B}_i(x)$ gegeben durch

$$\mathcal{A}_i(x) \sim \frac{1}{3} \pi^{-1/2} x^{-1/4} e^{-2x^{3/2}/3}, \quad (5.15)$$

$$\mathcal{B}_i(x) \sim \pi^{-1/2} x^{-1/4} e^{2x^{3/2}/3}. \quad (5.16)$$

Durch Taylorentwicklung der einzelnen Terme von $\mathcal{G}$ um $(-u - \varepsilon_n)$ bis zur zweiten Ordnung in y_o erhalten wir

$$\mathcal{G} \simeq \frac{1}{y_o} - \frac{y_o}{2}(u + \varepsilon_n) \simeq \frac{1}{y_o} - \frac{u y_o}{2} = \frac{1}{y_o} \left(1 - \frac{v}{2}\right), \quad (5.17)$$

wobei wir die vom Druck unabhängige reskalierte Potentialstärke v benutzen, die definiert ist durch

$$v \equiv u y_o^2 = -K V^o (l^o/T)^2. \quad (5.18)$$

$\mathcal{G}$ divergiert also für verschwindenden Druck, da in diesem Limes $y_o \rightarrow 0$ gilt. Daraus folgt aus der Bestimmungsgleichung (5.14), daß $\mathcal{A}_i(y_o - \varepsilon_n) = 0$ ist; dies entspricht dem Ergebnis aus Abschnitt 4.1, wo kein zusätzliches Potential zum äußeren Druck wirkt. Asymptotisch ist die repulsive Wechselwirkung also irrelevant, und die in Abschnitt 4.1 erhaltenen Resultate gelten auch hier. Für $\varepsilon_0 \rightarrow 2.3381$ und $y_o \rightarrow 0$ ist der Kehrwert der rechten Seite von (5.14) gegeben durch

$$\frac{\mathcal{A}_i(y_o - \varepsilon_0)}{\mathcal{A}_i'(y_o - \varepsilon_0)} \simeq 2.3381 + y_o - \varepsilon_0. \quad (5.19)$$

Für kleine Werte von v erhalten wir für den Einfluß der Repulsion auf die Grundzustandsenergie in führender Ordnung

$$\varepsilon_0 \simeq 2.3381 - y_o v/2. \quad (5.20)$$

Da v negativ ist wird die Grundzustandsenergie also erhöht, wie man erwartet.

5.1.2 Attraktive Wechselwirkung

Hier ist u eine große positive Zahl, die Argumente der Airyfunktionen auf der linken Seite von (5.14) gehen also für $P \rightarrow 0$ gegen minus unendlich. Für $x \rightarrow -\infty$ sind die Airyfunktionen $\mathcal{A}_i(x)$ und $\mathcal{B}_i(x)$ gegeben durch

$$\mathcal{A}_i(x) \sim \pi^{-1/2} (-x)^{-1/4} \sin\left(\frac{2}{3}(-x)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right), \quad (5.21)$$

$$\mathcal{B}_i(x) \sim \pi^{-1/2}(-x)^{-1/4} \cos\left(\frac{2}{3}(-x)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right). \quad (5.22)$$

Mit den Ableitungen dieser Näherungen,

$$\mathcal{A}_i^{(i)}(x) = \begin{cases} (-1)^{\frac{i+1}{2}}(-x)^{\frac{i}{2}}\mathcal{B}_i(x) & i \text{ ungerade} \\ (-1)^{\frac{i}{2}}(-x)^{\frac{i}{2}}\mathcal{A}_i(x) & i \text{ gerade} \end{cases} \quad (5.23)$$

$$\mathcal{B}_i^{(i)}(x) = \begin{cases} (-1)^{\frac{i-1}{2}}(-x)^{\frac{i}{2}}\mathcal{A}_i(x) & i \text{ ungerade} \\ (-1)^{\frac{i}{2}}(-x)^{\frac{i}{2}}\mathcal{B}_i(x) & i \text{ gerade} \end{cases} \quad (5.24)$$

kann man die Fourierreihenentwicklung von $\mathcal{G}$ um $(-\varepsilon_n - u)$ exakt aufsummieren und bekommt

$$\mathcal{G} = \frac{\sum_{i=0}^{\infty} \left[-y_o^2(\varepsilon_n + u) \right]^i / (2i)!}{y_o \sum_{i=0}^{\infty} \left[-y_o^2(\varepsilon_n + u) \right]^i / (2i+1)!}. \quad (5.25)$$

Mit den Identitäten

$$\cos \sqrt{x} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-x)^i}{(2i)!}, \quad (5.26)$$

$$\frac{\sin \sqrt{x}}{\sqrt{x}} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-x)^i}{(2i+1)!}, \quad (5.27)$$

erhält man die Bestimmungsgleichung

$$\mathcal{G} \simeq \frac{\sqrt{\varepsilon_n + u}}{\tan(y_o \sqrt{\varepsilon_n + u})} = \frac{\mathcal{A}_i'(y_o - \varepsilon_n)}{\mathcal{A}_i(y_o - \varepsilon_n)}. \quad (5.28)$$

Das Verhalten als Funktion der Potentialstärke läßt sich wieder mit dem Parameter $v \equiv uy_o^2$ klassifizieren. In dem Limes $y_o \rightarrow 0$, also für verschwindenden Druck P , ist $\mathcal{G}$ gegeben durch

$$\mathcal{G} = \begin{cases} +\infty & \text{für } v < \pi^2/4 \\ 0 & \text{für } v = \pi^2/4 \\ -\infty & \text{für } v > \pi^2/4 \end{cases}. \quad (5.29)$$

Die Potentialstärke $v = \pi^2/4$ stellt also wie zu erwarten einen Grenzfall dar, da dort im Limes verschwindenden Druckes die kritische Entbindung stattfindet, siehe Abschnitt A.2.

Für $v < \pi^2/4$ folgt damit aus der Bestimmungsgleichung (5.28) daß $\mathcal{A}_i(y_o - \varepsilon_n) = 0$ ist. Damit ist die Grundzustandsenergie ε_0 für $y_o \rightarrow 0$ durch die erste Nullstelle von der Airyfunktion gegeben, also wieder gilt $\varepsilon_0 = 2.3381$ (man beachte daß $\mathcal{A}_i'(-\varepsilon_o)$ positiv ist). Entwicklung der Bestimmungsgleichung in erster Ordnung nach y_o ergibt

$$\varepsilon_0 \simeq 2.3381 - y_o \left(\frac{\tan \sqrt{v}}{\sqrt{v}} - 1 \right), \quad (5.30)$$

wobei der lineare Term für $v \rightarrow \pi^2/4$ unendlich groß wird. Die Abhängigkeit der Grundzustandsenergie ε_o von y_o stellt aber eine subdominate Störung dar und ändert das in Abschnitt 4.1 berechnete Verhalten nicht. Das kritische Verhalten wird also durch eine genügend schwache kurzreichweitige Anziehung nicht verändert.

Für $v = \pi^2/4$ folgt aus der Bestimmungsgleichung (5.28) daß $\mathcal{A}'(y_o - \tilde{\varepsilon}_n) = 0$ ist. Die Grundzustandsenergie $\tilde{\varepsilon}_0$ ist für $y_o \rightarrow 0$ durch die erste Nullstelle der ersten Ableitung der Airyfunktion gegeben ist, hier erhält man also $\tilde{\varepsilon}_0 = 1.01879$ und $\tilde{\varepsilon}_1 = 3.24819$. In Analogie zur Rechnung in Abschnitt 4.1 ist die freie Energie des Zwei-Faden Problems gegeben durch

$$f \equiv E_0 = \tilde{\varepsilon}_0 (PT)^{2/3} K^{-1/3}. \quad (5.31)$$

Die anderen Formeln können direkt übernommen werden. Insbesondere ist die Separation gegeben durch

$$\langle l \rangle = T \frac{\partial f / T}{\partial P} = \frac{2}{3} f / P = \tilde{\varepsilon}_0 \frac{2}{3} \left(\frac{T^2}{KP} \right)^{1/3}. \quad (5.32)$$

Das Fluktuationspotential ist wieder gegeben durch den Ausdruck (4.12), wobei die Fluktuationskonstante nun den Wert

$$\boxed{c_{Fl} = (2\tilde{\varepsilon}_0/3)^3/2 = 0.1567} \quad (5.33)$$

hat, also gegenüber dem Wert für verschwindendes Potential um den Faktor 12 verkleinert ist, vergleiche (4.13). Für das Verhältnis der Separationen für subkritische und kritische Potentialstärke erhalten wir

$$\frac{\langle l(v=0) \rangle}{\langle l(v=\pi^2/4) \rangle} = \frac{\varepsilon_o}{\tilde{\varepsilon}_0} = 2.2950. \quad (5.34)$$

Dieser Wert gilt in guter Näherung auch für Membranen (siehe nächsten Abschnitt). Für $y_o \rightarrow 0$ kann der Erwartungswert $\langle y^2 \rangle$ analog zu Abschnitt 4.1 berechnet werden, und man erhält

$$\langle y^2 \rangle = \frac{\int_0^\infty y^2 \mathcal{A}^2(y - \tilde{\varepsilon}_0) dy}{\int_0^\infty \mathcal{A}^2(y - \tilde{\varepsilon}_0) dy} = 0.749878. \quad (5.35)$$

Für die Rauigkeit folgt der Ausdruck

$$\xi_\perp \equiv \sqrt{\langle l^2 \rangle - \langle l \rangle^2} = 0.537189 \left(\frac{T^2}{KP} \right)^{1/3}. \quad (5.36)$$

Das Verhältnis vom Abstand zur Rauigkeit für die kritische Potentialstärke $v = \pi^2/4$ ist damit gegeben durch

$$\boxed{\frac{\langle l \rangle}{\xi_\perp} = 1.2643.} \quad (5.37)$$

Dieser Wert ist verkleinert gegenüber dem Wert für verschwindendes Potential, der Faden ist nun rauher. Für die parallele Korrelationslänge $\xi_{||}$ erhält man

$$\xi_{||} = \left(\frac{TK}{P^2} \right)^{1/3} \frac{1}{\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{\varepsilon}_0}, \quad (5.38)$$

wobei $\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{\varepsilon}_0 = 2.2294$ ist. Das Verhältnis des Abstandes zur parallelen Korrelationslänge ist dann gegeben durch

$$\frac{\langle l \rangle}{\xi_{||}^{1/2}} = \frac{2\tilde{\varepsilon}_0\sqrt{\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{\varepsilon}_0}}{3} \left(\frac{T}{K} \right)^{1/2} = 1.0141 \left(\frac{T}{K} \right)^{1/2}. \quad (5.39)$$

Für $v > \pi^2/4$ folgt mit (5.29) aus der Bestimmungsgleichung $\varepsilon_0 = -\infty$ für verschwindenden Druck ($y_0 \rightarrow 0$). Der Ausdruck $\varepsilon_0 y_0^2 = K f(l^0/T)^2$, der proportional zur freien Energie ist, geht aber gegen eine negative, endliche Konstante für $y_0 \rightarrow 0$. Dies entspricht der unvollständigen Benetzung, bei der der Faden auch für $P = 0$ im kurzreichweitigen Potential gebunden bleibt. Das Verhalten für verschwindenden Druck ist dann nur durch das kurzreichweitige Potential bestimmt und wird durch die Ergebnisse im Anhang A.2 beschrieben.

Eine kurzreichweitige Wechselwirkung zwischen den Fäden ist für kleinen Druck irrelevant, wenn sie nicht die für die Bindung nötige Wechselwirkungsstärke hat; insbesondere die Amplitude der Fluktuationswechselwirkung hängt in diesem Fall asymptotisch nicht von dieser Wechselwirkung ab. Hat diese kurzreichweitige Wechselwirkung gerade die kritische Stärke, ist die Amplitude der Fluktuationswechselwirkung um einen Faktor 12 verkleinert. Ist die kurzreichweitige Wechselwirkung stärker, sind die Fäden auch für verschwindenden Druck aneinander gebunden.

5.2 Zwei Membranen

In diesem Abschnitt berechnen wir das Entbindungsverhalten von zwei Membranen unter äußerem Druck bei Anwesenheit eines kurzreichweitigen Potentials mit Hilfe von Monte Carlo Methoden. Das kurzreichweitige Potential wird wie in Abschnitt 3.6.3 durch ein Kastenpotential repräsentiert. Besonders wird uns der Fall interessieren, wo die Tiefe dieses Kastenpotentials dem kritischen Wert entspricht. In Abschnitt 3.6.3 berechneten wir die kritische Potentialstärke eines Kastenpotentials der reduzierten Reichweite $\hat{l}^0 = 0.0185$ zu $U_c = 2.78 \pm 0.01$.

In Abb. 5.1 zeigen wir die mittleren Abstände $\langle \delta z \rangle$ in Abhängigkeit vom äußeren Druck p für vier verschiedene Werte der Potentialstärke; von unten nach oben ist $U = 1.1U_c$, $U = U_c$, $U = U_c/2$ und $U = 0$, wobei wir hier für die kritische Potentialstärke den oben angegebenen Wert, $U_c = 2.78$, einsetzen. Für den Fall

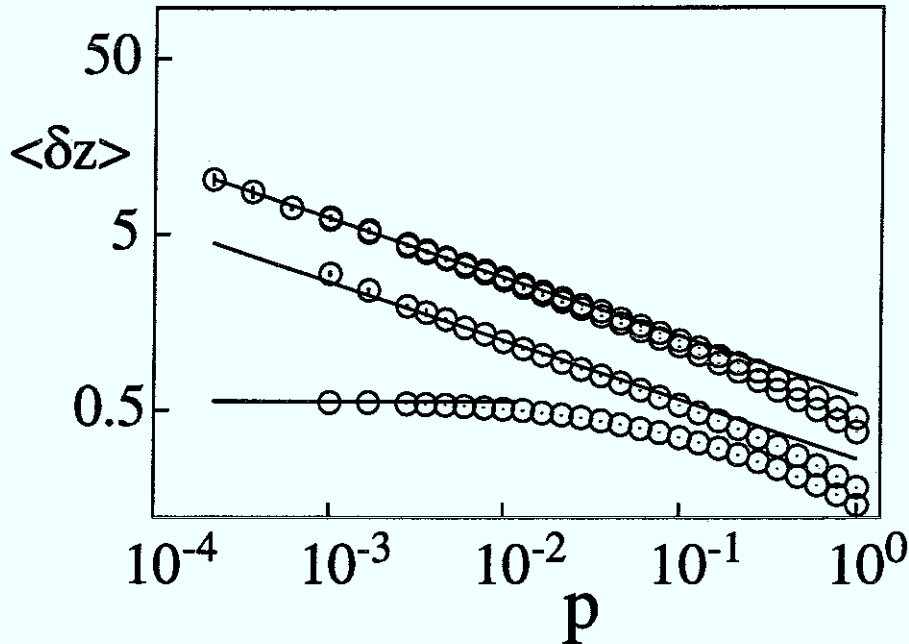


Abbildung 5.1: Monte Carlo Ergebnisse für zwei gleiche Membranen. Gezeigt wird der reskalierte mittlere Abstand $\langle \delta z \rangle$ für vier verschiedene Werte der reskalierten Potentialstärke U ; von unten nach oben: $U = 1.1U_c$, $U \simeq U_c$, $U = U_c/2$ und $U = 0$, wobei U_c der in Abschnitt 3.6.3 ermittelten kritischen Potentialstärke entspricht.

$U = 1.1U_c$ erhalten wir auch für verschwindenden Druck einen gebundenen Zustand, für den wir in Abschnitt 3.6.3 $\langle \delta z \rangle = 0.5618 \pm 0.005$ berechnet. In Abb. 5.1 ist dieser Gleichgewichtsabstand durch eine horizontale Linie angedeutet. Dieser Fall entspricht dem sogenannten unvollständigen Entbinden, ein starker äußerer Druck verringert den Abstand zwischen den Fäden noch zusätzlich. Für den Fall $U = 1.0U_c$ skaliert der Abstand wie $\sim p^{-1/3}$, allerdings ist hier der Abstand zwischen den Membranen gegenüber den Daten für $U = 0$ stark verkleinert. In Abb. 5.1 ist die der Fadenrechnung entnommene Veränderung des Abstandes gegenüber dem Fall $U = 0$ eingezeichnet (die durch die offenen Kreise gehende gerade Linie) und stimmt gut mit den Monte Carlo Daten überein. Der Fall $U = U_c/2$ ist für kleinen Druck fast nicht von dem Fall $U = 0$ zu unterscheiden. In Übereinstimmung mit den Ergebnissen für Fäden ist ein subkritisches Kastenpotential auf großen Längenskalen (für kleinen Druck) vernachlässigbar. Den Fall eines abstoßenden Kastenpotentials haben wir hier nicht berechnet, da selbst für ein unendlich abstoßendes Potential der Einfluß auf $\langle \delta z \rangle$ in der Grafik kaum wahrnehmbar wäre.

In Abb. 5.2 zeigen wir das Verhalten von $\langle \delta z(U = 0) \rangle / \langle \delta z(U = U_c) \rangle$ als Funktion vom Druck. Die Vorhersage der Fadenrechnung ist durch die gestrichelte Linie angedeutet. Für mittleren Druck stimmen die Monte Carlo Daten für die Membranen gut mit den Fadenergebnissen überein, für sehr kleinen Druck gibt es merkbare Ab-

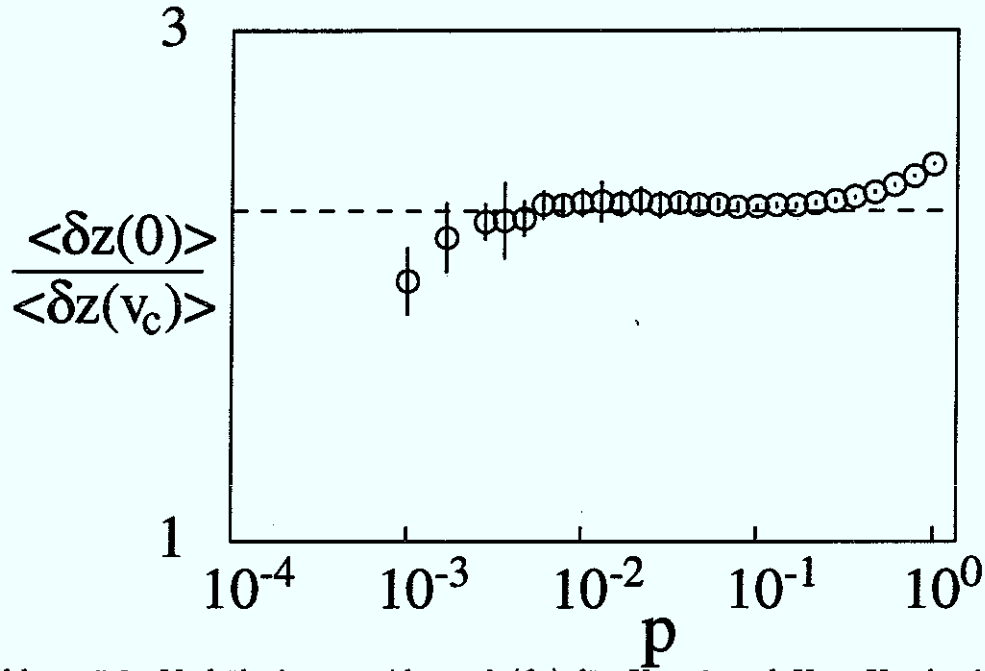


Abbildung 5.2: Verhältnis vom Abstand $\langle \delta z \rangle$ für $U = 0$ und $U = U_c$; der im Fall von Fäden erhaltene Wert (2.295) ist durch die gestrichelte Linie angedeutet.

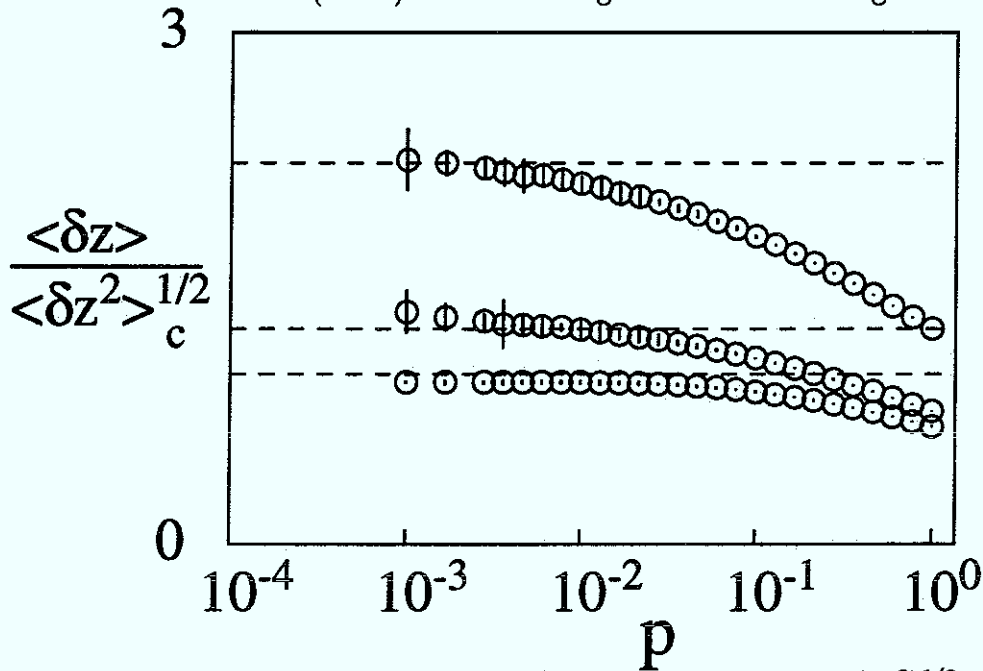


Abbildung 5.3: Verhältnis vom Abstand $\langle \delta z \rangle$ zur Rauigkeit $\xi_\perp = \langle \delta z^2 \rangle_c^{1/2}$ für drei verschiedene Werte der Potentialstärke; von unten nach oben: $U = 1.1U_c$, $U = U_c$ und $U = U_c/2$. Die Ergebnisse für Fäden für die drei Fälle, $\langle \delta z \rangle / \xi_\perp = 1$, $\langle \delta z \rangle / \xi_\perp = 1.2643$, $\langle \delta z \rangle / \xi_\perp = \sqrt{5}$, sind durch die gestrichelten Linien angedeutet.

weichungen. Dies liegt daran, daß die tatsächliche kritische Potentialstärke größer als der in der Simulation benutzte Wert $U_c = 2.78$ ist. Für verschwindenden Druck sollte das Verhältnis der Abstände dann gegen eins gehen, wie im Fall von Fäden aus (5.30) folgt.

In Abb. 5.3 zeigen wir das Verhältnis $\langle \delta z \rangle / \langle \delta z^2 \rangle_c^{1/2}$ für die drei Potentialstärken $U = 1.1U_c$, $U = U_c$ und $U = U_c/2$. Die Daten werden verglichen mit den Vorhersagen der Fadenrechnung, welche durch die gestrichelten Linien angedeutet sind, und stimmen gut mit ihnen überein. Im Fall der kritischen Potentialstärke gibt es für kleinen Druck einen Trend zu größeren Werten des Verhältnisses hin, was wieder daran liegt, daß die tatsächliche kritische Potentialtiefe größer als der in den Simulationen benutzte Wert ist.

Zusammenfassend stimmt das Verhalten von Membranen unter der kombinierten Wirkung von Druck und kurzreichweitigem Potential mit den für Fäden exakt berechneten Ergebnissen überein. Tatsächlich entsprechen sogar die Amplitudenverhältnisse der Abstände und der Rauigkeiten den für die Fäden gefundenen Werten.

5.3 Korrelationsfunktionen

Die Ergebnisse für Fäden aus Abschnitt 5.1.2 beinhalten auch Werte für das Verhältnis von paralleler Korrelationslänge und Abstand zwischen den Fäden. In diesem Abschnitt wollen wir die parallele Korrelationslänge für mit verschiedenen Potentialen wechselwirkende Membranen abschätzen. Dazu betrachten wir zunächst wieder eine Membran im harmonischen Potential, wo die parallele Korrelationslänge einfach bestimmt werden kann.

Die Korrelationsfunktion $C(\mathbf{x}) \equiv \langle [l(\mathbf{x}) - \langle l \rangle][l(\mathbf{0}) - \langle l \rangle] \rangle$ kann für Membranen im harmonischen Potential, definiert durch Hamiltonian (4.30), ausgedrückt werden als

$$C(\mathbf{x}) = T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}}{K \mathbf{q}^4 + m} = \frac{T}{K} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}}{\mathbf{q}^4 + 4\xi_{\parallel}^{-4}}, \quad (5.40)$$

wobei die in (4.34) eingeführte Definition der parallelen Korrelationslänge benutzt wurde. Durch Transformation auf Polarkoordinaten q und ϕ und Mittelung über alle Winkel erhält man

$$C(x) = \frac{T}{K} \int_0^{\infty} \frac{dq}{(2\pi)^2} q \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \frac{e^{iqx \cos \phi}}{q^4 + 4\xi_{\parallel}^{-4}} = \frac{T}{K} \int_0^{\infty} \frac{dq}{2\pi} q \frac{\mathcal{J}_0(qx)}{q^4 + 4\xi_{\parallel}^{-4}}, \quad (5.41)$$

wobei wir die Definition der Besselfunktion benutzt haben.[29] Mit der Definition $t \equiv q\xi_{\parallel}/\sqrt{2}$ erhalten wir

$$C(x) = \frac{T\xi_{\parallel}^2}{4\pi K} \int_0^{\infty} dt \, t \frac{\mathcal{J}_0(\sqrt{2}tx/\xi_{\parallel})}{t^4 + 1} = -\frac{T\xi_{\parallel}^2}{4\pi K} \text{kei}(\sqrt{2}x/\xi_{\parallel}). \quad (5.42)$$

$kei(\sqrt{2}x/\xi_{\parallel})$ ist eine sogenannte Thomsonsche Funktion, mit deren asymptotischer Entwicklung[29] wir die Korrelationsfunktion für großes x erhalten,

$$C(x) \simeq \frac{T}{K} \frac{\xi_{\parallel}^{5/2}}{4\sqrt{\sqrt{2}\pi x}} e^{-x/\xi_{\parallel}} \sin(x/\xi_{\parallel} + \pi/8). \quad (5.43)$$

Die asymptotische Form der Korrelationsfunktion mit dem Zerfall der Korrelationen proportional zu $e^{-x/\xi_{\parallel}}$ rechtfertigt die Definition der Korrelationslänge in (4.34). Mit $kei(0) = -\pi/4$ erhält man in Übereinstimmung mit (4.38)

$$C(0) = \xi_{\perp}^2 = \frac{T}{K} \frac{\xi_{\parallel}^2}{16}. \quad (5.44)$$

Die entsprechende Rechnung für einen Faden im harmonischen Potential geht aus vom Ausdruck

$$C(x) = T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \frac{e^{iq \cdot x}}{Kq^2 + m} = \frac{T}{K} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \frac{e^{iq \cdot x}}{q^2 + \xi_{\parallel}^{-2}}, \quad (5.45)$$

wobei die parallele Korrelationslänge hier durch $\xi_{\parallel} = (K/m)^{1/2}$ gegeben ist und die Konstante K für die Linienspannung steht. Das Integral ergibt

$$C(x) = \frac{T}{K} \frac{\xi_{\parallel}}{2} e^{-x/\xi_{\parallel}}, \quad (5.46)$$

woraus folgt, daß

$$C(0) = \xi_{\perp}^2 = \frac{T}{K} \frac{\xi_{\parallel}}{2} \quad (5.47)$$

ist. Die Ausdrücke (5.44) und (5.47) lassen sich zusammenfassend schreiben als

$$\boxed{\xi_{\perp} = 2 \left(\frac{T}{K} \right)^{1/2} \left(\frac{\xi_{\parallel}}{8} \right)^{\zeta}}, \quad (5.48)$$

wobei der Rauigkeitsexponent die Werte $\zeta = 1$ für Membranen und $\zeta = 1/2$ für Fäden hat.

Gleichung (5.48) stellt ein wichtiges Ergebnis dar, da sie die parallele Korrelationslänge von Fäden mit der von Membranen verknüpft. Analoge Beziehungen, mit anderen Proportionalitätsfaktoren, sollten auch für die anderen in dieser Arbeit untersuchten Potentialformen gelten, wie in dem folgenden Abschnitt vorgeschlagen wird.

In Abb. 5.4(a) zeigen wir die Korrelationsfunktion für einen Faden in einem harmonischen Potential mit $m/T = 0.1$ und $K/T = 1$; daraus ergibt sich $\xi_{\parallel} = \sqrt{10}$. Die offenen Kreise geben die Ergebnisse einer Monte Carlo Simulation eines Fadens mit

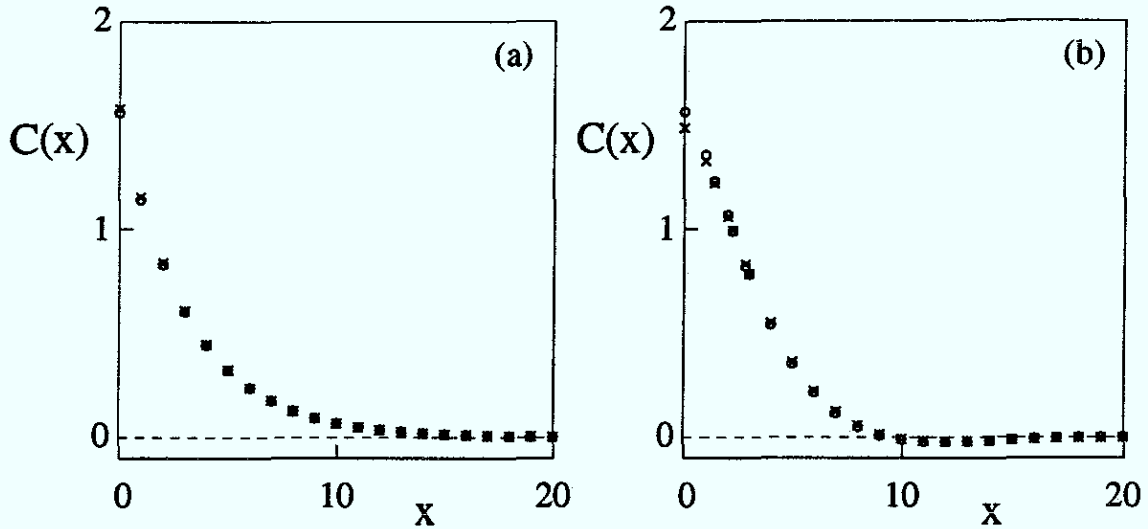


Abbildung 5.4: Korrelationsfunktion für einen Faden (a) und eine Membran (b) im harmonischen Potential. Die offenen Kreise bezeichnen Monte Carlo Ergebnisse, die Kreuze geben exakte Resultate wieder.

500 Diskretisierungspunkten gemittelt über 10^7 Monte Carlo Schritte wieder, die Kreuze bezeichnen die aus (5.46) folgenden exakten Ergebnisse. Die Abweichungen für kleine Werte von x sind wahrscheinlich Diskretisierungseffekte. In Abb. 5.4(b) zeigen wir die Korrelationsfunktion für eine Membran mit 3920 Diskretisierungspunkten. Hier ist $m/T = \sqrt{2}/100$ und $K/T = 1/2$; daraus ergibt sich mit (4.34) eine Korrelationslänge von $\xi_{\parallel} = 3.4485$. Wieder geben die offenen Kreise die Monte Carlo Ergebnisse und die Kreuze die numerisch über (5.42) erhaltenen exakten Ergebnisse an. Auffallend ist der Unterschied zu einer rein exponentiell abfallenden Kurve wie in (a) und der oszillierende Verlauf für große Werte von x . Tatsächlich ist die Membran für Entfernungen von $x \simeq 3.5\xi_{\parallel}$ antikorreliert. Eine Exponentialkurve der Form $\xi_{\perp}^2 e^{-x/\xi_{\parallel}}$ schneidet die Korrelationsfunktion bei $x = 3\xi_{\parallel}/2$. Diesen Sachverhalt können wir für die Auswertung der Monte Carlo Daten benutzen.

In Abb. 5.5 zeigen wir die normierte Korrelationsfunktion für drei verschiedene Stärken des kurzreichweitigen Potentials, berechnet mit Monte Carlo Simulationen. Zur Abschätzung der parallelen Korrelationslänge bestimmen wir den Wert von x , für den $C(x)/C(0)$ ungefähr auf $e^{-3/2}$ abgefallen ist. Wie im letzten Absatz erläutert, gilt für das harmonische Potential dann in guter Näherung $\xi_{\parallel} = x/\log(C(0)/C(x))$, wie auch für eine rein exponentiell abfallende Korrelationsfunktion. Mangels einer besseren Methode benutzen wir diese Vorschrift auch für die in Abb. 5.5 gezeigten Daten. Dabei sind die zur Berechnung von $\xi_{\parallel}$ benutzten Datenpunkte als gefüllte Kreise gekennzeichnet.

Für verschwindendes Potential $U = 0$, Abb. 5.5(a), hier ist $p = 0.01$, erhalten wir mit $C(0) = 1.688 \pm 0.007$ und $C(6) = 0.314 \pm 0.008$ für die parallele Korrelationslänge

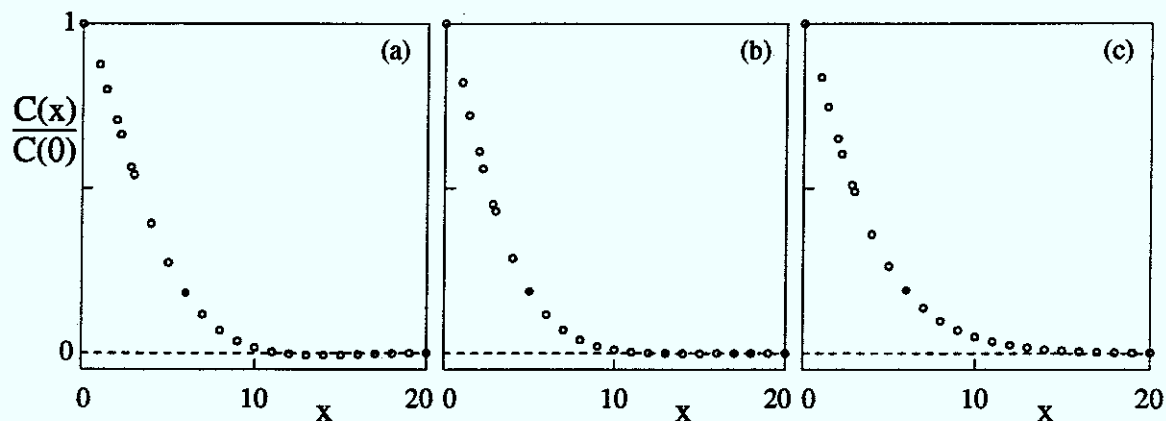


Abbildung 5.5: Normierte Korrelationsfunktionen für (a) $U = 0$, (b) $U = U_c$ und (c) $U = 1.05U_c$. Die gefüllten Kreise geben die für die Bestimmung von $\xi_{||}$ benutzten Datenpunkte wieder.

die Abschätzung $\xi_{||} \simeq 3.6$ in Einheiten der Gitterkonstante. Mit $K/T = 1/2$ und $\langle \delta l \rangle = 2.84 \pm 0.01$ ergibt sich damit für das Verhältnis zum Abstand der Wert $(\frac{K}{T})^{1/2} \langle \delta l \rangle / \xi_{||} \simeq 0.564$. Für eine kritische Potentialstärke, $U = U_c$, Abb. 5.5(b), mit $p = 0.01$, erhalten wir $C(0) = 0.943 \pm 0.001$, $C(5) = 0.17929 \pm 0.001$ und $\langle \delta l \rangle = 1.220 \pm 0.003$, woraus sich $\xi_{||} \simeq 3.01$ ergibt. Für eine Potentialstärke von $U = 1.05U_c$, Abb. 5.5(c), hier ist $p = 0$, erhalten wir $C(0) = 0.98 \pm 0.01$, $C(6) = 0.186 \pm 0.002$ und $\langle \delta l \rangle = 1.018 \pm 0.008$, woraus sich $\xi_{||} \simeq 3.65$ ergibt. Die Fehler der ermittelten Werte für $\xi_{||}$ sind schwer abzuschätzen und natürlich höher anzusetzen als die statistischen Fehler.

Die Korrelationsfunktion für $U = 0$ ähnelt sehr der für ein harmonisches Potential erhaltenen Kurve in Abb. 5.4(b). Insbesondere ist die erhaltene Funktion negativ für $x \simeq 3.5\xi_{||}$. Dieser negative Bereich ist weniger ausgeprägt für $U = U_c$, Abb. 5.5(b), und verschwindet schließlich vollkommen für $U = 1.1U_c$, Abb. 5.5(c); die letztere Kurve ähnelt wieder mehr einer reinen Exponentialfunktion, wie man durch logarithmische Auftragung feststellt. Die hier benutzte Methode der Abschätzung von $\xi_{||}$ ist akkurat für ein harmonisches Potential und auch für Korrelationsfunktionen, die einem reinen Exponentialgesetz folgen. Es ist zu hoffen, daß die Abschätzung von $\xi_{||}$ auch für die in Abb. 5.5 gezeigten Kurven gut ist.

5.4 Universelle Amplitudenverhältnisse

In Abschnitt 4.1, 5.1.2 und Anhang A.2 berechnen wir die Amplitudenverhältnisse von Abstand, Rauigkeit und paralleler Korrelationslänge im Falle von zwei Fäden für verschiedene Potentiale; diese Amplitudenverhältnisse hängen asymptotisch (für kleinen Druck) nur davon ab, ob das kurzreichweitige Potential subkri-

	$C_{\perp} = \langle \delta l \rangle / \xi_{\perp}$	$C_{\parallel} = \left(\frac{K}{T}\right)^{1/2} \langle \delta l \rangle / (\xi_{\parallel}/8)^{\zeta}$	$C_{\parallel}/C_{\perp}$	$C_{\parallel}$ (MC)
$U < U_c$	$\sqrt{5}$	5.8319	2.6081	$\simeq 4.5$
$U = U_c$	1.2643	2.8683	2.2691	$\simeq 2.3$
$U > U_c$	1	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	$\simeq 1.6$
harmon.	-	-	2	-

Tabelle 5.1: Amplitudenverhältnisse von Abstand $\langle \delta l \rangle$, Rauigkeit $\xi_{\perp}$ und paralleler Korrelationslänge $\xi_{\parallel}$ für die drei durch die Stärke U der kurzreichweitigen Anziehung unterschiedenen Fälle und für ein harmonisches Potential.

tisch, kritisch oder bindend ist. Monte Carlo Simulationen in Abschnitt 4.2 und 5.2 ergeben die gleichen Werte für die Verhältnisse zwischen Abstand und Rauigkeit. Dieses Verhältnis hängt im Falle verschwindenden kurzreichweitigen Potentials nicht von der Anzahl der Membranen ab.

Exakte Rechnungen für eine Fläche im harmonischen Potential führen zu einer Formel, die die parallele Korrelationslänge von einer Membran mit der eines Fadens verknüpft, siehe (5.48).

Die aus der Funktionalrenormierung gefolgerte Analogie zwischen Fäden und Membranen legt es nahe, daß sich die Ergebnisse für die Amplitudenverhältnisse durch folgende Beziehung zusammenfassen lassen:

$$C_{\perp} \xi_{\perp} = \langle \delta l \rangle = C_{\parallel} \left(\frac{T}{K}\right)^{1/2} \left(\frac{\xi_{\parallel}}{8}\right)^{\zeta}, \quad (5.49)$$

wobei der Rauigkeitsexponent gegeben ist durch $\zeta = 1/2$ für Fäden und $\zeta = 1$ für Membranen. Die Werte für die Konstanten $C_{\perp}$ und $C_{\parallel}$ sind in Tabelle 5.1 angegeben. Für einen Faden sind die Ergebnisse exakt. Für das harmonische Potential, welches sowohl für einen Faden als auch für eine Membran gelöst werden kann, ist die allgemeine Formel (5.49) auch richtig. Dieser Fall stellt sozusagen die Verbindung her zwischen den Membranen und den Fäden. Für die anderen Potentiale ist die Formel ein Vorschlag. Im Falle von $C_{\perp}$ bestätigen die detaillierten Monte Carlo Simulationen aus Abschnitt 5.2 die Analogie zwischen Fäden und Membranen. Für das Verhältnis zwischen Abstand und paralleler Korrelationslänge ist die Situation weniger klar. In Abschnitt 5.3 bestimmen wir die parallele Korrelationslänge für jeweils einen Druckwert. Da die Unsicherheit bei der Bestimmung sehr groß ist, ist die Übereinstimmung der Monte Carlo Ergebnisse für das Verhältnis $C_{\parallel}$ als befriedigend anzusehen.

Kapitel 6

Zusammenfassung, experimentelle Realisierungen und Ausblick

Das Adhäsionsverhalten von Membranenstapeln und Fadenbündeln wurde für verschiedene Wechselwirkungen untersucht. Es wurden zwei Grenzfälle betrachtet: (1) alle Flächen sind identisch und üben die gleichen Wechselwirkungskräfte auf die benachbarten Flächen aus; und (2) alle Flächen sind identisch und an ein flaches Substrat gebunden, wobei die Wechselwirkung der untersten Fläche mit dem Substrat gleich der Wechselwirkung zwischen den Flächen ist.

Das Verhalten von planaren Fadenbündeln, wo sehr effiziente Transfer Matrix Methoden eingesetzt werden können, sollte auf Grund eines Renormierungs-Argumentes vollkommen analog zu dem Verhalten von Membranenstapeln sein, wo Monte Carlo Methoden benutzt werden; dies wird durch die detaillierten Ergebnisse bestätigt. Die numerischen Rechnungen sind auf maximal vier Flächen (Membranen oder Fäden) beschränkt, die Ergebnisse erlauben aber eine Extrapolation zu dem Fall sehr vieler Flächen.

Da die in dieser Arbeit behandelten Systeme experimentell am ehesten für Multimembransysteme realisierbar sind, werden die Ergebnisse im folgenden exemplarisch für Membranen diskutiert.

In Abb. 6.1 sind die Phasendiagramme für den Fall von freien und gebundenen Membranenstapeln zusammenfassend dargestellt. Dabei sind sowohl die Biegesteifigkeiten der Membranen als auch die Paarwechselwirkungen zwischen den Membranen als gleich vorausgesetzt. In den Rechnungen benutzen wir anziehende Kastenpotentiale, die als kurzreichweitige Potentiale zwischen den Membranen wirken. Tatsächlich sollte dasselbe kritische Verhalten für alle Potentiale, die für große Abstände l schneller als $1/l^2$ abfallen, auftreten. Deshalb sind die in Abb. 6.1 gezeigten Phasendiagramme auch für die zwischen Membranen wirkende Van der Waals Attraktion gültig, welche für große Abstände wie $1/l^4$ abfällt.

Das Wechselwirkungspotential enthält immer eine harte Wand für verschwinden-

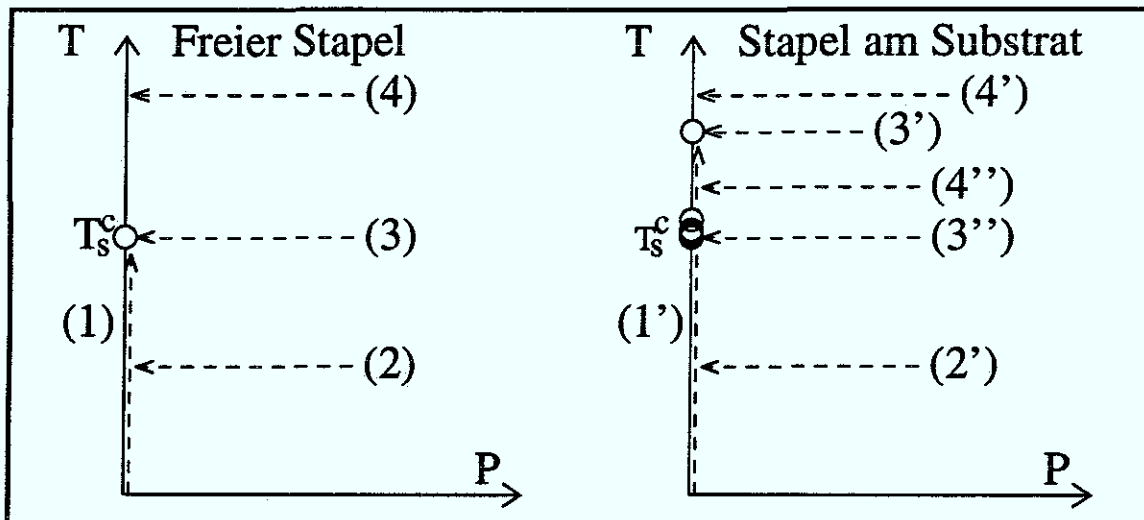


Abbildung 6.1: Allgemeine Phasendiagramme für Stapel von N Membranen, die entweder frei sind (zur Linken), oder an ein flaches Substrat gebunden sind (zur Rechten). P bezeichnet die Stärke des äußeren Druckes, T die Temperatur. Alle Membranen haben gleiche Biegesteifigkeit. Die attraktiven Paarwechselwirkungen zwischen den Membranen und zwischen der untersten Membran und dem Substrat sind als identisch vorausgesetzt. Die offenen Kreise bezeichnen die durch kurzreichweitige Attraktion hervorgerufenen kritischen Adhäsionsübergänge, die gestrichelten Linien entsprechen den verschiedenen möglichen Entbindungsszenarien. Im freien Fall gibt es eine von der Anzahl der Membranen unabhängige Adhäsionstemperatur T_s^c , bei der alle Membranen gleichzeitig entbinden. Für an einem flachen Substrat gebundene Stapel gibt es N getrennte Adhäsionstemperaturen, bei denen jeweils eine Membran entbindet.

den Abstand, die der Nichtdurchdringbarkeit der Membranen Rechnung trägt. Die resultierende kritische Adhäsionstemperatur hängt von einer Kombination der Biegesteifigkeit der Membranen, der Reichweite und der Tiefe der Kastenpotentiale ab. Prinzipiell kann der Adhäsionsübergang auch durch Variation eines dieser Parameter induziert werden. In Abb. 6.1 zeigen wir das Verhalten als Funktion der Temperatur, wobei alle anderen Parameter konstant gehalten werden. Der Druck wirkt zwischen den Membranen und entspricht einer langreichweitigen, linearen Wechselwirkung.

Im Fall von freien Stapeln gibt es für verschwindenden Druck P eine Adhäsionstemperatur T_s^c , durch einen offenen Kreis gekennzeichnet, bei der alle Membranen gleichzeitig entbinden, und die nicht von der Anzahl der Membranen abhängt. Für tiefe Temperaturen sind die Membranen fest aneinandergebunden. Pfad (1) beschreibt die kritische Entbindung des Membranenstapels. Die Divergenz der Membranabstände entlang dieses Pfades folgt einem Potenzgesetz, wobei die kritischen Exponenten auf den numerisch erreichbaren Längenskalen von der Anzahl der Mem-

branen abhängen.

Pfad (2) entspricht der unvollständigen Entbindung, hier ist der Membranstapel durch die kurzreichweitige Wechselwirkung auch für verschwindenden Druck gebunden; der äußere Druck verringert den Abstand zwischen den Membranen noch zusätzlich. Die Pfade (3) und (4) entsprechen der vollständigen Entbindung; hier ist der Stapel für verschwindenden Druck nicht mehr gebunden, und die Abstände zwischen den Membranen divergieren für $P \rightarrow 0$. Dabei können die kritischen Exponenten in diesem Fall korrekt aus der Superposition von dem zwischen den Membranen wirkenden Druck und einer effektiven Fluktuationswechselwirkung berechnet werden. Diese effektive Wechselwirkung, die durch die Einschränkung der möglichen Konfigurationen einer Membran durch die Präsenz der benachbarten Membranen hervorgerufen wird, geht wie $\sim 1/l^2$, wobei l der Abstand zwischen den Membranen ist. Hier ist die interessierende Größe die Amplitude dieser Fluktuationswechselwirkung, welche nur sehr schwach von der Anzahl der Membranen abhängt. Daraus folgt, daß die einzelnen Abstände zwischen den Membranen entlang Pfad (4) ungefähr gleich sind, der Stapel ist also weitgehend homogen. Asymptotisch, also für genügend kleinen Druck, beeinflußt die kurzreichweitige Anziehung zwischen den Membranen die Amplitude der Fluktuationsabstoßung nicht, solange $T > T_c^s$ gilt. Bei Annäherung an den kritischen Punkt mit $T = T_c^s$, das heißt für Pfad (3), ist diese Amplitude allerdings ungefähr um einen Faktor 12 verkleinert.

Die verschiedenen Längenskalen (Abstand zwischen Membranen, Rauigkeit, parallele Korrelationslänge) auf den Pfaden (1), (3) und (4) sind durch universelle Amplitudenverhältnisse verknüpft.

Das Phasendiagramm für einen Stapel aus identischen Membranen, der mit einem flachen Substrat wechselwirkt, ist in Abb. 6.1 zur Rechten dargestellt. Es unterscheidet sich grundlegend von dem Phasendiagramm für freie Stapel. Für einen am Substrat gebundenen Stapel mit N Membranen gibt es nun N durch offene Kreise gekennzeichnete Adhäsionsübergänge. Für verschwindenden Druck, entlang Pfad (1') und von tiefen Temperaturen ausgehend, wo alle Membranen fest am Substrat gebunden sind, entbinden die Membranen (mit der obersten beginnend) einzeln nacheinander. Die Entbindungstemperatur der obersten Membran in einem halb-unendlichen Stapel entspricht der Entbindungstemperatur von freien Stapeln, T_c^s . Die oberen Membranen entbinden fast gleichzeitig, wie an der Häufung der Adhäsionsübergänge in der Nähe von T_c^s in Abb. 6.1 erkennbar ist. Im Kontinuumslimit entbindet die unterste Membran bei $T = \sqrt{2}T_c^s$, wobei T_c^s die kritische Temperatur des freien Stapels ist. Der gesamte Adhäsionsvorgang spielt sich also in einem endlichen Temperaturfenster ab. Dieses Temperaturfenster wird durch Einführung eines mikroskopischen Cutoffs verkleinert, wie aus den numerischen Ergebnissen ersichtlich ist.

In den durchgeführten Rechnungen ist die Wechselwirkung zwischen der untersten Membran und dem Substrat gleich der Wechselwirkung zwischen den Mem-

branen. Tatsächlich gilt das in Abb. 6.1 gezeigte Phasendiagramm auch für den allgemeineren Fall, wo das Substratpotential in der Stärke von dem Potential zwischen den Membranen abweicht, solange es nicht zu schwach ist.

Für das Verhalten unter der Wirkung eines äußeren Druckes ergeben sich die folgenden Abweichungen von dem Fall der freien Stapel: für die vollständige Entbindung, Pfad (4'), ist der Abstand der untersten Membran vom Substrat um den Faktor $2^{1/3}$ kleiner als der Abstand der Membranen untereinander. In dem durch die Pfade (3') und (3'') begrenzten Temperaturfenster ist ein Teil der Membranen gebunden und der Rest ungebunden. Pfad (4'') zum Beispiel entspricht einer unvollständigen Entbindung der unteren Membran und einer vollständigen Entbindung der darüberliegenden Membranen. Da bei den durch die Kreise bezeichneten Temperaturen immer nur eine Membran entbindet, ist für diese Temperaturen nur die Fluktuationskonstante der entbindenden Membran um den Faktor 12 kleiner; die Fluktuationskonstanten der anderen Membranen sind in guter Näherung gleich und entsprechen dem für freie Stapel berechneten Wert.

Experimentelle Realisierungen

Auf der experimentellen Seite wurden einige Teilaspekte der hier behandelten Systeme bereits untersucht. Für andere Aspekte machen wir hier konkrete Vorschläge für die mögliche experimentelle Überprüfung unserer Ergebnisse.

Experimentell bestehen multilamellare Schichten aus Lipiden oder Tensiden und werden in geeigneten Lösungsmitteln hergestellt. Tenside sind amphiphile Moleküle, bei denen der hydrophobe Teil aus einer alkanähnlichen Kette besteht, bei Lipiden sind es zwei Ketten. Der Hauptunterschied besteht in der Löslichkeit in Wasser, charakterisiert durch die kritische Micellenkonzentration (CMC), der maximalen Konzentration von einzelnen Molekülen in Wasser; zusätzliche Moleküle bilden Micellen oder andere kolloidale Aggregate. So ist die CMC von Dipalmitoylphosphatidylcholine (DPPC), einem der Hauptbestandteile von Eilecithin, bei Raumtemperatur ungefähr $10^{-10} M$. [103] Im Gegensatz dazu hat das häufig benutzte ionische Tensid Sodiumdodecylsulfat (SDS) eine CMC von ungefähr $8 \times 10^{-3} M$, das nichtionische Tensid Dodecyloctaglycol ($C_{12}E_8$) eine CMC von ungefähr $9 \times 10^{-5} M$. Der große Unterschied der Löslichkeit in Wasser zwischen Tensiden und Lipiden liegt an der Struktur der hydrophoben Molekülteile. Er führt dazu, daß Lipidmembranen in einem Stapel untereinander praktisch keine Lipidmoleküle austauschen, sondern als getrennte Einheiten koexistieren. Das in dieser Arbeit benutzte Modell für Membranenstapel sollte also eine gute Beschreibung von Lipidsystemen bieten. Für Tenside könnte der schnelle Austausch von Molekülen zwischen fluktuierenden Membranen zu zusätzlichen Wechselwirkungseffekten führen, die in dieser Arbeit aber nicht behandelt wurden.

Außerdem haben Lipidmembranen eine im allgemeinen höhere Biegesteifigkeit als

Tensidschichten; für das Phospholipid DPPC beträgt die experimentell bestimmte Biegesteifigkeit $K \simeq 25T$;[31] für reine Doppelschichten aus dem Tensid $C_{12}E_5$ [97, 91] oder Doppelschichten aus SDS mit geringem Ölanteil in der Mitte[92] beträgt sie $K \simeq T$ (wobei die Boltzmannkonstante $k_B = 1$ ist). Für Tenside ergibt sich damit das Problem, daß die Schichten hier extrem flexibel sind und also auf experimentell relevanten Längenskalen gekrumpelt sein sollten. Diese Effekte, die in dem in dieser Arbeit benutzten Membranenmodell nicht berücksichtigt werden, könnten für Experimente an Tensid-Multischichten eine wichtige Rolle spielen.

Da die Adhäsionstemperatur proportional zur Wurzel der Biegesteifigkeit ist, wird verständlich, daß Phospholipidmembranen (im Gegensatz zu lamellaren Schichten aus Tensiden) bei Zimmertemperaturen im allgemeinen gebundene Stapel bilden. Dabei liegen die Gleichgewichtsabstände zwischen den einzelnen Membranen bei Werten, die ungefähr den Dicken der Doppelschichten ($\sim 4 - 6nm$) entsprechen.[43, 98, 61] Tensidmultischichten hingegen lassen sich praktisch beliebig weit quellen; die anziehenden Van der Waals Kräfte reichen nicht aus, die Schichten zu binden. Experimentell wurden stabile Multischichten mit Abständen von bis zu $1\mu m$ zwischen den Schichten erreicht.[45, 3, 84] Diese Quellexperimente an Tensidsystemen entsprechen dem Pfad (4), wobei normalerweise der Abstand zwischen den Schichten durch dosierte Zugabe von Lösungsmittel eingestellt wird, und nicht durch Variation des Druckes. Tatsächlich wurde so die Fluktuationskonstante experimentell bestimmt (siehe Abschnitt 4.6). Der Einfluß eines äußeren Druckes wurde im Fall von Lipidmembranen mit einer Vielzahl von Methoden untersucht.[81, 86, 95] Diese Untersuchungen entsprechen der unvollständigen Entbindung, Pfad (2).

Die kritische Entbindung, Pfad (1), wurde bisher nur in einigen wenigen Fällen beobachtet. Helfrich untersuchte freie Stapel von zwei bis acht Doppelschichten aus Digalactosyldiacylglycerol (DGDG); diese Lipiddoppelschichten besitzen eine sehr niedrige Biegesteifigkeit von $K \simeq 3 - 5T$ [34], wobei die Van der Waals Attraktion ungefähr der von Phospholipidmembranen entspricht.[63] An diesen Systemen konnte ein Adhäsionsübergang durch Änderung der Temperatur beobachtet werden. In einem anderen Experiment wurde die Biegesteifigkeit von gestapelten DMPC Membranen durch Zugabe von Alkohol verringert; dabei wurde eine kontinuierliche Zunahme des Gleichgewichtsabstandes beobachtet.[93] In beiden Fällen jedoch ist eine quantitative Auswertung mit Hinblick auf kritische Entbindungsexponenten schwierig.

Die kritische Entbindung von Membranenstapeln sollte auf kontrollierte Weise durch Änderung der Hamakerkonstante, also der Stärke der Van der Waals Attraktion, möglich sein. Wie oben dargelegt, sind Phospholipidmembranen in wässrigem Lösungsmittel bei Zimmertemperatur eng aneinander gebunden. Im Gegensatz dazu ist eine Quellung bis zu sehr großen Abständen in einigen wasserähnlichen organischen Lösungsmitteln möglich. So erreicht DOPC in Formamid keinen endlichen Gleichgewichtsabstand,[5] dasselbe gilt offenbar für Eilecithin in Formamid

oder 1,3-Propandiol.[67] Dies liegt an dem Unterschied der Brechungsindizes und dielektrischen Konstanten der verwendeten Lösungsmittel.[67] Aus den Werten dieser Konstanten für die verschiedenen Lösungsmittel und für Lecithin[12] kann theoretisch der entsprechende Wert der Hamakerkonstante abgeleitet werden.[62, 38]

Durch geeignetes Mischen von zum Beispiel Wasser und Formamid sollte man den Wert der Hamakerkonstante beliebig zwischen den Werten für die reinen Lösungsmittel variieren können. Durch Röntgenstreuung an orientierten Multischichten könnte man dann den Abstand zwischen den Membranen als Funktion der Stärke der attraktiven Wechselwirkung bestimmen.[20] Damit sollten kritische Exponenten der Entbindung meßbar sein. Darüberhinaus kann man so auch eine kritische Stärke der Wechselwirkung einstellen, und dann mit den in [92, 93] verwendeten experimentellen Methoden den Einfluß auf die Fluktuationskonstante messen.

Diese Messungen sollten entweder an frei aufgehängten Membranenstapeln[95] oder an Membranenstapeln, die an ein Substrat gebunden sind,[100] durchgeführt werden. Die in dieser Arbeit gefundenen charakteristischen Unterschiede zwischen diesen beiden Situationen sollten so beobachtbar sein. Tatsächlich wurde ein aufeinanderfolgendes Entbinden der oberen Membranen eines an einer Glimmeroberfläche immobilisierten Membranenstapels beobachtet.[99] Ein bindendes flaches Substrat kann aber auch durch die Luft-Lösungsmittel Grenzfläche dargestellt werden.[11] Eine weitere interessante Beobachtungsmöglichkeit der in dieser Arbeit studierten Effekte ist durch Experimente an Multischichten mit einem Kraftmikroskop gegeben,[44, 88, 1] wo Membranenstapel zwischen Glimmeroberflächen unter mechanischem Druck untersucht werden.

Ausblick

Was die Theorie betrifft, so gibt es hier eine Reihe offener Fragen. Das asymptotische kritische Verhalten von freien Flächenstapeln ist noch nicht restlos geklärt: die hier vorgestellten numerischen Ergebnisse weisen nichtuniverselles Verhalten auf den erreichbaren Längenskalen auf, analytische Rechnungen für vergleichbare Modelle jedoch zeigen universelles Verhalten.[7, 36] Exakte Rechnungen für die hier benutzten Modelle sind zur Klärung dieses Punktes erforderlich.

Außerdem sollten realistischere theoretische Modelle untersucht werden; diese beinhalten Potentialverläufe unter Einbeziehung aller zwischen realen Membranen wirkenden Kräfte (siehe Abschnitt 2.2.3), mikroskopische Modellierung der Membran und der Membranadhäsion,[17] und eine über das Krümmungsmodell hinausgehende Behandlung der Elastizität der Membranen. Krumplungsvorgänge, wie sie bei sehr flexiblen lamellaren Systemen auftreten, sollten auch bei der Adhäsion eine Rolle spielen und könnten durch eine andere Parametrisierung der Membranen betrachtet werden. Zusätzlich können Membranen während der Adhäsion unter Spannung stehen; auch dieser Effekt ist theoretisch noch nicht völlig verstanden.

Darüberhinaus wäre es eine theoretisch reizvolle Aufgabe, zu untersuchen, welchen Einfluß zufällig variierende Modellparameter, wie sie bei Lipidmischungen oder bei im Lösungsmittel vorhandenen Makropartikeln auftreten, auf die hier besprochenen Phänomene haben.

Anhang A

Schrödingergleichung

A.1 Herleitung

Hier leiten wir aus der Transfer Matrix Gleichung im Limes verschwindenden Gitterparameters die Schrödingergleichung her.[102] Der Hamiltonian für zwei Fäden mit Linienspannung K und einem beliebigem Potential $V(l)$ ist nach Subtraktion der Schwerpunktkoordinate (siehe Abschnitt 2.2.2) gegeben durch

$$\mathcal{H}\{l(x)\} = \int dx \left\{ \frac{1}{4} K \left(\frac{dl(x)}{dx} \right)^2 + V(l(x)) \right\}. \quad (\text{A.1})$$

Nach Diskretisierung der Koordinate x mit der Gitterkonstante Δx erhält man

$$\mathcal{H}\{l(x_i)\} = \sum_i \Delta x \left\{ \frac{1}{4} K \left(\frac{l(x_i) - l(x_{i+1})}{\Delta x} \right)^2 + V(l(x_{i+1})) \right\}, \quad (\text{A.2})$$

was sich durch Aufspaltung des Hamiltonians schreiben läßt als

$$\mathcal{H}\{l(x_i)\} = \sum_i \Delta x H(l(x_i), l(x_{i+1})). \quad (\text{A.3})$$

Die bedingte Gewichtsverteilung der Fadenposition l für $x = x_{i+1}$ ist gegeben durch

$$W(x_{i+1}, l) = \int dl' \exp(-\Delta x H(l', l)/T) W(x_i, l'), \quad (\text{A.4})$$

die Exponentialfunktion in dem Integral wird als Transfermatrix bezeichnet. Für den durch (A.2) gegebenen Energieausdruck erhalten wir

$$W(x_{i+1}, l) = \exp(-\Delta x V(l)/T) \int dl' \exp\left(-\frac{K}{4\Delta x T} (l' - l)^2\right) W(x_i, l'). \quad (\text{A.5})$$

Die Taylorentwicklung von $W(x_i, l')$ um $l' = l$ ist formal gegeben durch

$$W(x_i, l') = \exp((l' - l)\partial/\partial l) W(x_i, l), \quad (\text{A.6})$$

mit $\tau \equiv l' - l$ können wir (A.5) schreiben als

$$W(x_{i+1}, l) = \exp(-\Delta x V(l)/T) \int d\tau \exp\left(-\frac{K}{4\Delta x T} \tau^2 + \tau \frac{\partial}{\partial l}\right) W(x_i, l). \quad (\text{A.7})$$

Das Integral kann gelöst werden und ergibt

$$W(x_{i+1}, l) = \exp(-\Delta x V(l)/T) \left(\frac{4\Delta x \pi T}{K}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{\Delta x T}{K} \frac{\partial^2}{\partial l^2}\right) W(x_i, l). \quad (\text{A.8})$$

Nun entwickeln wir die beiden Exponentialfunktionen bis zur ersten Ordnung in Δx , die Konstante $(4\Delta x \pi T/K)^{1/2}$ bestimmt den Nullpunkt und die Skala der freien Energie und wird weggelassen. Dann erhält man

$$W(x_{i+1}, l) \simeq \left(1 - \Delta x V(l)/T + \frac{\Delta x T}{K} \frac{\partial^2}{\partial l^2}\right) W(x_i, l), \quad (\text{A.9})$$

was sich als Differenzengleichung schreiben läßt,

$$\frac{W(x_{i+1}, l) - W(x_i, l)}{\Delta x} = -\frac{1}{T} \left(V(l) - \frac{T^2}{K} \frac{\partial^2}{\partial l^2}\right) W(x_i, l). \quad (\text{A.10})$$

Im Limes $\Delta x \rightarrow 0$ erhalten wir eine "zeitabhängige" Schrödingergleichung

$$\frac{\partial W(x_i, l)}{\partial x} = -\frac{\hat{H}}{T} W(x_i, l) \quad (\text{A.11})$$

mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H} = V(l) - \frac{T^2}{K} \frac{\partial^2}{\partial l^2}. \quad (\text{A.12})$$

Die freie Energie pro Länge des Fadens kann aus der stationären Gewichtsfunktion $W(x_i, l)$, die einer partiellen Zustandssumme entspricht, wie folgt berechnet werden:

$$f = \frac{\Delta F}{\Delta x} = -\frac{T}{\Delta x} \ln \left(\frac{W(x_{i+1}, l)}{W(x_i, l)} \right) = -\frac{T}{\Delta x} \ln \left(1 + \frac{W(x_{i+1}, l) - W(x_i, l)}{W(x_i, l)} \right). \quad (\text{A.13})$$

Wieder für $\Delta x \rightarrow 0$ erhalten wir

$$f = -\frac{T}{W(x_i, l)} \left(\frac{W(x_{i+1}, l) - W(x_i, l)}{\Delta x} \right) = -\frac{T}{W(x_i, l)} \frac{\partial W(x_i, l)}{\partial x}. \quad (\text{A.14})$$

Die stationäre Schrödingergleichung ist also gegeben durch

$$fW(l) = \hat{H}W(l), \quad (\text{A.15})$$

wobei die freie Energie dem kleinsten Eigenwert der Schrödingergleichung entspricht. Erwartungswerte werden wie gewohnt als Integral über die quadrierte normierte Lösung $W(l)$ berechnet.

A.2 Kastenpotential

Hier ist der Wert des Potentials für $0 < l < l^o$ gegeben durch V^o ; es ist unendlich abstoßend für $l < 0$ und verschwindet für $l > l^o$. Mit der Transformation $y \equiv l/l^o$, der Definition $\varepsilon_o \equiv K(l^o/T)^2 f$ und dem reduzierten Potential $v(y)$, definiert durch $v(y) = -v^o = V^o K(l^o/T)^2$ für $0 < y < 1$, läßt sich die stationäre Schrödingergleichung schreiben als

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial y^2} + v(y) - \varepsilon_o \right] \phi(y) = 0. \quad (\text{A.16})$$

Der gebundene Grundzustand ist gegeben durch $\phi(y) = A \sin(\sqrt{\varepsilon_o + v^o} y)$ für $y < 1$ und $\phi(y) = C \exp(-\sqrt{-\varepsilon_o} y)$ für $y > 1$. Die Forderung nach Stetigkeit der Lösung und ihrer Ableitung bei $y = 1$ führt auf die Bestimmungsgleichung

$$-\sqrt{-\varepsilon_o} \tan(\sqrt{\varepsilon_o + v^o}) = \sqrt{\varepsilon_o + v^o}. \quad (\text{A.17})$$

Daraus folgt für $v^o \geq v_c$ in führender Ordnung

$$\varepsilon_o \simeq -\frac{1}{4}(v^o - v_c)^2, \quad (\text{A.18})$$

wobei $v_c = \pi^2/4$. Die parallele Korrelationslänge $\xi_{||}$ ist damit gegeben durch

$$\xi_{||} \equiv -T/f = 4 \frac{K}{T} (l^o)^2 (v^o - v_c)^{-2}. \quad (\text{A.19})$$

Der Erwartungswert des Fadenabstandes, $\langle l \rangle$, ist definiert durch

$$\langle l \rangle = l^o \frac{\int_0^\infty y \phi^2(y)}{\int_0^\infty \phi^2(y)}. \quad (\text{A.20})$$

Asymptotisch, für $v^o \rightarrow v_c$, ist dieser Ausdruck gegeben durch

$$\langle l \rangle = l^o \frac{\int_0^\infty y e^{-2\sqrt{-\varepsilon_o} y}}{\int_0^\infty e^{-2\sqrt{-\varepsilon_o} y}} = l^o (v^o - v_c)^{-1}. \quad (\text{A.21})$$

Analog berechnet man die Rauigkeit, $\xi_{\perp}$, für $v^o \rightarrow v_c$ zu

$$\xi_{\perp} \equiv \sqrt{\langle l^2 \rangle - \langle l \rangle^2} = l^o (v^o - v_c)^{-1}. \quad (\text{A.22})$$

Für die Verhältnisse der Längenskalen ergibt sich also die einfache Relation

$$\xi_{\perp} = \langle l \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{T}{K} \right)^{1/2} \xi_{||}^{1/2}. \quad (\text{A.23})$$

Anhang B

Orthogonaltransformation

Zuerst werden die elastischen Konstanten in (3.2) durch die folgende Reskalierung in den Koordinaten adsorbiert:

$$y'_1 = \sqrt{K_1} l_1, \quad y'_2 = \sqrt{K_2} l_2, \quad y'_3 = \sqrt{K_3} l_3. \quad (\text{B.1})$$

Nach einer geeigneten Rotation des Koordinatensystem hängt die potentielle Energie in (3.2) nur mehr von zwei Koordinaten ab. Diese Transformation $(y_1, y_2, y_3) = \mathcal{O}[(y'_1, y'_2, y'_3)]$ ist explizit gegeben durch die Matrix

$$\mathcal{O} = \begin{pmatrix} \frac{(K_1)^{-1/2}}{b} & -\frac{(K_2)^{-1/2}}{b} & 0 \\ \frac{(K_3/K_2)^{1/2}}{(K_1)^{1/2}} & \frac{(K_3/K_1)^{1/2}}{(K_2)^{1/2}} & -\frac{b(K_1 K_2)^{1/2}}{(K_3)^{1/2}} \\ \frac{ab}{a} & \frac{ab}{a} & \frac{a}{a} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.2})$$

wobei $a \equiv (K_1 + K_2 + K_3)^{1/2}$, $b \equiv (1/K_1 + 1/K_2)^{1/2}$ und $\det(\mathcal{O}) = 1$ und $\mathcal{O}^{-1} = \mathcal{O}^T$. Die Abstände $l_1 - l_2$ und $l_2 - l_3$ im Hamiltonian (3.2) sind nun gegeben durch;

$$l_1 - l_2 = \frac{y'_1}{\sqrt{K_1}} - \frac{y'_2}{\sqrt{K_2}} = \left(\frac{1}{K_1} + \frac{1}{K_2} \right)^{\frac{1}{2}} y_1, \quad (\text{B.3})$$

$$l_2 - l_3 = \frac{y'_2}{\sqrt{K_2}} - \frac{y'_3}{\sqrt{K_3}} = \left(\frac{1}{K_2} + \frac{1}{K_3} \right)^{\frac{1}{2}} (y_2 \sin \theta - y_1 \cos \theta), \quad (\text{B.4})$$

wobei

$$\sin \theta = \left(\frac{K_2(K_1 + K_2 + K_3)}{(K_1 + K_2)(K_2 + K_3)} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{B.5})$$

$$\cos \theta = \left(\frac{K_1 K_3}{(K_1 + K_2)(K_2 + K_3)} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (\text{B.6})$$

Die potentielle Energie hängt nicht von der Schwerpunktkoordinate $y_3 = (K_1 l_1 + K_2 l_2 + K_3 l_3)/a$ ab, die frei diffundiert und damit nicht betrachtet zu werden braucht.

Anhang C

RSOS Modell in einer Dimension

Der diskrete Hamiltonian für zwei Fäden nach Subtraktion der Schwerpunktkoordinate ist gegeben durch

$$\mathcal{H}\{z_i\}/T = \sum_i \left[\frac{1}{2}(z_i - z_{i+1})^2 + \hat{V}(z_{i+1}) \right] \quad (\text{C.1})$$

mit

$$\hat{V}(z) = -U \quad \text{für} \quad 0 < z < z^o. \quad (\text{C.2})$$

Die Reichweite des Potentials wird in Vielfachen der Gitterkonstante, Δz , gemessen und ist gegeben durch $z^o = n\Delta z$. Für den Fall $n = 1$, wo also die attraktive Region auf einen Gitterpunkt beschränkt ist, ist das Problem bereits gelöst worden.[13] Hier erweitern wir die Ergebnisse für U_c auf $n = 2, 3$. Zuerst definieren wir

$$B \equiv e^{-U} \quad \text{und} \quad R \equiv e^{-(\Delta z)^2/2}. \quad (\text{C.3})$$

Die kritische Potentialstärke kann dann allgemein ausgedrückt werden als

$$B_c = \frac{1 + x(n)R}{1 + 2R}, \quad (\text{C.4})$$

wobei

$$x(n = 1) = 1, \quad (\text{C.5})$$

in Übereinstimmung mit dem bereits bekannten Resultat.[13] Darüberhinausgehend erhalten wir

$$x(n = 2) = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{5}}{2} \simeq 1.618, \quad (\text{C.6})$$

$$x(n = 3) = \frac{1}{3} + \frac{2\sqrt{7}}{3} \cos \left[\frac{\arccos\left(\frac{1}{2\sqrt{7}}\right)}{3} - \frac{\pi}{3} \right] \simeq 1.802. \quad (\text{C.7})$$

Für unendlich große Potentialreichweite erwartet man $x(n = \infty) = 2$. Wenn man nun die Gitterkonstante $\Delta z = 1$ setzt wie in den numerischen Rechnungen, erhält man für die kritische Potentialtiefe U_c die Ergebnisse $U_c(z^o = 1) \simeq 0.3203$, $U_c(z^o = 2) \simeq 0.1106$, und $U_c(z^o = 3) \simeq 0.0558$. Diese exakten Resultate sind in Abb. 3.11 mit Kreuzen bezeichnet. Die entsprechenden numerischen Ergebnisse, erzielt für ein System bestehend aus 1000 diskreten Gitterplätzen, sind mit gefüllten Kreisen bezeichnet und stimmen sehr gut mit diesen exakten Resultaten überein.

Anhang D

Störungsrechnung

D.1 Drei Fäden

Die aus dem Hamiltonian (3.3) folgende Schrödingergleichung für drei Fäden ist bestimmt durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{T^2}{2} \frac{d^2}{dy_1^2} - \frac{T^2}{2} \frac{d^2}{dy_2^2} + V \left(\sqrt{\frac{1}{K_1} + \frac{1}{K_2}} y_1 \right) + V \left(\sqrt{\frac{1}{K_2} + \frac{1}{K_3}} (y_2 \sin \theta - y_1 \cos \theta) \right). \quad (\text{D.1})$$

Der Winkel θ ist gegeben durch (3.7) und legt die relative Steifigkeit des inneren Fadens fest. Mit der Koordinatentransformation ($y'_1 = y_1, y'_2 = y_2 \sin \theta - y_1 \cos \theta$) läßt sich dieser Ausdruck schreiben als

$$\hat{H} = -\frac{T^2}{2} \frac{d^2}{dy_1'^2} - \frac{T^2}{2} \frac{d^2}{dy_2'^2} + T^2 \cos \theta \frac{d^2}{dy_1' dy_2'} + V \left(\sqrt{\frac{1}{K_1} + \frac{1}{K_2}} y'_1 \right) + V \left(\sqrt{\frac{1}{K_2} + \frac{1}{K_3}} y'_2 \right). \quad (\text{D.2})$$

Durch Aufspaltung des Hamiltonians,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + T^2 \cos \theta \hat{H}_1, \quad (\text{D.3})$$

läßt sich der Einfluß des Störoperators

$$\hat{H}_1 = \frac{d^2}{dy_1' dy_2'} \quad (\text{D.4})$$

auf die freie Energie f in erster Näherung berechnen als

$$f \simeq f_0 + T^2 \cos \theta \langle \phi_0 | \hat{H}_1 | \phi_0 \rangle, \quad (\text{D.5})$$

wobei ϕ_0 die normierte Grundwellenfunktion des ungestörten Hamiltonoperators $\hat{H}_0$ ist. Diese Wellenfunktion ist exakt bekannt (siehe Abschnitt A.2) und läßt

sich separieren in $\phi_0 = \phi_0(y'_1)\phi_0(y'_2)$. Damit ergibt sich für das Matrixelement des Störoperators

$$\langle \phi_0 | \hat{H}_1 | \phi_0 \rangle \equiv \int_0^\infty dy'_1 \int_0^\infty dy'_2 \phi_0(y'_1) \phi_0(y'_2) \hat{H}_1 \phi_0(y'_1) \phi_0(y'_2) \quad (D.6)$$

$$= \int_0^\infty dy'_1 \phi_0(y'_1) \frac{d\phi_0(y'_1)}{dy'_1} \int_0^\infty dy'_2 \phi_0(y'_2) \frac{d\phi_0(y'_2)}{dy'_2}. \quad (D.7)$$

Mit partieller Integration erhält man

$$\int_0^\infty dy'_1 \phi_0(y'_1) \frac{d\phi_0(y'_1)}{dy'_1} = \phi_0(y'_1)^2 \Big|_0^\infty - \int_0^\infty dy'_1 \phi_0(y'_1) \frac{d\phi_0(y'_1)}{dy'_1}, \quad (D.8)$$

woraus mit den Randbedingungen $\phi_0(0) = \phi_0(\infty) = 0$ folgt, daß das Matrixelement verschwindet. Der Störoperator $\hat{H}_1$ hat also in linearer Ordnung keinen Einfluß auf die freie Energie; dies bedeutet insbesondere, daß die kritische Potentialtiefe der Entbindung und die Entbindungsexponenten um $\theta = \pi/2$ in erster Ordnung nicht von θ abhängen. Im Gegensatz dazu scheinen die Daten für die Exponenten ψ und $\nu_\perp$ (siehe Abb.3.8) jedoch auf eine kleine Steigung um $\theta = \pi/2$ hinzudeuten. In jedem Falle muß beachtet werden, daß die Aussagekraft einer Störungsrechnung begrenzt ist. Selbst wenn alle höheren Matrixelemente der Störungsrechnung verschwinden sollten, heißt dies nicht unbedingt, daß das kritische Verhalten unabhängig von dem Störparameter ist. Die freie Energie könnte dann nämlich immer noch mit einer wesentlichen Singularität vom Störparameter abhängen.

D.2 Wechselwirkung zwischen übernächsten Nachbarn

Die aus dem Hamiltonian (3.3) mit zusätzlicher Dreipunktwechselwirkung (3.72) folgende Schrödingergleichung für drei Fäden ist definiert durch den Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{T^2}{2} \frac{d^2}{dy_1^2} - \frac{T^2}{2} \frac{d^2}{dy_2^2} + V \left(\sqrt{\frac{1}{K_1} + \frac{1}{K_2}} y_1 \right) + V \left(\sqrt{\frac{1}{K_2} + \frac{1}{K_3}} (y_2 \sin \theta - y_1 \cos \theta) \right) \\ & + \frac{V_{(3)}^o - 2V^o}{(V^o)^2} V \left(\sqrt{\frac{1}{K_1} + \frac{1}{K_2}} y_1 \right) V \left(\sqrt{\frac{1}{K_2} + \frac{1}{K_3}} (y_2 \sin \theta - y_1 \cos \theta) \right). \end{aligned} \quad (D.9)$$

Wieder spalten wir den Hamiltonian auf, und zwar in

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + (V_{(3)}^o - 2V^o) \hat{H}_1. \quad (D.10)$$

Für $\theta = \pi/2$, dies entspricht dem Fall von zwei Fäden die durch eine harte Wand getrennt sind, läßt sich der Störoperator schreiben als

$$\hat{H}_1 = V \left(\frac{y_1}{K_1^{1/2}} \right) V \left(\frac{y_2}{K_3^{1/2}} \right) \frac{1}{(V^o)^2}. \quad (D.11)$$

Der Erwartungswert dieses Operators, $\langle \phi_0 | \hat{H}_1 | \phi_0 \rangle$, entspricht der Wahrscheinlichkeit, daß beide äußeren Fäden gleichzeitig an die harte Wand gebunden sind. Wieder können wir die Tatsache benutzen, daß sowohl die Grundzustandswellenfunktion als auch der Störoperator in den beiden Koordinaten separieren, und müssen daher nur die Bindungswahrscheinlichkeit für eine Koordinate berechnen:

$$\mathcal{P} \equiv \left\langle \phi_0(y_1) \left| V \left(\frac{y_1}{K_1^{1/2}} \right) \frac{1}{V^o} \right| \phi_0(y_1) \right\rangle. \quad (\text{D.12})$$

Die freie Energie eines Fadens an einer harten Wand ist gegeben durch

$$f = -\frac{1}{4}(v^o - v_c)^2 \frac{T^2}{2K_1(l^o)^2}, \quad (\text{D.13})$$

wobei $v^o \equiv -2K_1 V^o (l^o/T)^2$ und $v_c = \pi^2/4$. Mit der Identität

$$\langle V(y_1) \rangle = \mathcal{P} V^o = T V^o \frac{\partial f/T}{\partial V^o} \quad (\text{D.14})$$

erhalten wir aus (D.13)

$$\mathcal{P} = \frac{1}{2}(v^o - v_c). \quad (\text{D.15})$$

Für den Erwartungswert des Störoperators folgt daraus

$$\langle \phi_0 | \hat{H}_1 | \phi_0 \rangle = \frac{1}{4}(v^o - v_c)^2. \quad (\text{D.16})$$

Welche Signifikanz hat dieses Ergebnis? Setzt man die freie Energie an als

$$f(v^o, x) = c(x)(v^o - v_c(x))^{\nu_{||}(x)}, \quad (\text{D.17})$$

wobei x der Störparameter ist, so folgt der erste Term der Entwicklung nach x als

$$\frac{\delta f}{\delta x} = c'(v^o - v_c)^{\nu_{||}} - v_c' \nu_{||} c(v^o - v_c)^{\nu_{||}-1} + \ln(v^o - v_c) \nu_{||}' c(v^o - v_c)^{\nu_{||}}. \quad (\text{D.18})$$

Da (D.16) proportional zu f selber ist (siehe (A.18)), ist nur die Konstante c linear vom Störparameter abhängig. Das kritische Verhalten, also Exponenten und Entbindungstemperatur, hängen in erster Ordnung nicht von der Dreipunktwechselwirkung ab.

Literaturverzeichnis

- [1] O. Abillon und E. Perez, J. Phys. France **51**, 2543 (1990).
- [2] D.B. Abraham und E.R. Smith, Phys. Rev. B **26**, 1480 (1982).
- [3] J. Appell, P. Bassereau, J. Marignan und G. Porte, Colloid Polym. Sci. **267**, 600 (1989).
- [4] P. Bassereau, J. Marignan und G. Porte, J. Phys. (France) **48**, 673 (1987).
- [5] B.A. Bergenstahl and P. Stenius, J. Phys. Chem. **91**, 5944 (1987).
- [6] *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, editiert von K. Binder (Springer-Verlag, Berlin, 1987); K. Binder und D.W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, (Springer-Verlag, Berlin, 1988).
- [7] T.W. Burkhardt und P. Schlottmann, J. Phys. A. **26**, L501 (1993).
- [8] J.W. Cahn, J. Chem. Phys. **66**, 3667 (1977).
- [9] A. Caillé, C.R. Acad. Sci. B **274**, 891 (1972).
- [10] K.M. Case, Phys. Rev. B **80**, 797 (1950).
- [11] G. Cevc, W. Fenzl und L. Sigl, Science **249**, 1161 (1990).
- [12] R.J. Cherry und D. Chapman, J. Mol. Biol. **30**, 551 (1967); **40**, 19 (1969).
- [13] S.T. Chui und J.D. Weeks, Phys. Rev. B, **23**, 2438 (1981).
- [14] J. Cook-Röder und R. Lipowsky, Europhys. Lett. **18**, 433 (1992).
- [15] F. David , J. Phys. France **51**, C7-115 (1990).
- [16] F. David und S. Leibler, J. Phys. II France **1**, 959 (1991).
- [17] E.A. Evans, Biophys. J. **48**, 175 (1985); **48** , 185 (1985).
- [18] E.A. Evans und V.A. Parsegian, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **83**, 7132 (1986).

- [19] D.W. Fawcett, *Atlas zur Elektronenmikroskopie der Zelle* (Urban & Schwarzenberg, München, 1973).
- [20] W. Fenzl, persönliche Mitteilung.
- [21] M.E. Fisher, J. Stat. Phys. **34**, 667 (1984).
- [22] M.E. Fisher, J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2, **82**, 1569 (1986).
- [23] M.E. Fisher und M. Gelfand, J. Stat. Phys. **53**, 175 (1988).
- [24] G. Forgacs, R. Lipowsky und Th. M. Nieuwenhuizen, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, editiert von C. Domb und J. Lebowitz (Academic, London, 1991), Vol. 14.
- [25] J. Frohn, M. Giesen, M. Poensgen, J.F. Wolf und H. Ibach, Phys. Rev. Lett. **67**, 3543 (1991).
- [26] P.G. De Gennes und C. Taupin, J. Phys. Chem. **86**, 2294 (1982).
- [27] L. Golubović und T.C. Lubensky, Phys. Rev. B **39**, 12110 (1989).
- [28] G. Gompper und D.M. Kroll, Europhys. Lett. **9**, 59 (1989).
- [29] Gradstein und Ryshik, *Summen-, Produkt- und Integraltafeln* (Verlag Harri Deutsch, Thun, 1981).
- [30] W. Harbich und W. Helfrich, Chem. Phys. Lipids **36**, 39 (1984).
- [31] W. Helfrich, Z. Naturforsch. **33a**, 305 (1978)
- [32] W. Helfrich und R.-M. Servuss, Nuovo Cimento **3**, 137 (1984).
- [33] W. Helfrich, J. Phys. France **46**, 1263 (1985).
- [34] W. Helfrich und M. Mutz, in *Random Fluctuations and Growth*, editiert von H.E. Stanley und N. Ostrowsky, Kluwer, Dordrecht (1988); M. Mutz und W. Helfrich, Phys. Rev. Lett. **62**, 2881 (1989).
- [35] W. Helfrich, J. Phys. II France **3**, 385 (1993).
- [36] C. Hiergeist, M. Lässig und R. Lipowsky, wird publiziert (1993).
- [37] D.A. Huse und M.E. Fisher, Phys. Rev. B **29**, 239 (1984).
- [38] J.N. Israelachvili, *Intermolecular and Surface Forces* (Academic Press, London, 1991).

- [39] J.N. Israelachvili und H. Wennerström, J. Phys. Chem. **96**, 520 (1992).
- [40] W. Janke und H. Kleinert, Phys. Rev. Lett. **58**, 144 (1987).
- [41] W. Janke, H. Kleinert und M. Meinhart, Phys. Lett. B **217**, 525 (1989).
- [42] D. Jasnow, Rep. Prog. Phys. **47**, 1059 (1984).
- [43] G.L. Jendrasiak und J.H. Hasty, Biochim. Biophys. Acta **337**, 79 (1974).
- [44] P. Kékicheff und H.K. Christenson, Phys. Rev. Lett. **63**, 2823 (1989).
- [45] F.C. Larche, J. Appell, G. Porte, P. Bassereau und J. Marignan, Phys. Rev. Lett. **56**, 1700 (1986).
- [46] D.D. Lasic, Biochem. J. **256**, 1 (1988).
- [47] S. Leibler und R. Lipowsky, Phys. Rev. B **35**, 7004 (1987).
- [48] R. Lipowsky, Phys. Rev. B **32**, 1731 (1985).
- [49] R. Lipowsky, Europhys. Lett. **7**, 255 (1988).
- [50] R. Lipowsky, Phys. Rev. Lett. **62**, 704 (1989).
- [51] R. Lipowsky, Physica Scripta T**29**, 259 (1989).
- [52] R. Lipowsky, Nature (London) **349**, 475 (1991); Physica A **194**, 114 (1993).
- [53] R. Lipowsky, Physica A **177**, 182 (1991).
- [54] R. Lipowsky und M.E. Fisher, Phys. Rev. Lett. **57**, 2411 (1986); Phys. Rev. B **36**, 2126 (1987).
- [55] R. Lipowsky und S. Grothans, Europhys. Lett. **23**, 599 (1993).
- [56] R. Lipowsky, S. Grothans und G.J.O. Schmidt, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **237**, 11 (1992).
- [57] R. Lipowsky und S. Leibler, Phys. Rev. Lett. **56**, 2541 (1986).
- [58] R. Lipowsky und T.M. Nieuwenhuizen, J. Phys. A **21**, L89 (1988).
- [59] *The Structure and Conformation of Amphiphilic Membranes*, editiert von R. Lipowsky, D. Richter und K. Kremer (Springer-Verlag, Berlin, 1992).
- [60] R. Lipowsky und B. Zielinska, Phys. Rev. Lett. **62**, 1572 (1989).

- [61] L.J. Lis, M. McAlister, N. Fuller, R.P. Rand und V.A. Parsegian, *Biophys. J.* **37**, 657 (1982).
- [62] J. Mahanty und B.W. Ninham, *Dispersion Forces* (Academic Press, London, 1976).
- [63] J. Marra, *J. Colloid Interface Sci.* **109**, 11 (1986).
- [64] J.B. McGuire, *J. Math. Phys.* **5**, 622 (1964).
- [65] J.B. McGuire und C.A. Hurst, *J. Math. Phys.* **13**, 1595 (1972).
- [66] J.B. McGuire und C.A. Hurst, *J. Math. Phys.* **29**, 155 (1988).
- [67] T.J. McIntosh, A.D. Magid und S.A. Simon, *Biochemistry* **28**, 7904 (1989).
- [68] *Physics of Amphiphilic Layers*, editiert von J. Meunier, D. Langevin und N. Boccara (Springer-Verlag, Berlin, 1987).
- [69] S.T. Milner und D. Roux, *J. Phys. I France* **2**, 1741 (1992).
- [70] F. Nallet, D. Roux und J. Prost, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 276 (1989).
- [71] F. Nallet, D. Roux und J. Prost, *J. Phys. France* **50**, 3147 (1989).
- [72] F. Nallet, D. Roux und S.T. Milner, *J. Phys. France* **51**, 2333 (1990).
- [73] T. Nattermann, I. Lyuksyutov und M. Schwartz, *Europhys. Lett.* **16**, 295 (1991).
- [74] *Statistical Physics of Membranes and Surfaces*, editiert von D. Nelson, T. Piran und S. Weinberg (World Scientific, Singapore, 1989).
- [75] R.R. Netz und R. Lipowsky, *Phys. Rev. E* **47**, 3039 (1993).
- [76] R.R. Netz und R. Lipowsky, *J. Phys. I France* **4**, 47 (1994).
- [77] R.R. Netz und R. Lipowsky, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3596 (1993).
- [78] R.R. Netz und R. Lipowsky, *Turk. J. Phys.*, im Druck (1994).
- [79] R. Pandit, M. Schick und M. Wortis, *Phys. Rev. B* **26**, 5112 (1982).
- [80] G. Parisi, *Statistical Field Theory* (Addison-Wesley, Redwood City, 1988).
- [81] V.A. Parsegian, N. Fuller und R.P. Rand, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **76**, 2750 (1979).

- [82] R. Podgornik und V.A. Parsegian, *Langmuir* **8**, 557 (1992).
- [83] D. Poland und H.A. Scheraga, *J. Chem. Phys.* **45**, 1456 (1966); 1464 (1966).
- [84] G. Porte, J. Marignan, P. Bassereau und R. May, *Europhys. Lett.* **7**, 713 (1988).
- [85] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky und W.T. Vetterling (Editoren), *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, 1989, S. 523.
- [86] R.P. Rand und V.A. Parsegian, *Biochim. Biophys. Acta* **988**, 351 (1989).
- [87] A.C. Redfield und A. Zangwill, *Phys. Rev. B* **46**, 4289 (1992).
- [88] P. Richetti, P. Kékicheff, J.L. Parker und B.W. Ninham, *Nature* **346**, 252 (1990).
- [89] C. Rottman und M. Wortis, *Phys. Rev. B* **29**, 328 (1984).
- [90] D. Roux und C.R. Safinya, *J. Phys. France* **49**, 307 (1988).
- [91] D. Roux, F. Nallet, E. Freyssingeas, G. Porte, P. Bassereau, M. Skouri und J. Marignan, *Europhys. Lett.* **17**, 575 (1992).
- [92] C.R. Safinya, D. Roux, G.S. Smith, S.K. Sinha, P. Dimon, N.A. Clark und A.M. Bellocq, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2718 (1986).
- [93] C.R. Safinya, E.B. Sirota, D. Roux und G.S. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1134 (1989).
- [94] C.M. Schneider, P. Bressler, P. Schuster, J. Kirschner, J.J. de Miguel und R. Miranda, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1059 (1990).
- [95] G.S. Smith, C.R. Safinya, D. Roux und N.A. Clark, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **144**, 235 (1987).
- [96] D. Sornette, *Europhys. Lett.* **2**, 715 (1986).
- [97] R. Strey, R. Schomäker, D. Roux, F. Nallet und U. Olsson, *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* **86**, 2253 (1990).
- [98] J. Torbet und M.H.F. Wilkins, *J. Theor. Biol.* **62**, 447 (1976).
- [99] Y. Tsao, D.F. Evans, R.P. Rand und V.A. Parsegian, *Langmuir* **9**, 233 (1993).
- [100] S.H. White, R.E. Jacobs und G.I. King, *Biophys. J.* **52**, 663 (1987).
- [101] K.G. Wilson, *Phys. Rev. B* **4**, 3174, 3184 (1971).

- [102] J. Wuttke und R. Lipowsky, Phys. Rev. B **44**, 13042 (1991).
- [103] P. Yeagle, *The Membranes of Cells* (Academic Press, New York, 1987).

Danksagung

Ich danke Herrn Prof. Dr. Reinhard Lipowsky für die interessante Aufgabenstellung, die am Ausgangspunkt dieser Arbeit stand, für seine ständige Diskussionsbereitschaft und für die mir überlassene Freiheit bei der Bearbeitung des Themas.

Allen Mitgliedern der Theorie-II Gruppe des Instituts für Festkörperforschung des Forschungszentrums Jülich sei für die konstruktive Arbeitsatmosphäre und für zahlreiche Diskussionen und Vorschläge gedankt.

Willi Fenzl bin ich für unzählige Gespräche über die experimentellen Aspekte der Physik der Membranen verpflichtet.

Ingo Gersonde hat mir in den letzten Monaten wertvolle Anregungen gegeben.

Ralf Everaers und Ralf Bundschuh danke ich für das angenehme und kameradschaftliche Klima im Büro.

Vor allen anderen danke ich Petra Schmidt, die mir immer wieder gezeigt hat, daß es auch eine Welt außerhalb der Physik gibt.

Jüli-2876

Februar 1994

ISSN 0944-2952