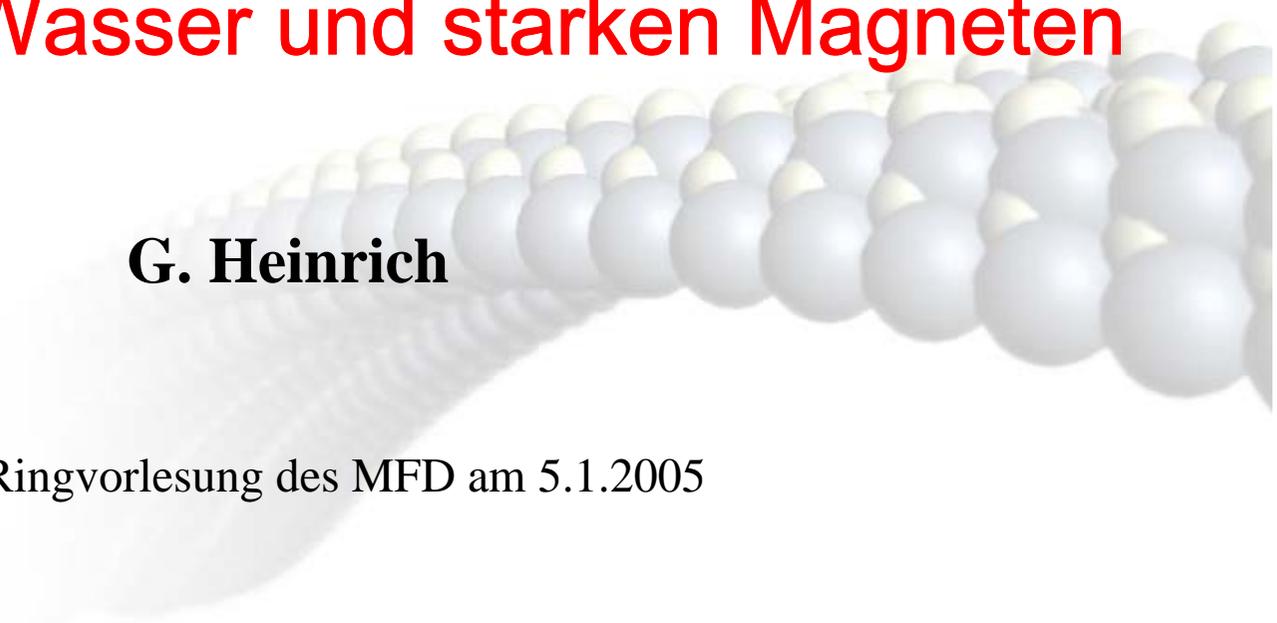


## Kritische Phänomene:

erstaunliche Gemeinsamkeiten zwischen  
langen Makromolekülen,  
kochendem Wasser und starken Magneten

**G. Heinrich**

Ringvorlesung des MFD am 5.1.2005



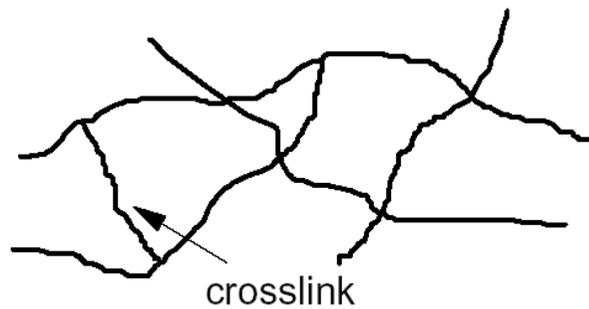
**Structural characteristics** – Closely related to material properties



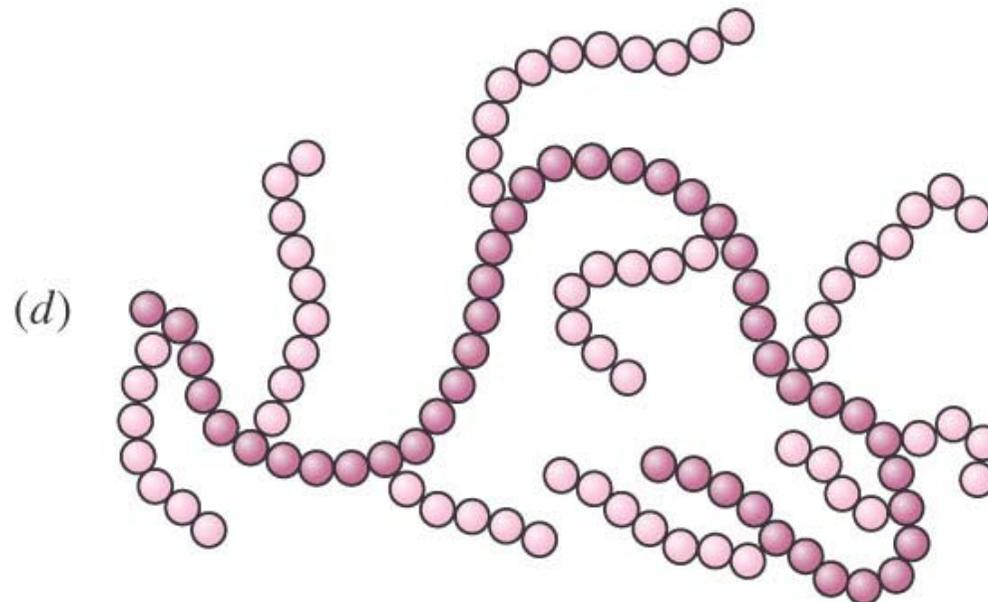
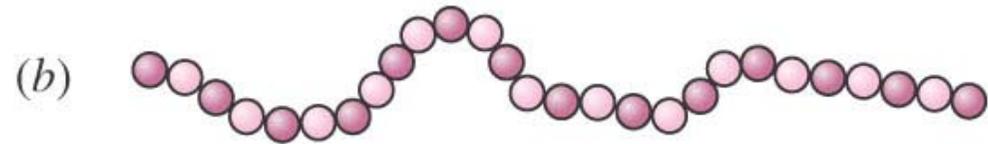
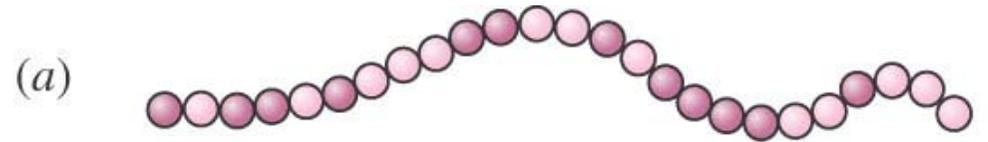
**linear** (uninterrupted straight chain)



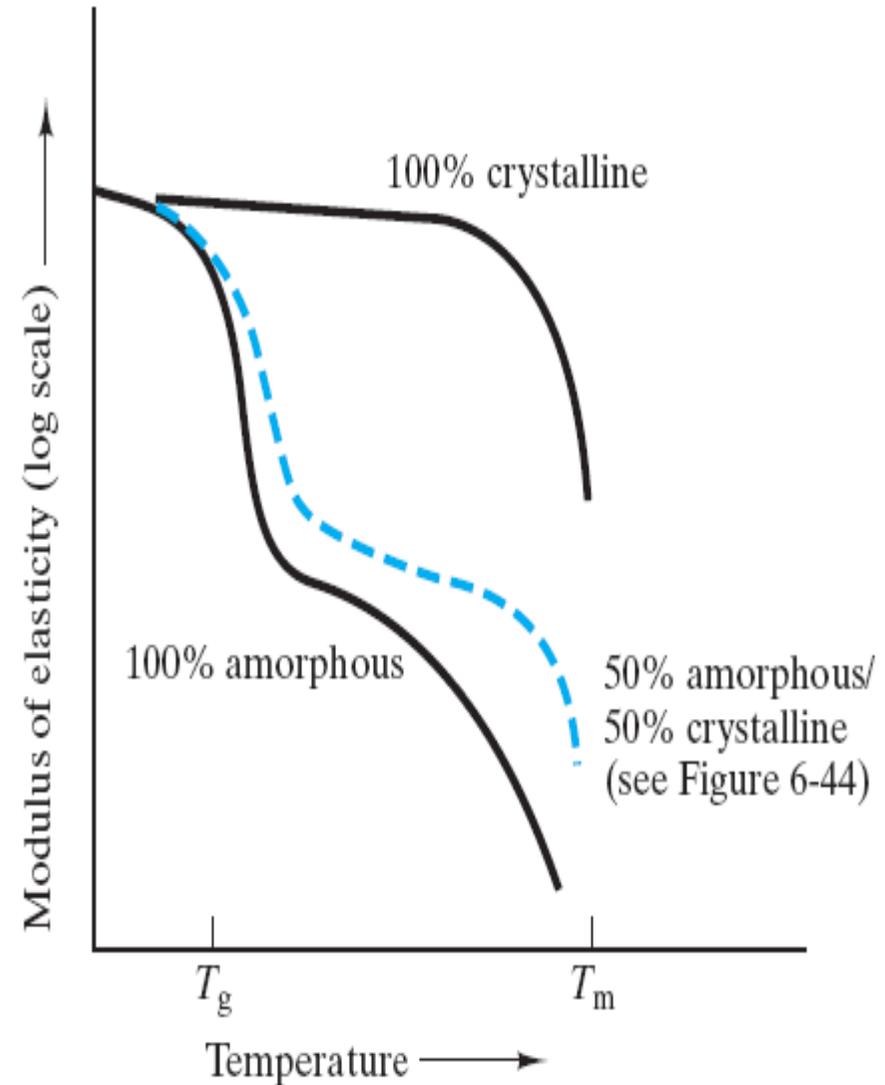
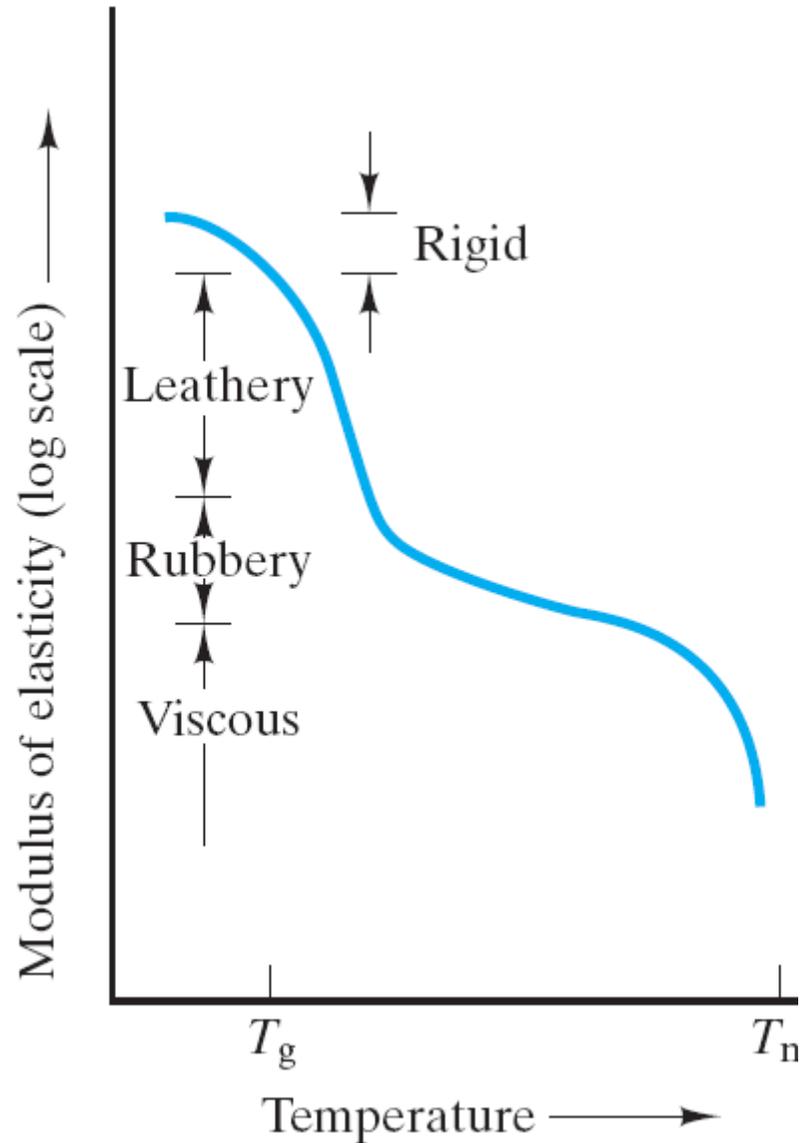
**branched** (occasional branches off longer chain)



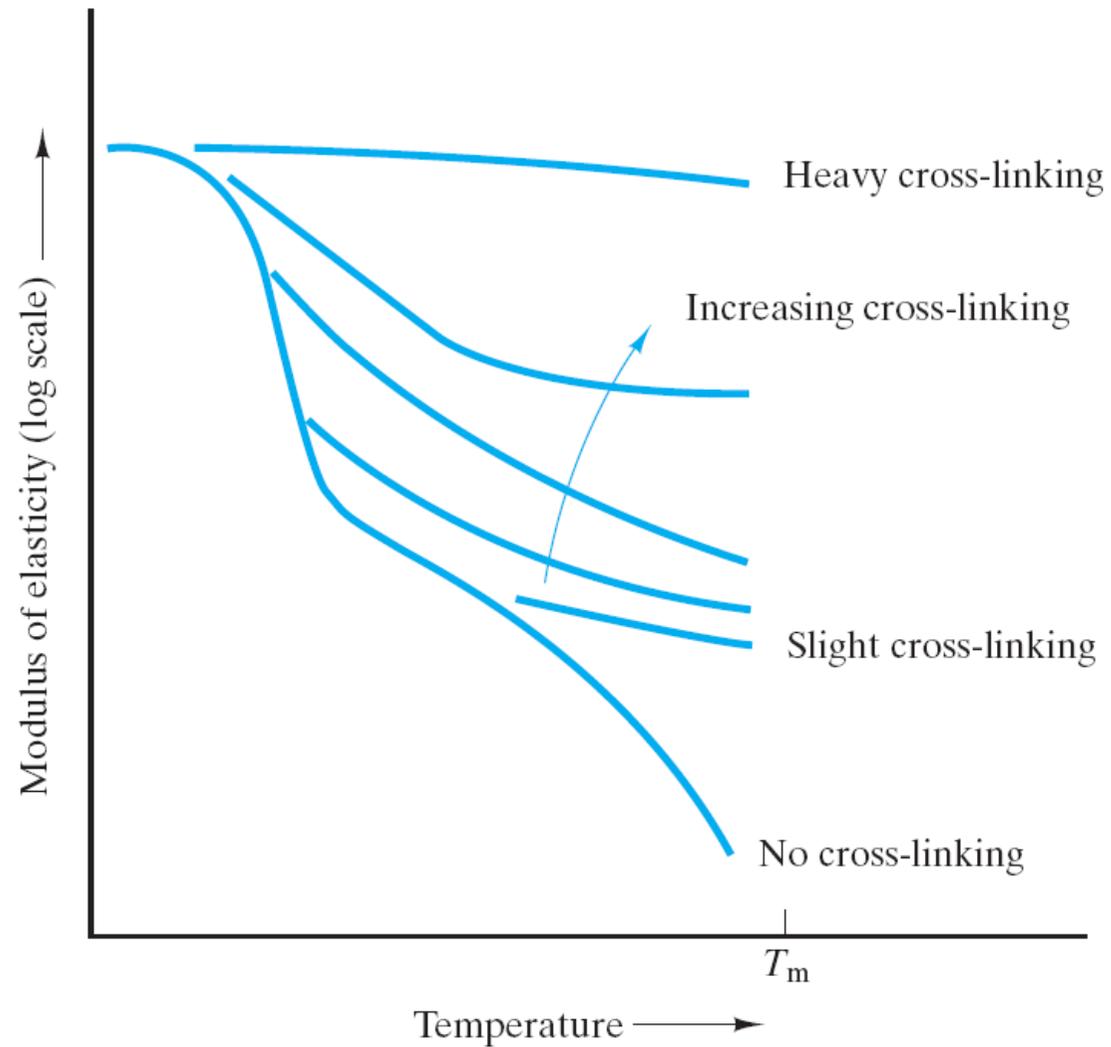
**networked** (many interconnected linear chains; one giant molecule)



# Elastizitätsmodul versus Temperatur



# Elastizitätsmodul versus Temperatur

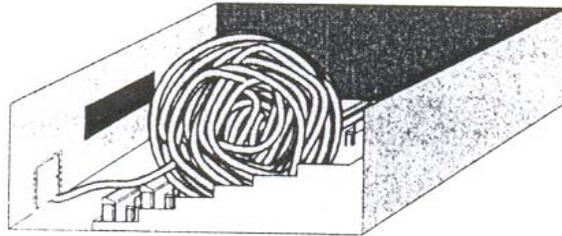


**Figure 6-47** Increased cross-linking of a thermoplastic polymer produces increased rigidity of the material.

# Etwas über Makromolekülgrößen !!

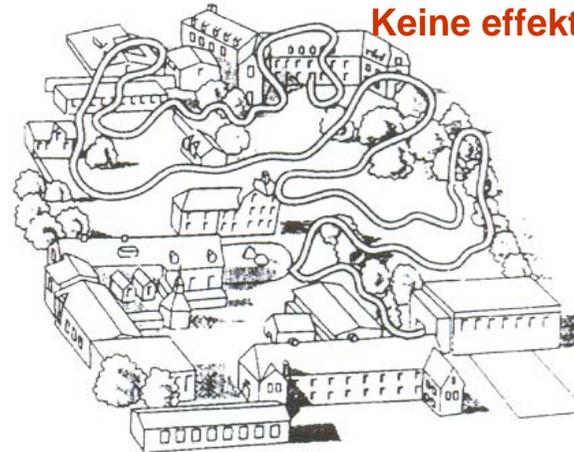
## Attraktive Wechselwirkung:

Die Kette passt in einen  
Hörsaal



## Keine effektive Wechselwirkung:

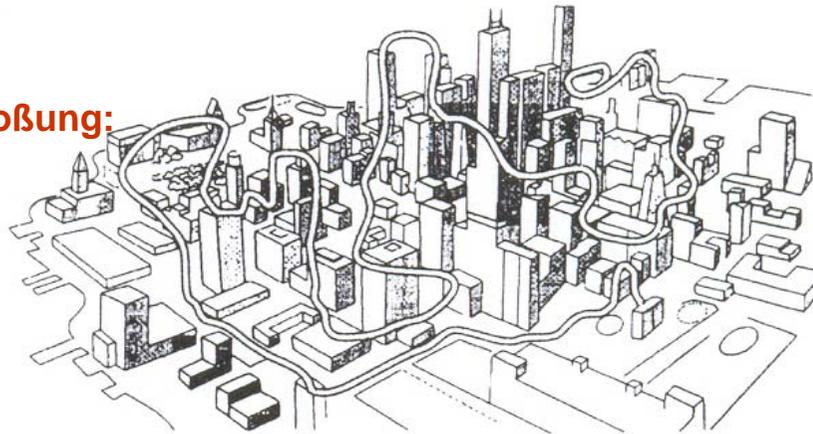
die Kette hat die  
Ausdehnung  
einer  
Universität



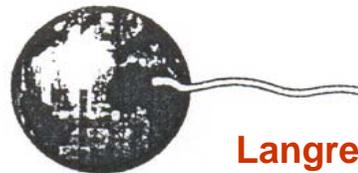
(c)

## Kurzreichweitige Abstoßung:

Die Kette hat die Größe  
einer Stadt.



(d)

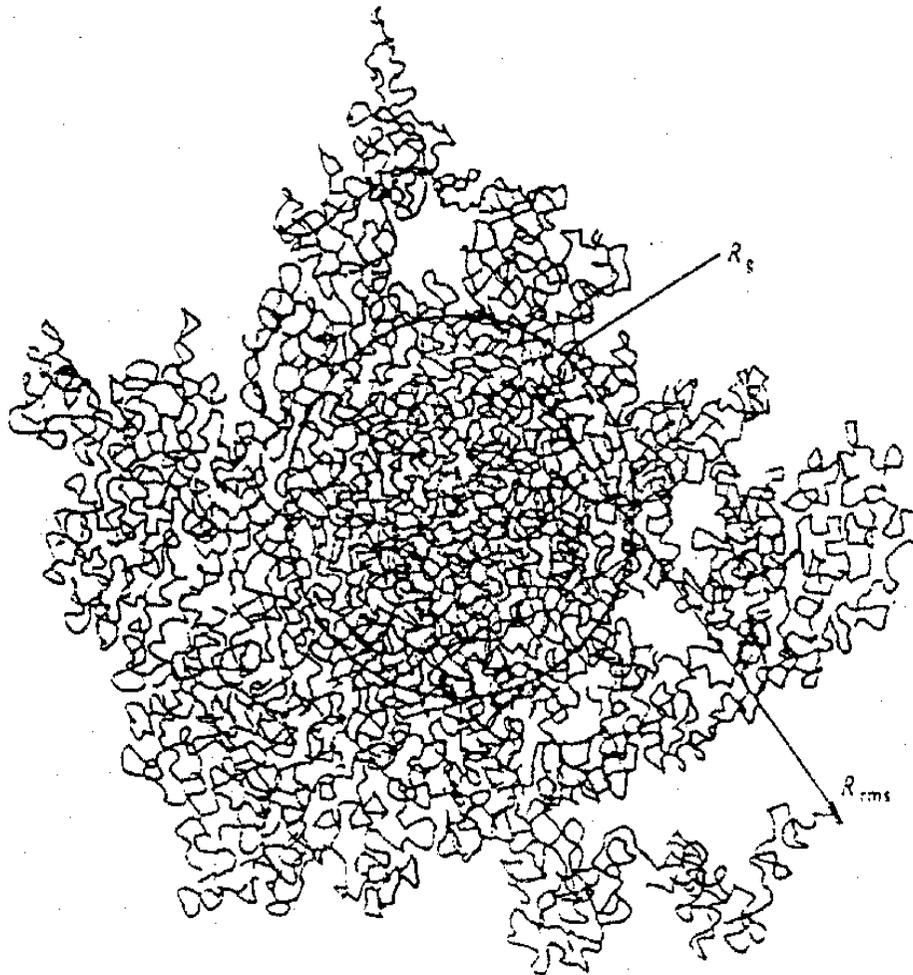


**Die Konformation eines  
Polymers wird durch  
seine Wechselwirkungen  
vorgegeben.**

Das wird hier illustriert mit  
einer Kette von  $10^{10}$   
Monomeren von je 1 cm,  
an Hand von vier  
Wechselwirkungstypen.

## Langreichweitige Wechselwirkung:

Die Kette reicht ein Viertel des Wegs bis zum Mond



Ein ungeordneter dreidimensionaler Knäuel. Dieses Beispiel besteht aus etwa 4000 Bausteinen. Der quadratisch gemittelte Abstand der Enden ( $R_{rms}$  und  $R_g$ ) sind eingezeichnet.



## Ordnung, Unordnung und der wahrscheinlichste Zustand

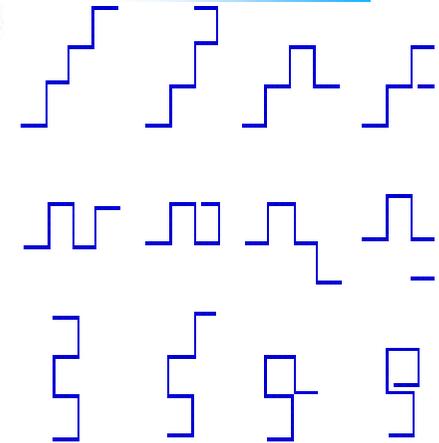


1 Möglichkeit



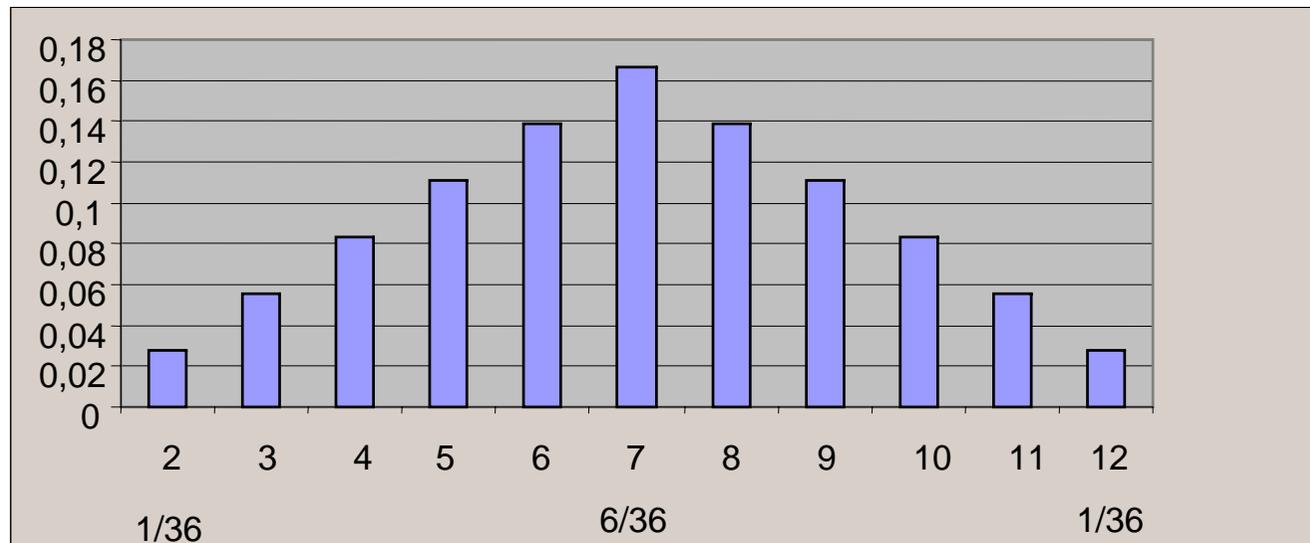
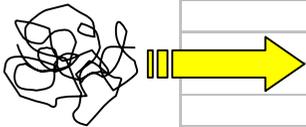
Viele Möglichkeiten

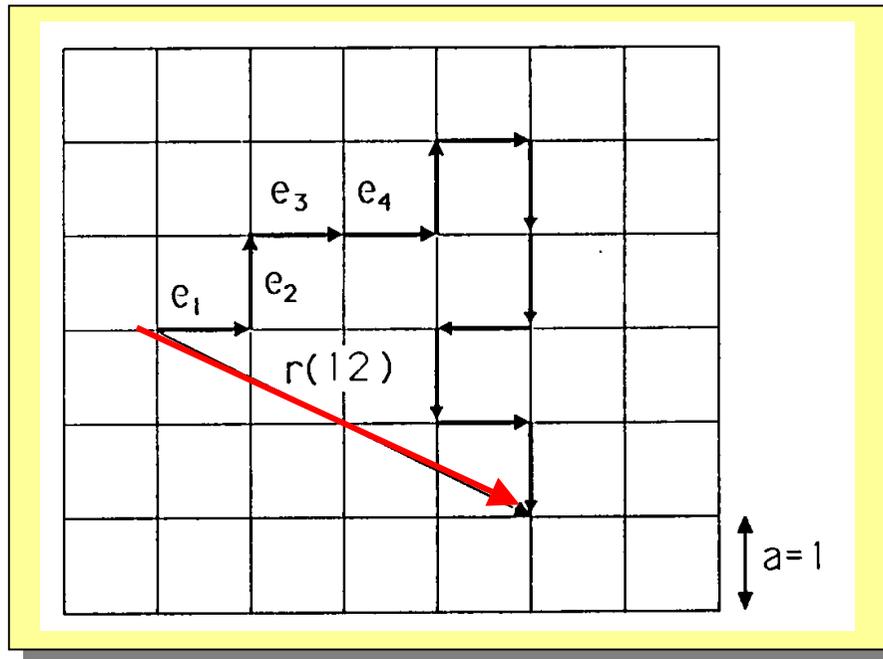
- Lange Ketten können viele Konformationen einnehmen.
- Es gibt viele Möglichkeiten, die Kette gekrümmt hinzulegen, aber nur eine sie zu strecken
- Abzählen: => Mass der Unordnung => Entropie



# Wieviele Polymerkonformationen? Würfelspiel!

Augensumme zweier idealer Würfel					
Augensumme	Augenpaare		günst. Fälle	Wahrscheinlichkeiten	
2	(1,1)		1	1/36	0,027778
3	(2,1),(1,2)		2	2/36	0,055556
4	(3,1),(2,2),(1,3)		3	3/36	0,083333
5	(4,1),(3,2),(2,3),(1,4)		4	4/36	0,111111
6	(5,1),(4,2),(3,3),(2,4),(1,5)		5	5/36	0,138889
7	(6,1),(5,2),(4,3),(3,4),(2,5),(1,6)		6	6/36	0,166667
8	(6,2),(5,3),(4,4),(3,5),(2,6)		5	5/36	0,138889
9	(6,3),(5,4),(4,5),(3,6)		4	4/36	0,111111
10	(6,4),(5,5),(4,6)		3	3/36	0,083333
11	(6,5),(5,6)		2	2/36	0,055556
12	(6,6)		1	1/36	0,027778
	Summen		36		1

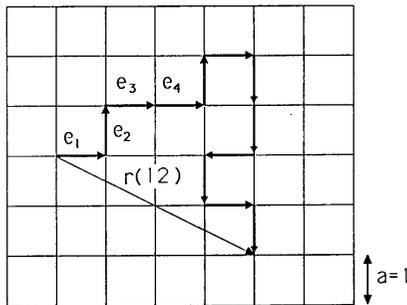




Beispiel eines Zufallsweges auf einem quadratischen Gitter. Die Gitterkonstante  $a = 1$  ist gleich der Schrittlänge des Weges.

Eine (orientierungslose) Ameise bewegen sich rein zufällig auf einem Gitter. Wird der Startpunkt zur Zeit  $t = 0$  bei  $\vec{r}(0) = 0$  gewählt, so gilt für den zurückgelegten  $\vec{r}(t)$  Weg nach  $t$  Zeitschritten:

$$\vec{r}(t) = a \sum_{\tau=1}^t \vec{e}_{\tau}$$



Der **im Mittel zurückgelegte Weg** berechnet sich aus der Wurzel der quadratischen Verschiebung  $\langle r^2(t) \rangle^{1/2}$ , wobei die Mittelwertbildung  $\langle \dots \rangle$  über viele (alle) **Zufallswege** erfolgt:

## Kettenkonformationen



$$\begin{aligned} \langle r^2(t) \rangle &= a^2 \sum_{\tau, \tau'=1}^t \langle \vec{e}_\tau \cdot \vec{e}_{\tau'} \rangle \\ &= a^2 t + \sum_{\tau \neq \tau'} \langle \vec{e}_\tau \cdot \vec{e}_{\tau'} \rangle \\ &= a^2 t \end{aligned}$$

- Das Produkt unterschiedlicher Einheitsvektoren  $\vec{e}_\tau$  verschwindet, da diese unkorreliert sind, d.h. zufällig in eine beliebige Richtung zeigen.

$$\langle \vec{e}_\tau \cdot \vec{e}_{\tau'} \rangle = \delta_{\tau, \tau'}$$

- Die Zufallswegstatistik hängt eng zusammen mit dem Fickschen Diffusionsgesetz für  $d$  Raumdimensionen (Brownsche Bewegung):

$$\langle r^2 \rangle = 2dDt$$

**Das Skalengesetz gilt unabhängig von der Dimension des Raumes für beliebige Gittertypen!**

## Fraktale Dimension und Selbstähnlichkeit von Zufallsweg-Trajektorien

Die **fraktale Dimension** beschreibt die Änderung der Länge (Masse)  $M$  des Zufallsweges mit dem geometrischen Abstand  $R \equiv \langle r^2 \rangle^{1/2}$

Da die Länge des Weges proportional zur Anzahl der Schritte ist ( $M \sim N$ ) ergibt sich mit

$$R^2 = \langle r^2 \rangle = a^2 N \quad d.h. \quad R = a \sqrt{N}$$

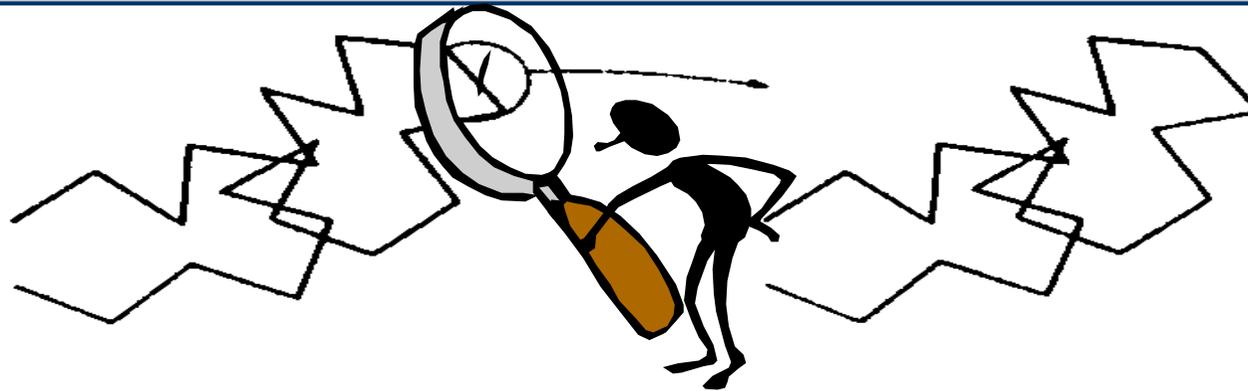
für Zufallswege in beliebig vielen Raumdimensionen für die

fraktale Dimension  $d_f$ :

$$M \sim R^2 \quad \Rightarrow \quad d_f = 2$$

Die Trajektorie eines Zufallsweges ist ein gutes Modell für die Knäuelbildung einer flexiblen, linearen Polymerkette, d.h. die fraktale Dimension eines Polymerknäuels ist  $d_f = 2$ . Dabei sind **Überschneidungen der Kette zugelassen.**





Vergrößerung eines Abschnitts des Zufallsweges führt auf einen neuen Zufallsweg (= Selbstähnlichkeit)

Reskalierung der Schrittlänge  $a$  lässt den mittleren quadratischen Endenabstand  $\langle r^2 \rangle$  unverändert, d.h. sei:

$$\langle r^2 \rangle = a^2 N ;$$

Wähle eine neue größere Schrittlänge  $a'$ , die aus  $N'$  Schritten der Länge  $a$  besteht.  
Für große  $N'$  gilt dann:

$$a'^2 = N' a^2$$
$$\Rightarrow \langle r'^2 \rangle = \frac{N}{N'} a'^2 = N a^2 = \langle r^2 \rangle$$

Der Zufallsweg ist ein zufälliges Fraktal, d.h. im statischen Sinn liegt Selbstähnlichkeit vor.

## E i n s c h u b

### Ziel:

Beschreibung scheinbar schlecht definierter, ungeordneter, irregulärer (chaotischer) Strukturen.

### Beispiele:

Küstenlinien, Gebirgszüge,  
Landschaften, **Straßen**  
dendritische Strukturen (Blitze)  
Wolken  
Cluster  
**Polymere**  
Ruße

Brown'sche Bewegungen  
kritische Fluktuation bei Phasenübergängen  
Proteine  
Bruchflächen  
Baum der Arterien des Menschen  
Säugetiergehirne  
chaotische dynamische Systeme

### Schlüssel zur erfolgreichen Beschreibung:

→ innere Symmetrie (= **Selbstähnlichkeit**)

Selbstähnliche Strukturen beinhalten fraktale Dimensionen als versteckte Symmetrie der Unregelmäßigkeiten.

**Frage:** Wie lang ist die Küste von England ?

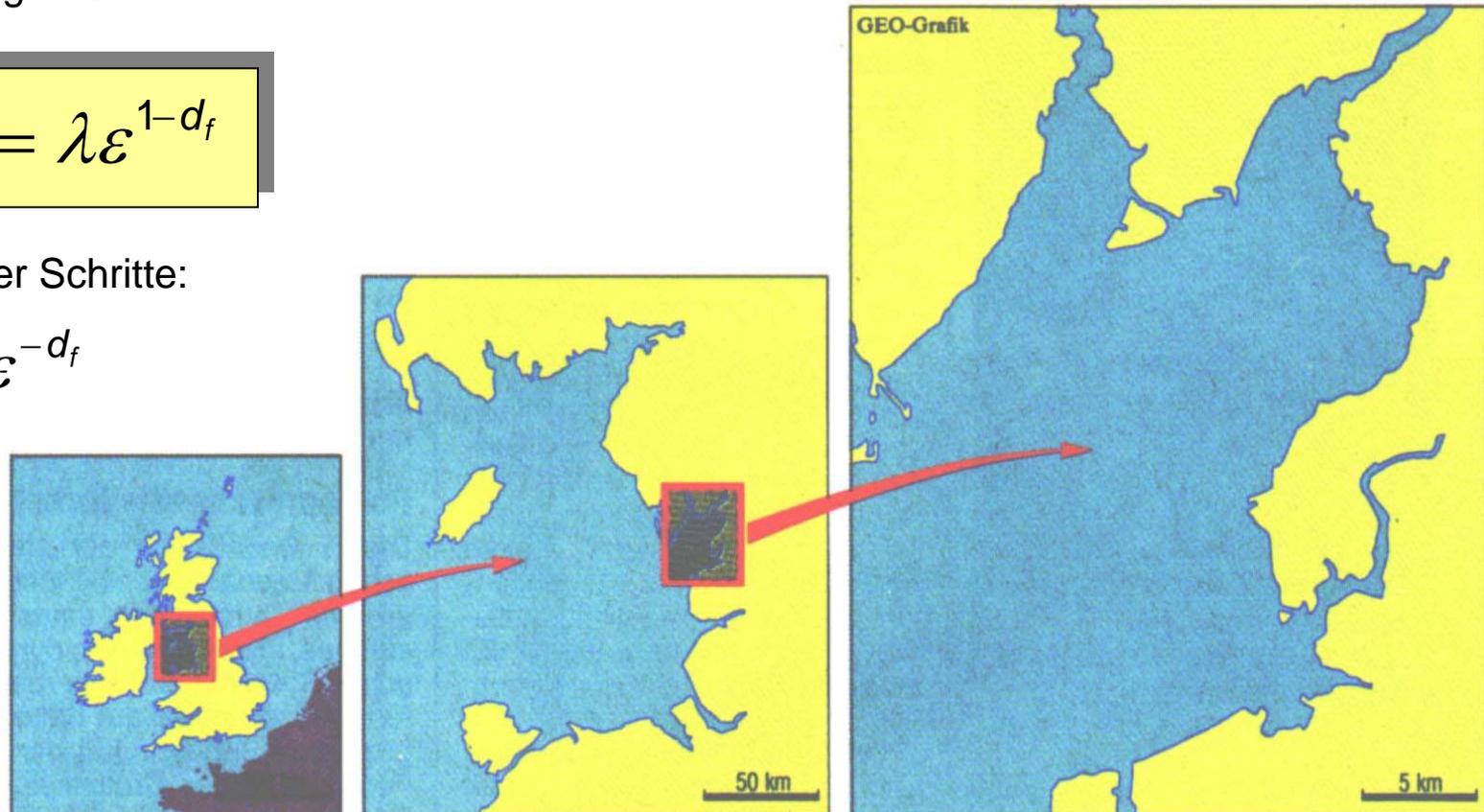
**Antwort:** Im Prinzip unendlich (  $\varepsilon \rightarrow 0 \Rightarrow l \rightarrow \infty$  )

Messung der Küstlänge  $l$  durch Polygonzug der  
Schrittlänge  $\varepsilon$  :

$$l(\varepsilon) = \lambda \varepsilon^{1-d_f}$$

Anzahl der Schritte:

$$N \sim \varepsilon^{-d_f}$$



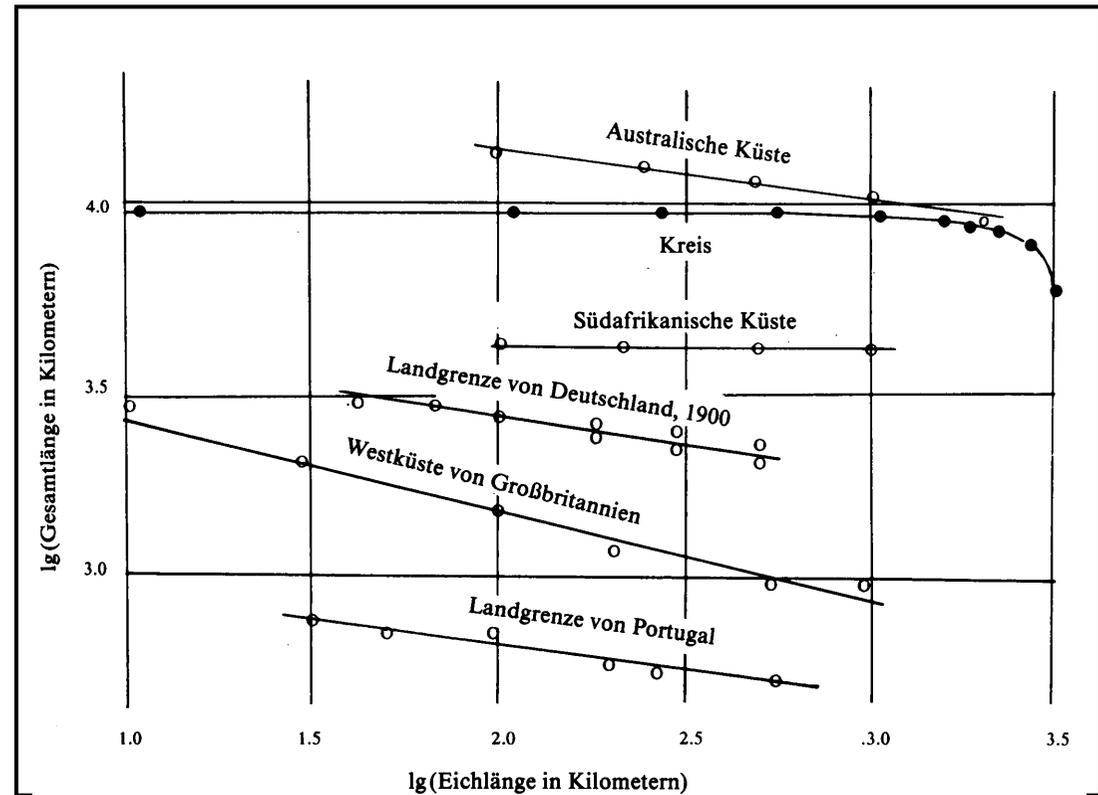
## Verschiedene Meßmethoden:

- Stechzirkel auf Landkarte mit variabler Schrittlänge
- Abschreiten der Küstenlinie bei variablem Abstand zur Wasserlinie
- Überdeckung der Küstenlinie mit Kreisen oder Quadraten variabler Größe

$$\ell(\varepsilon) = \lambda \varepsilon^{1-d_f}$$

## Fazit:

- Für  $\varepsilon \rightarrow 0$  geht  $\ell \rightarrow \infty$
- Angabe von  $\ell$  nur sinnvoll, wenn  $\varepsilon$  gegeben ist.
- Die Unregelmäßigkeit der Küstenlinien ist durch die Steigung  $1-d_f$  charakterisiert
- Für den Kreis gilt:  $1-d_f=0$  ( $d_f=1$ ) falls  $\varepsilon \ll \text{Radius}$



Empirische Daten von Richardson (1961) über die Abhängigkeit der Küstenlänge von der Länge des Eichmaßstabs

Die Dimension  $d$  eines Systems charakterisiert die Änderung der Masse  $M$  mit der linearen Ausdehnung  $L$  des Systems:

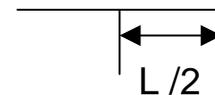
$$M(L) = AL^d$$

Dies ist die Lösung der Funktionalgleichung:

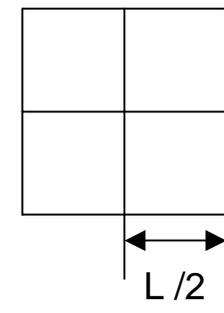
$$M(bL) = b^d M(L)$$

(Ein kleiner Teil des Systems der linearen Größe  $bL$  ( $b < 1$ ) hat eine um den Faktor  $b^d$  kleinere Masse  $M(bL)$  als  $M(L)$ .)

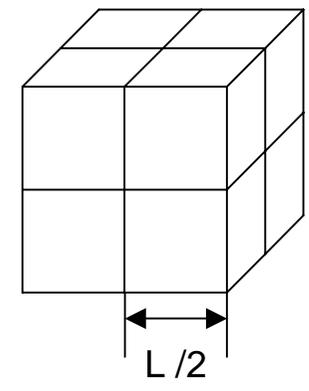
Beispiele regulärer  
(Euklidischer) Systeme  
mit  $d = 1$ ,  $d = 2$  und  $d = 3$ .



$M(L/2) = \frac{1}{2} M(L)$   
 $d = 1$



$M(L/2) = \frac{1}{4} M(L)$   
 $d = 2$



$M(L/2) = \frac{1}{8} M(L)$   
 $d = 3$

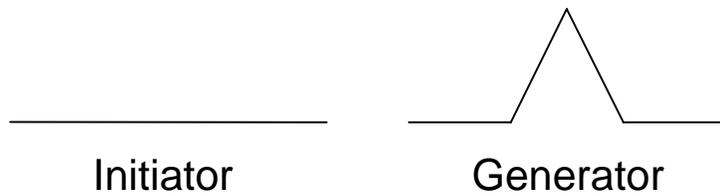
Definition der fraktalen Dimension  $d_f$ :

$$M(bL) = b^{d_f} M(L)$$

oder

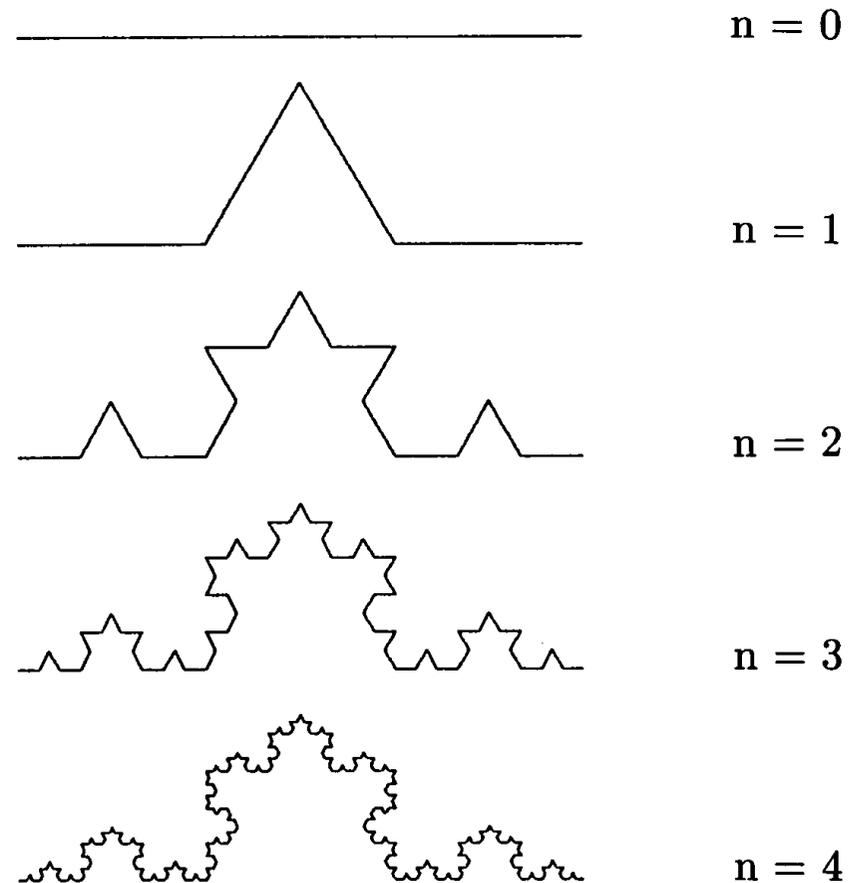
$$M(L) = AL^{d_f}$$

Beispiel: Die Koch-Kurve



$$M\left(\frac{1}{3}L\right) = \frac{1}{4}M(L)$$

Verallgemeinerung der Euklidschen Dimension  $d$  auf nicht ganze Zahlen, sodass  $1/4 = (1/3)^d$  erfüllt ist.

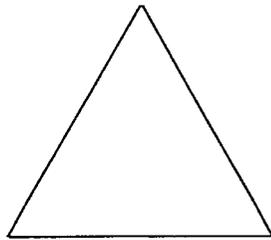


Erste Iterationen der Koch-Kurve (n=0 bis 4).

Fraktale Dimension der Koch-Kurve:

$$d_f = \log 4 / \log 3 = 1.26$$

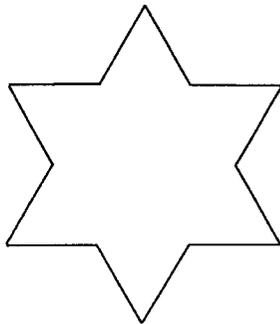
## Beispiel: Die Koch'sche Schneeflocke



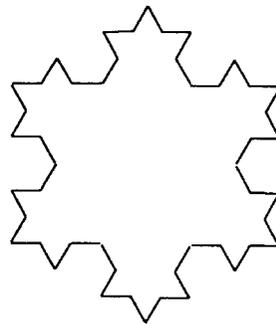
Initiator



Generator



1. Iteration



2. Iteration

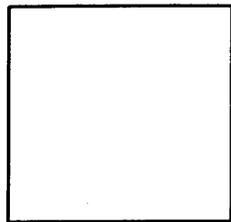
Durch Wahl eines anderen Initiators lassen sich Varianten der Koch Kurve erzeugen. Die fraktale Dimension  $d_f$  bleibt dabei konstant, da sie nur vom Generator abhängt.

$$M\left(\frac{1}{3}L\right) = \frac{1}{4}M(L)$$

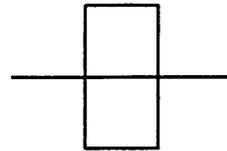
$$\Rightarrow d_f = \frac{\log 4}{\log 3} = 1,26$$

Erste Iterationen der Koch'schen Schneeflocke.

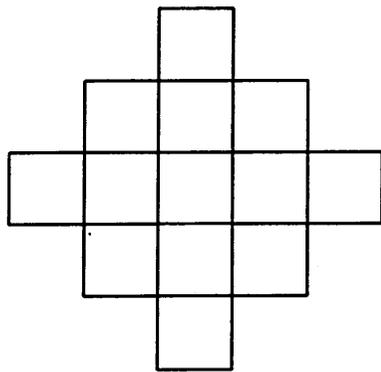
## Beispiel: Die Peano - Kurve



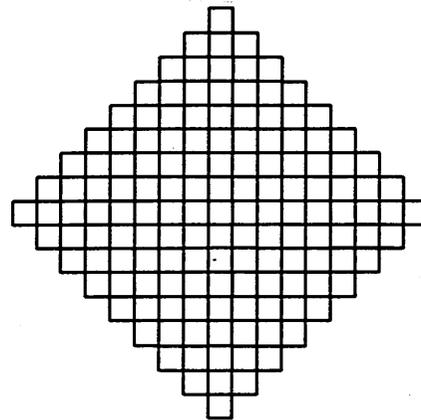
Initiator



Generator



1. Iteration



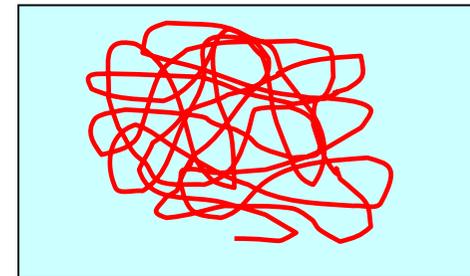
2. Iteration

Erste Iterationen der Peano - Kurve.

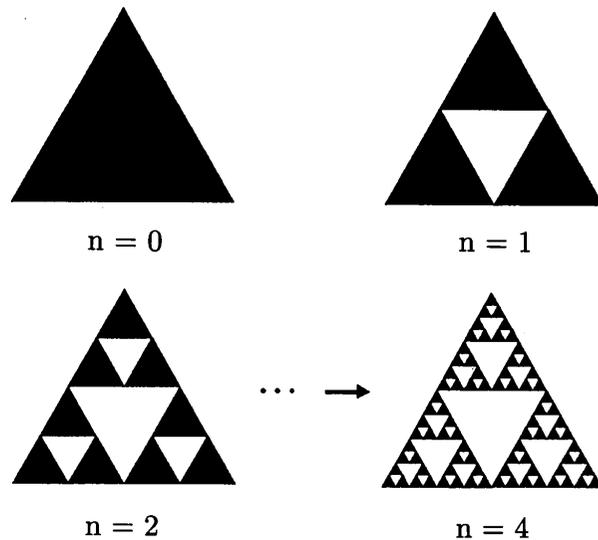
$$M\left(\frac{1}{3}L\right) = \frac{1}{9}M(L)$$

$$\Rightarrow d_f = \frac{\log 9}{\log 3} = \frac{\log 3^2}{\log 3} = 2$$

Fraktale Kurven mit  $d_f = 2$  füllen die gesamte Ebene dicht aus. Für  $d_f = 2$  sind **Selbstüberschneidungen** nötig, z. B. random walk (**Polymer**):



## Beispiel 1: Das Sierpinski - Gitter



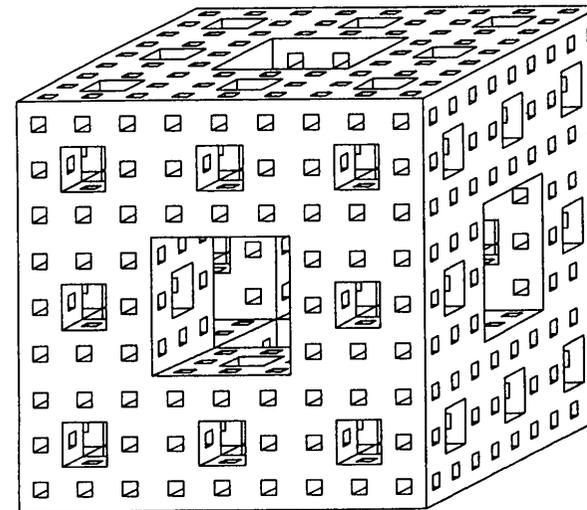
### Iterationsvorschrift:

Teile ein Dreieck in vier kleiner Dreiecke und entferne das mittlere Dreieck.

$$M\left(\frac{1}{2}L\right) = \frac{1}{3}M(L)$$

$$\Rightarrow d_f = \frac{\log 3}{\log 2} = 1,59$$

## Beispiel 2: Die Sierpinski - Spange



### Iterationsvorschrift:

Teile einen Würfel in  $3 \times 3 \times 3 = 27$  kleinere Würfel und entferne den mittleren Würfel und seine 6 nächsten Nachbarn.

$$M\left(\frac{1}{3}L\right) = \frac{1}{20}M(L)$$

$$\Rightarrow d_f = \frac{\log 20}{\log 3} = 2,73$$

## Beispiel: Die triadische Cantor - Menge



Erste Iterationen der triadische Cantor - Menge  
 (Nicht zusammenhängende Menge mit  $d_T = 0$ )

- Andere Beispiele von Cantor - Mengen:

- Attraktoren der logistischen Abbildung:

$$x_{n+1} = r x_n (1 - x_n) \Rightarrow \text{Chaos für } r \geq 3,5699456... \text{ (seltsamer Attraktor: } d_f \approx 0,54)$$

- einfach zusammenhängende Bindungen des Mandelbrot - Given Fraktals

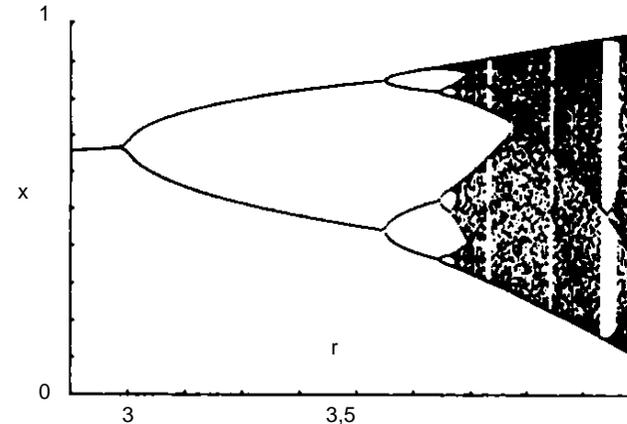
$$(d_f = \log 2 / \log 3 \approx 0,63)$$

Iterationsvorschrift:

Teile einen Strecke in 3 gleiche  
 Intervalle und entferne das Mittlere.

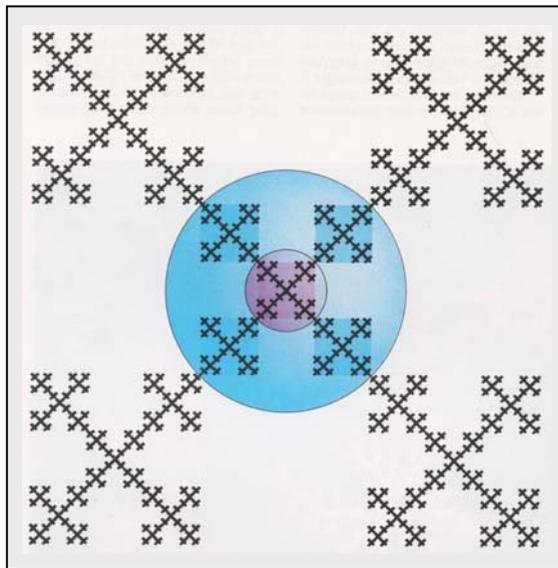
$$M\left(\frac{1}{3}L\right) = \frac{1}{2} M(L)$$

$$\Rightarrow d_f = \frac{\log 2}{\log 3} \approx 0,63$$



Die typische Form oder Verzweigungsstruktur von Fraktalen wiederholt sich bei **isotroper** Vergrößerung (Verkleinerung) auf allen Längenskalen.

## Deterministische Fraktale



Vicsek Fraktal

$$d_f = \frac{\log 5}{\log 3} = 1,46$$

## Zufällige Fraktale



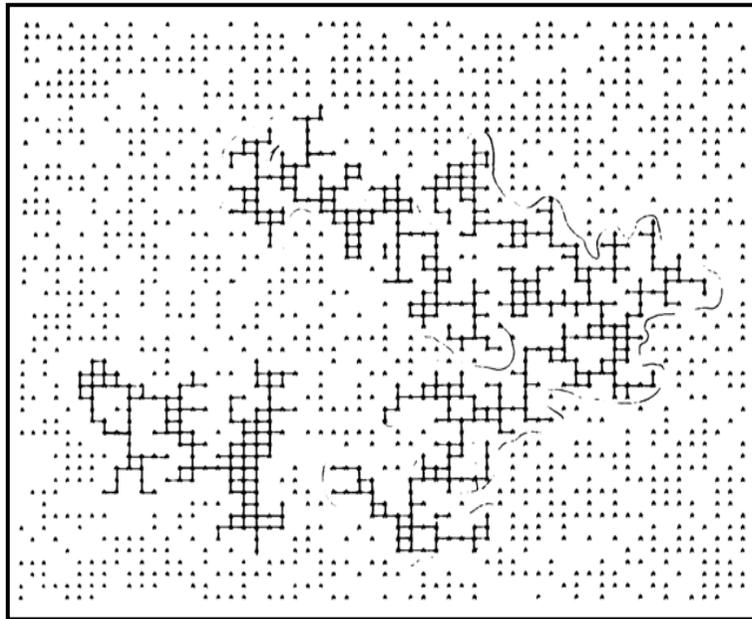
Elektroabscheidung von Kupfer

$$d_f = ?$$

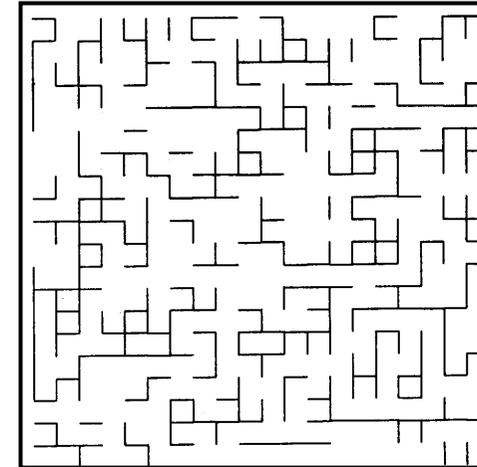
Selbstähnlichkeit oder Skaleninvarianz ist in der Regel nur innerhalb zweier Cut - off - Längen erfüllt ( $L_{min} < L < L_{max}$ ).  $L_{min}$  ist z. B. durch die Zahl der Iterationen oder die atomare Auflösung gegeben.  $L_{max}$  ist die Gesamtgröße des Objektes.

1. Gitterpunkt - Perkolation (site percolation)
2. Bindungs - Perkolation (bond percolation)
3. Kontinuum - Perkolation

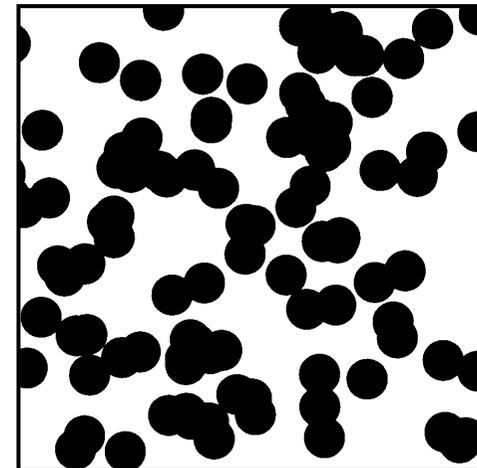
Die kritische Konzentration  $p_c$  hängt vom Perkolationstyp, dem Gittertyp und der Dimension des Einbettungsraumes ab. Die kritischen Exponenten hängen nur von der Dimension des Einbettungsraumes ab.



**Gitterpunkt - Perkolation** auf einem quadratischen Gitter für  $p < p_c$ . Die beiden größten Cluster sind markiert.

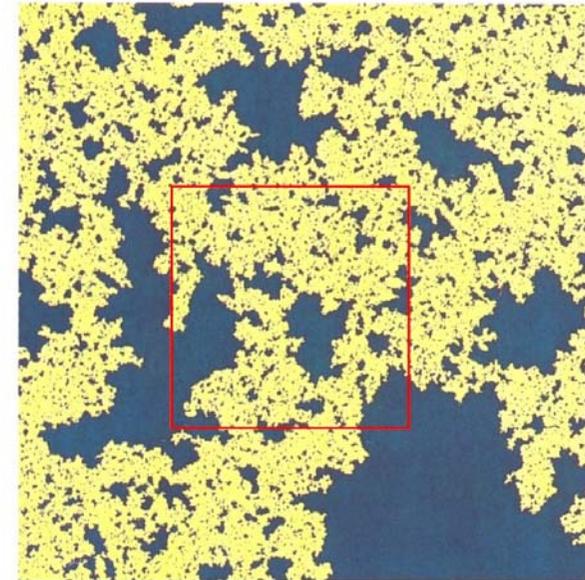
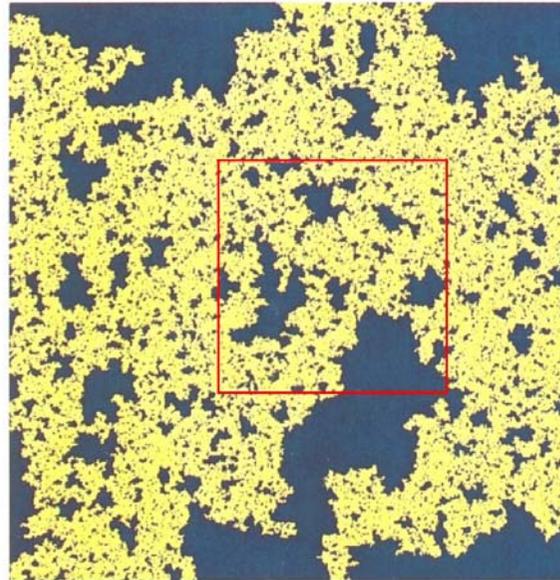


**Bindungs - Perkolation** auf einem quadratischen Gitter für  $p < p_c$ .

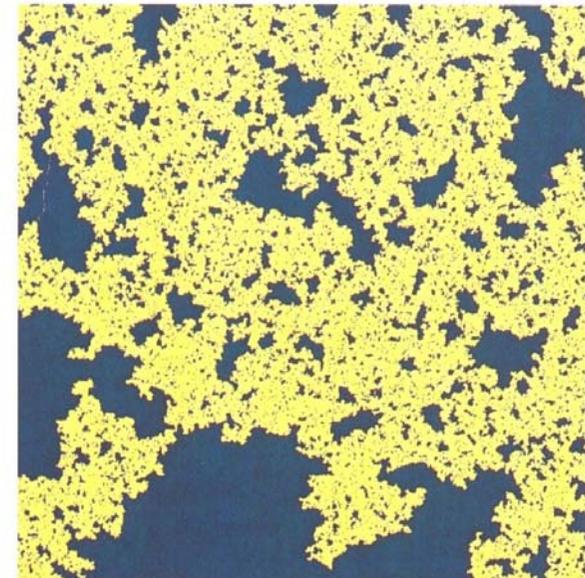
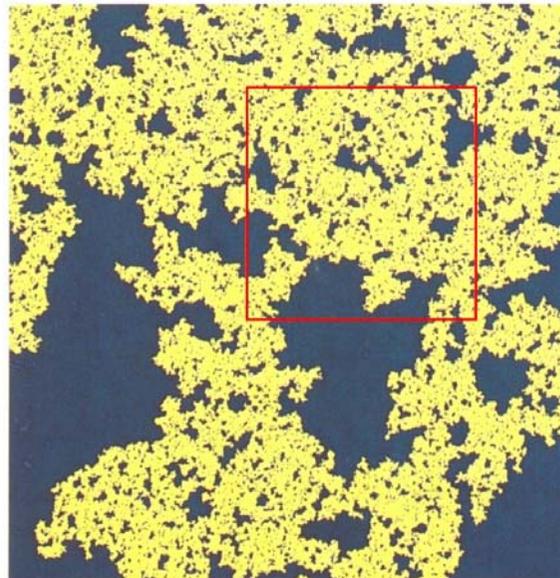


**Kontinuum - Perkolation**  
(Schweizer Käse Modell)

Für  $p = p_c$  besteht der Perkulationscluster (unendlicher Cluster) aus einem einzigen fraktalen Gebilde „unendlicher“ Größe, welches das gesamte Gitter durchdringt .



Sukzessive Vergrößerung des Bereichs im roten Rahmen von links oben nach rechts unten dokumentiert Selbstähnlichkeit im statistischen Sinne.



Komplexe Version der logistischen  
Abbildung:

$$z_{n+1} = z_n^2 + c \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

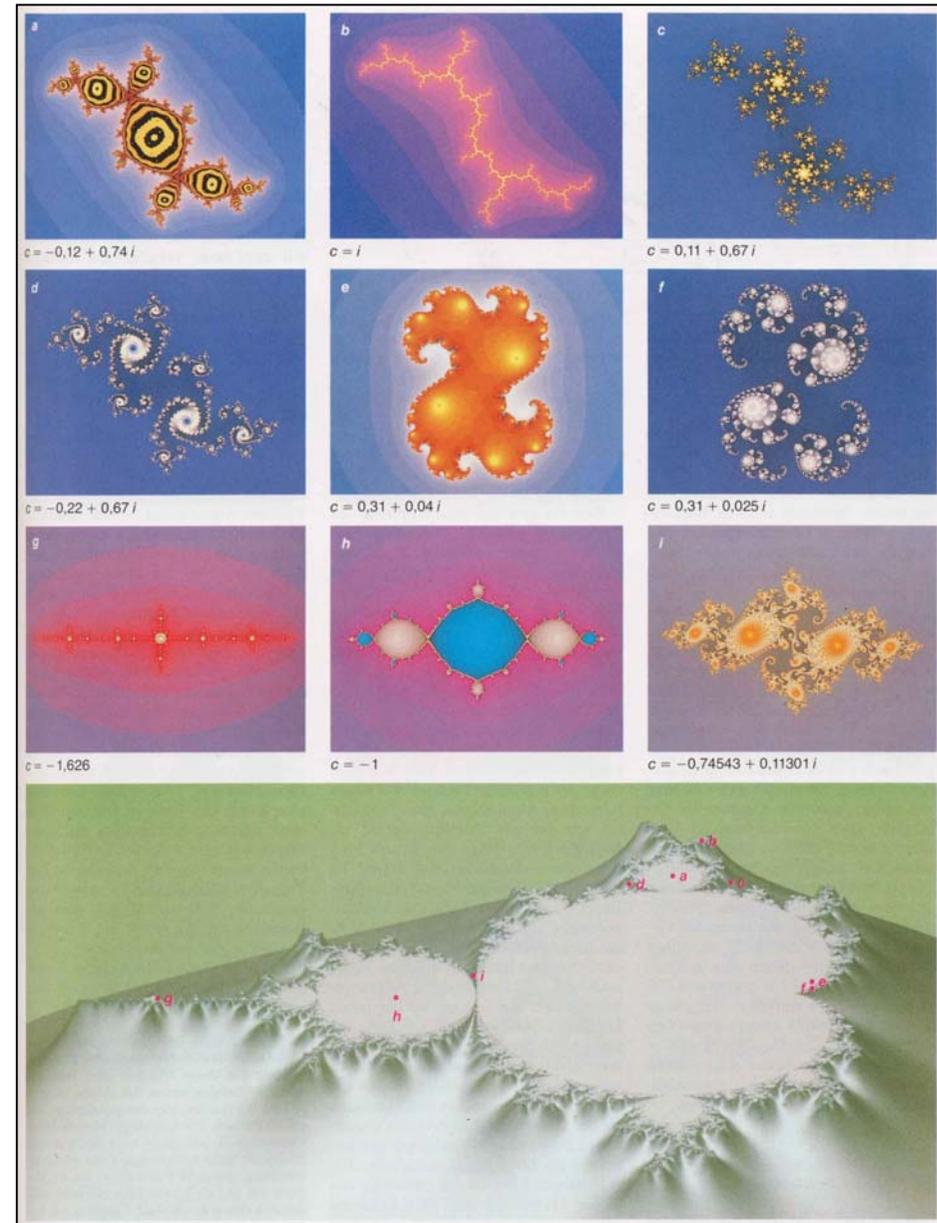
Die **Julia - Menge** zu jedem gegebenen Wert des Kontrollparameters  $c$  ist definiert als (unendlich dünne) Randmenge von Startwerten  $z_0$ , wo die Beschränkung der Folge verloren geht, d.h. Konvergenz in Divergenz umschlägt.

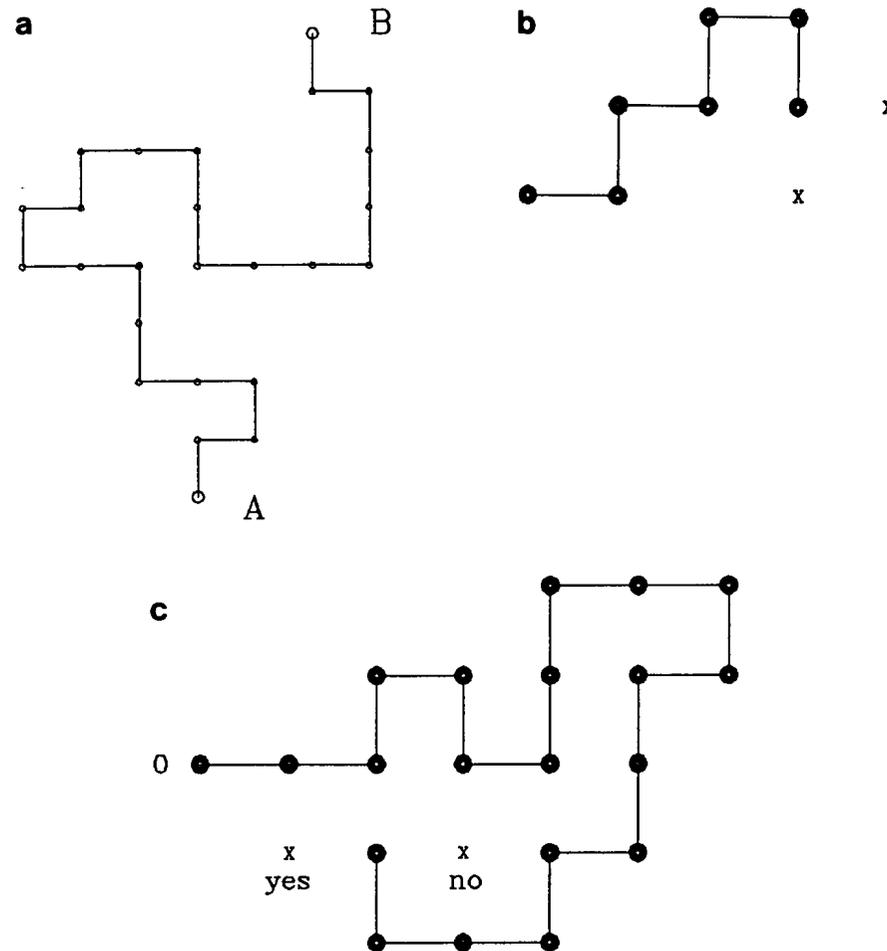
Einfach Beispiel:  $c = 0$

$$|z_0| < 1 \Rightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} z_n = 0$$

$$|z_0| > 1 \Rightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} z_n = \infty$$

Julia Menge:  $|z_0| = 1$





Die Kreuze unter **(b)** kennzeichnen verfügbare Gitterpunkte, **(c)** skizziert die Problematik des Einfangens, das vor allem bei  $d = 2$  auftritt.

Selbstvermeidende (nicht-überschneidende) Zufallswege sind weniger kompakt als überschneidende Zufallswege, da die Trajektorien schneller auseinanderlaufen. Der **Endenabstand**  $R$  skaliert mit der Länge  $M$  bzw. Anzahl  $N$  der Schritte (P. J. Flory 1944):

$$M \sim N \sim R^{d_f}$$

mit  $d_f = (d+2)/3$  für Raumdimensionen  $d \leq 4$  und  
 $d_f = 2$  für Raumdimensionen  $d > 4$

  $d_f = 5/3$  in  $d = 3$

 bei vier oder mehr Dimensionen wird die fraktale Dimension gleich der von überschneidenden Zufallswegen (d. h. Überschneidungen lassen sich rein statistisch vernachlässigen).

Selbstvermeidende Zufallswege werden als Modell für Polymerketten in einem guten Lösungsmittel verwendet. Die Ketten sind dann solvatisiert, was deren Querschnitt vergrößert und Selbstüberschneidungen verhindert.

## Modell einer linearen Polymerkette in gutem Lösungsmittel

- Freie Energie im  $d$ -dimensionalen Raum:

$$F = \frac{R^2}{R_0^2} + \nu(T) \frac{N^2}{R^d}$$

- Der erste Term  $\sim R^2$  beschreibt die elastische Energie ( $1/R_0^2$  : Federkonstante)

- Der zweite Term  $\sim R^{-d}$  beschreibt die Wechselwirkungsenergie

Monomerkonzentration im Einheitsvolumen =  $N/R^d \Rightarrow$

Anzahl der Paarwechselwirkungen =  $(N/R^d)^2 \Rightarrow$

Gesamte Wechselwirkungsenergie =  $R^d \nu(T) (N/R^d)^2$

- Der Kettenradius  $R$  folgt durch Minimierung von  $F$  ( $\partial F/\partial R = 0$ ).  
Mit  $N \sim R_0^2$  ergibt sich die fraktale Dimension wie folgt:

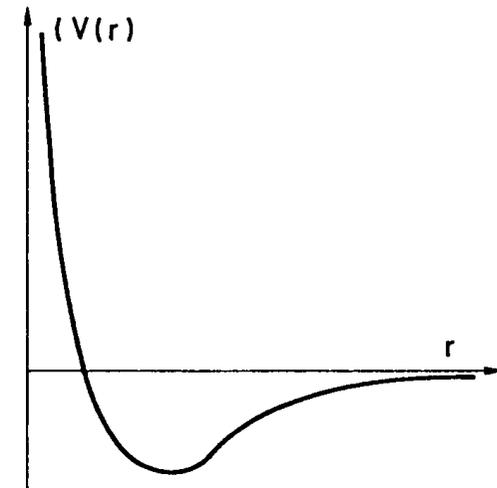
$$N \sim R^{d_f} \quad \text{mit} \quad d_f = \frac{d+2}{3} \quad \text{für} \quad d \leq 4$$

- Für  $d \geq 4$  (obere kritische Dimension) wird die Kette ideal ( $d_f = 2$ ),  
d. h. die Wechselwirkung wird vernachlässigbar klein.

- Der Parameter  $\nu(T)$  beschreibt das ausgeschlossene Volumen:

$$\nu(T) = \int [1 - e^{-V(R)/kT}] dr$$

gutes Lösungsmittel	:	$\nu(T) > 0$
schlechtes Lösungsmittel	:	$\nu(T) < 0$
Flory's $\theta$ -Temperatur	:	$\nu(\theta) = 0$



Wechselwirkungspotenzial  $V(R)$   
zwischen benachbarten Monomeren  
(Lenard - Jones)

$$R = aN^{\nu} \quad \nu = \frac{1}{d_f}$$
$$R \sim \frac{1}{\tau^{\nu}} \quad \tau \equiv \frac{1}{N} \quad \text{und} \quad \tau \rightarrow 0$$

**Universelles** Verhalten von langen Makromolekülen

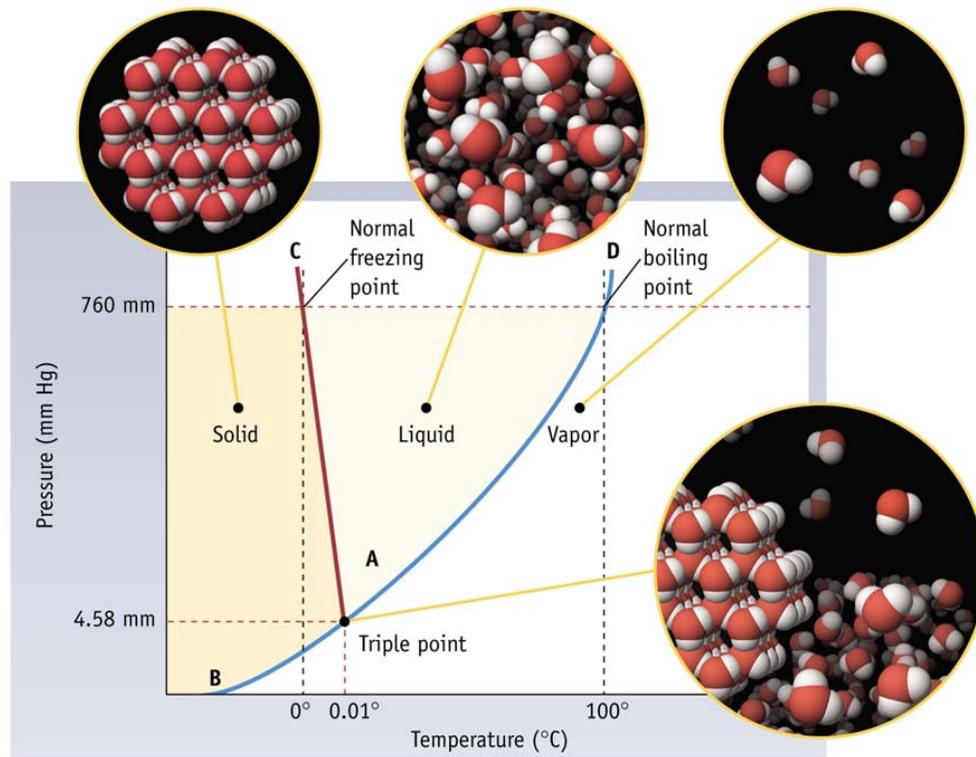
$$N \rightarrow \infty; \quad \tau \rightarrow 0$$



Viele Konformationen!  
Große Fluktuationen!

**Konkrete (molekulare / chemische) Details (in  $a$ ) unwichtig!**

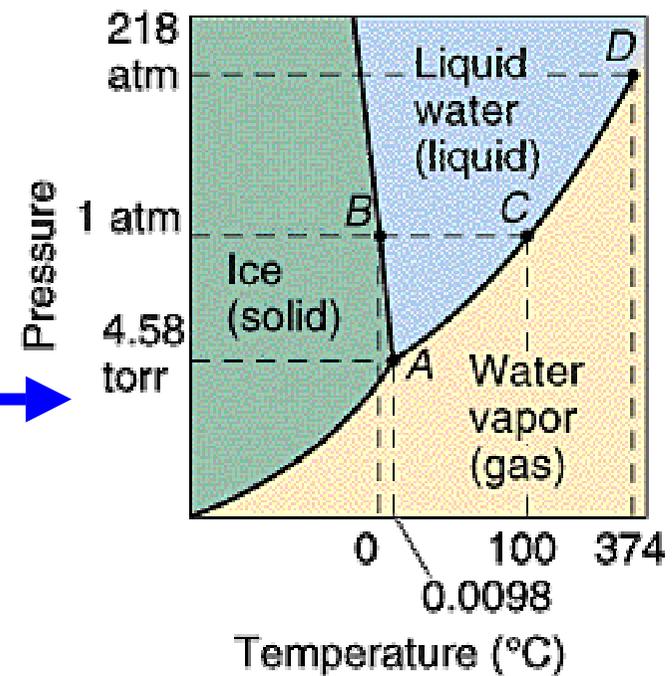
# Phasendiagramm des Wassers



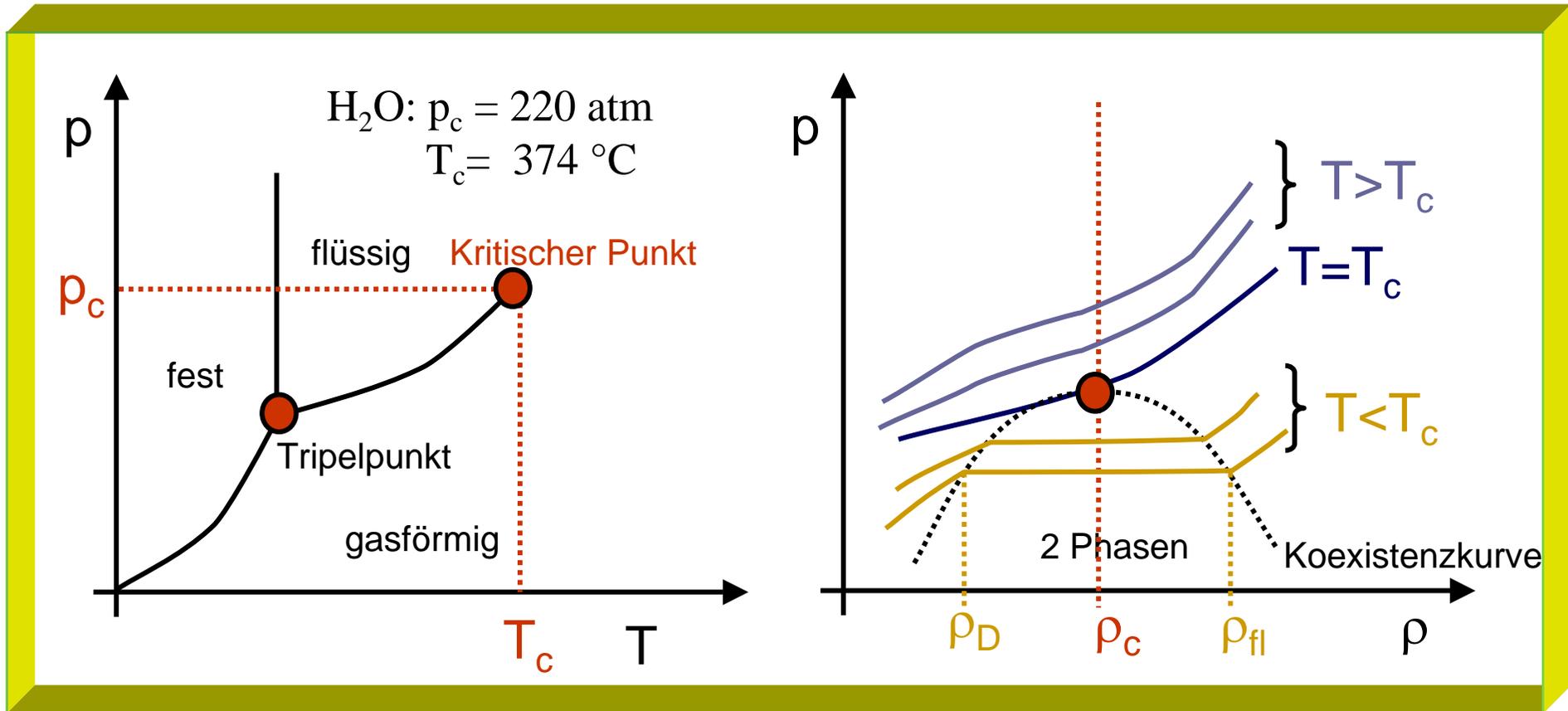
**Tripelpunkt**



**kritischer Punkt**



# Phasendiagramm des Wassers



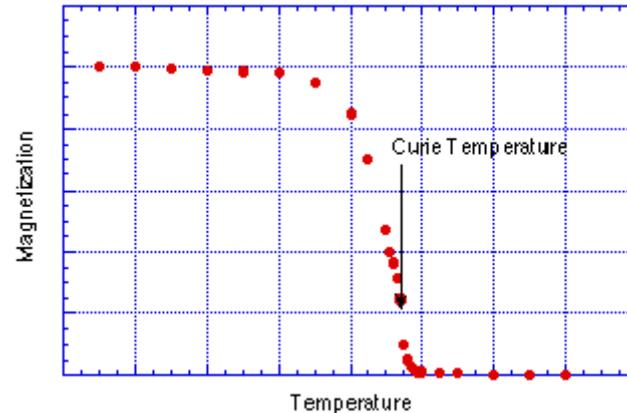
**Isotherme Kompressibilität**

$$\beta_T = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial p} \right)_{T,N} = -\frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{T,N}$$

divergiert am kritischen Punkt

# Magnetisierung eines Ferromagneten

If we measure the magnetization of a magnetic material as a function of temperature the plot looks something like this:

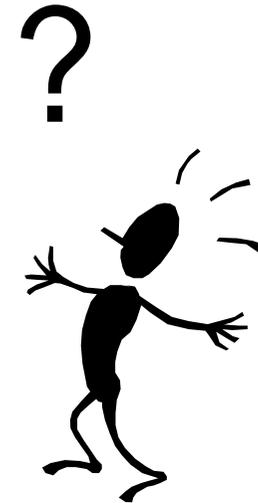


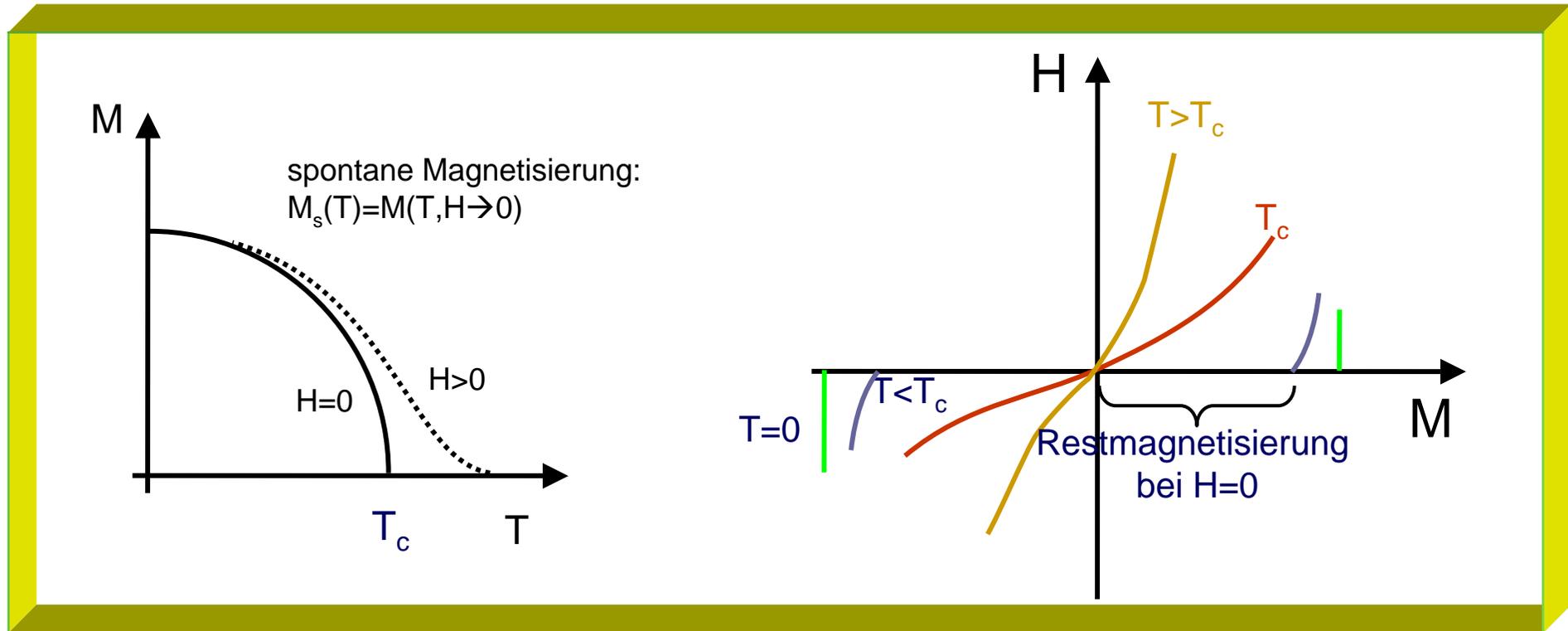
Now we focus on the area just near the transition, say within 1% of the critical temperature. If we try to fit the  $M$  vs  $T$  data, we find that the best fit is to a power law:  $M = M_0 t^{0.37}$  where  $t = T - T_c / T_c$  is called the reduced temperature. What is remarkable?

As nearly as could be measured, the exponent is nearly the same for iron, nickel, cobalt, gadolinium... all of the ferromagnetic elements.

Now the amazing part begins. If we plot the order parameter for our other transition,  $\rho(\text{liquid}) - \rho(\text{gas})$ , vs  $T$  we find the same thing. The difference goes to zero at the boiling point according to a power law in the reduced temperature. The really amazing thing is

**the exponent is the same, about 0.37**





**Isotherme magnetische Suszeptibilität:**

$$\chi_T = \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_T \longrightarrow \infty \quad \text{bei } H=0$$

$$\chi_T^{-1} = 0 \quad \text{bei } H=0 \text{ am kritischen Punkt}$$

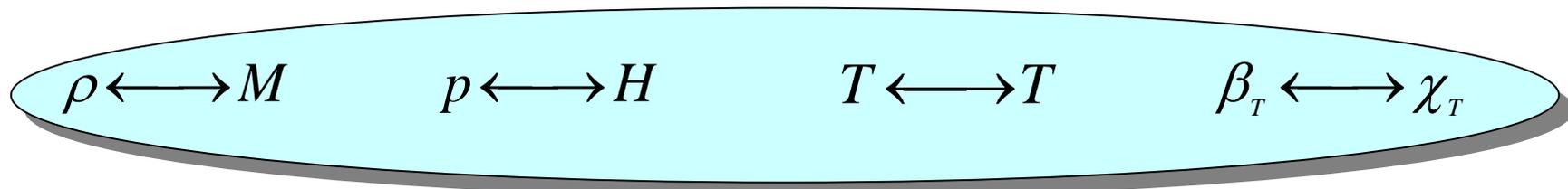
Bei gegebenem T erfolgen PÜ durch Änderung „äußerer Felder“ p bzw. H

1. Zwei verschiedene Phasen koexistieren nur unterhalb von  $T_c$ .  
Die Koexistenz zweier Phasen erfordert, daß
  - $p = p_{\text{Sättigung}}$
  - $H = 0$
2.  $T < T_c$ :  $\rho$  bzw.  $M$  ändern sich sprunghaft → **diskontinuierlicher Phasenübergang**  
 $T = T_c$ :  $\rho$  bzw.  $M$  ändern sich stetig  
 aber  $\beta_c, \chi_c$  divergieren → **kontinuierlicher Phasenübergang**

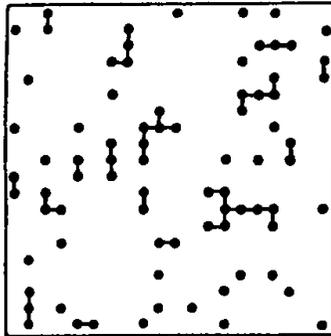
## Ordnungsparameter:

$$\Delta\rho \equiv \rho_{Fl} - \rho_D, \quad \Delta\rho \sim (-\tau)^\beta, \quad \tau = \frac{T - T_c}{T_c}, \quad \beta_{MF} = 0.5$$

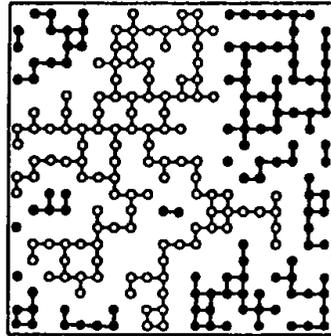
$$M \sim (-\tau)^\beta$$



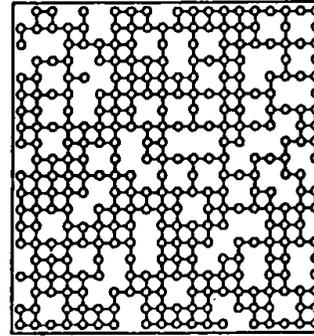
## Beispiel: Perkolation auf einem quadratischen Gitter für drei Besetzungswahrscheinlichkeiten



$p=0,20$



$p=p_c=0,59$



$p=0,80$

- : endliche Cluster;    ○
- : unendlicher Cluster

Der Perkolationsübergang bei der kritischen Besetzung  $p = p_c$  ist durch universelle Skalengesetze mit kritischen Exponenten, die nur von der Raumdimension  $d$  abhängen gekennzeichnet.

### Skalengesetze:

1. Perkulationswahrscheinlichkeit  $P_\infty$  (Anteil der Partikel im unendlichen Cluster)
2. **Korrelationslänge**  $\xi$  (Mittlerer Abstand der Partikel in den endlichen Clustern)
3. Partikelanzahl  $N(r)$  oder Masse  $M(r)$ : mit  $d_f = d - \beta/\nu$  als universelle fraktale Dimension.
4. Mittlere Clustergröße  $S$  (2. Moment der Größenverteilung der endlichen Cluster)

$$P_\infty \sim (p - p_c)^\beta \quad \text{für } p > p_c$$

$$\xi \sim |p - p_c|^{-\nu} \quad \text{für } p < p_c \text{ und } p > p_c$$

$$N(r) \sim M(r) \sim \begin{cases} r^{d_f} & \text{für } r \ll \xi \text{ (selbstähnlich)} \\ r^d & \text{für } r \gg \xi \text{ (homogen)} \end{cases}$$

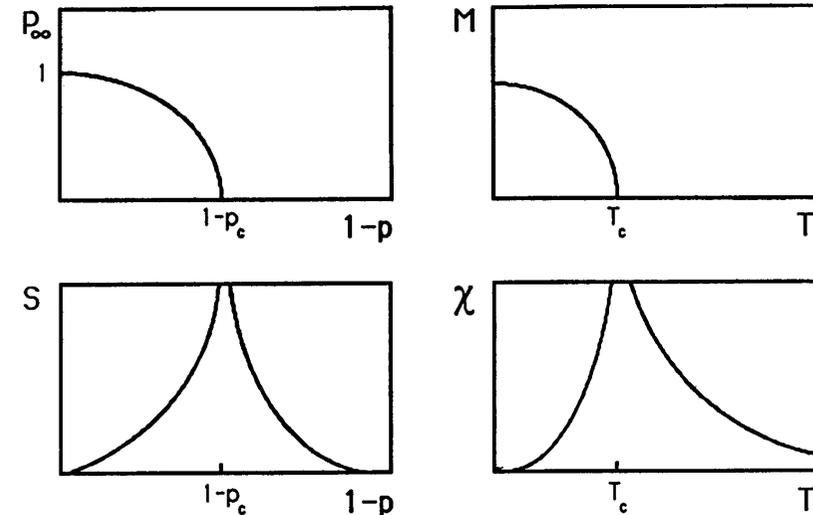
$$S \sim |p - p_c|^{-\gamma} \quad \text{für } p < p_c \text{ und } p > p_c$$

Die kritische Besetzung  $p_c$  ist nicht universell, sondern hängt vom Gittertyp ab. (z.B. :  $p_c \approx 0,593$  für quadratische Gitter und  $p_c = 0,5$  für Dreiecksgitter, ...)

# Perkolationsschwelle und kritische Exponenten

Werte der kritischen Exponenten: Vergleich Perkolation und Magnetismus

Perkolation	d = 2	d = 3	d ≥ 6
Ordnungsparameter $P_\infty : \beta$	5/36	0.417 ± 0.003	1
Korrelationslänge $\xi : \nu$	4/3	0.875 ± 0.008	1/2
Mittlere Clustergröße $S : \gamma$	43/18	1.795 ± 0.005	1
Magnetismus	d = 2	d = 3	d ≥ 6
Ordnungsparameter $M : \beta$	1/8	0.32	1/2
Korrelationslänge $\xi : \nu$	1	0.63	1/2
Suszeptibilität $\chi : \gamma$	7/4	1.24	1



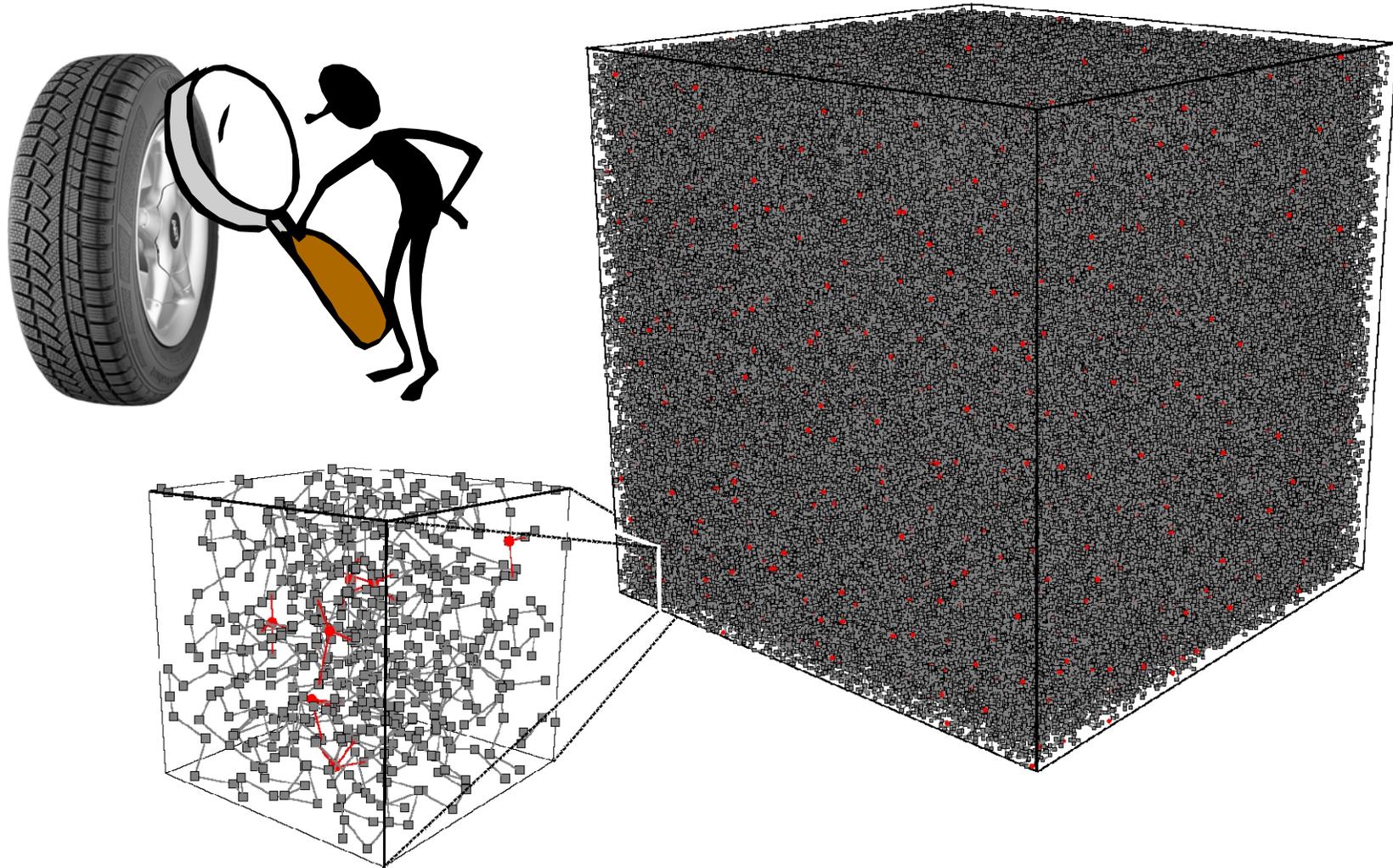
Lattice	Site	Bond
Honeycomb	0.6962	0.65271
Square	0.592746	0.50000
Triangular	0.500000	0.34729
Diamond	0.43	0.388
Simple cubic	0.3116	0.2488
BCC	0.246	0.1803
FCC	0.198	0.119
d = 4 hypercubic	0.197	0.1601
d = 5 hypercubic	0.141	0.1182
d = 6 hypercubic	0.107	0.0942
d = 7 hypercubic	0.089	0.0787

Werte der Perkolationsschwelle  $p_c$  (kritische Konzentrationen) im Gitterpunktmodell (Site) und im Bindungsmodell (Bond) für verschiedene Gittertypen und Raumdimensionen.

Polymere ....

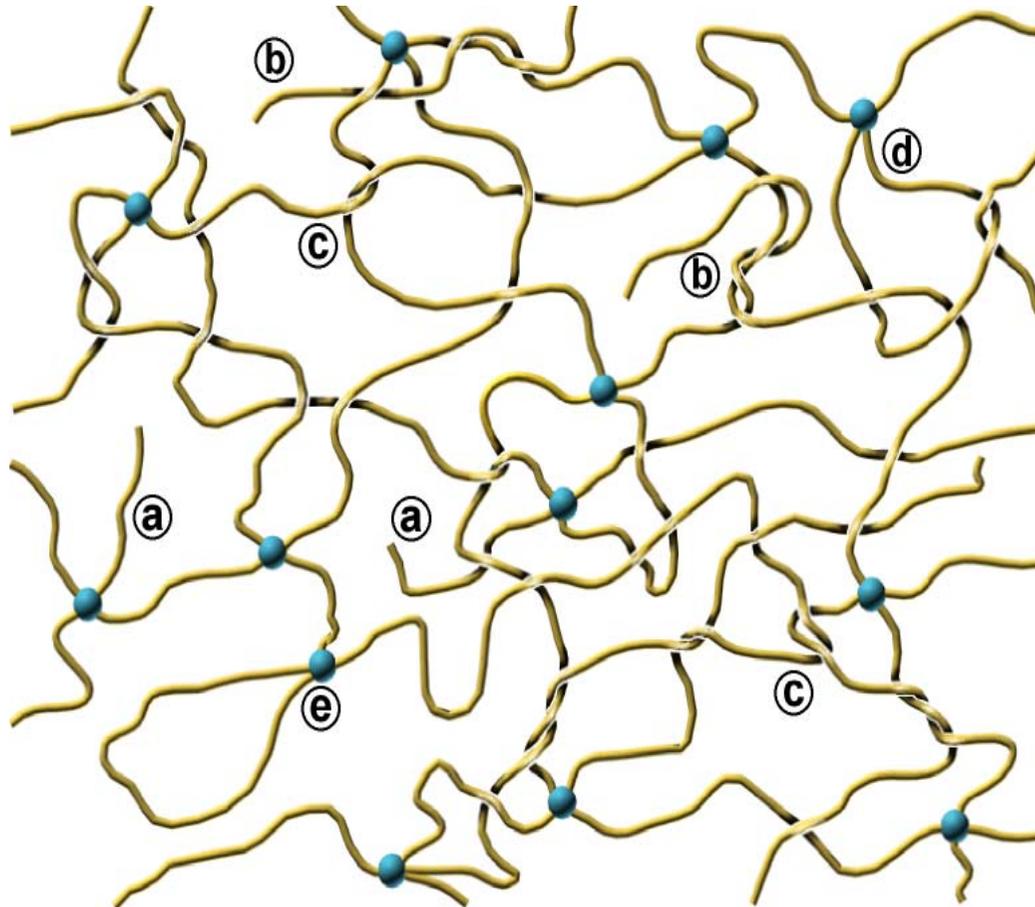
und noch mehr  
übergreifende Konzepte?

## Analyse von Struktur und Topologie

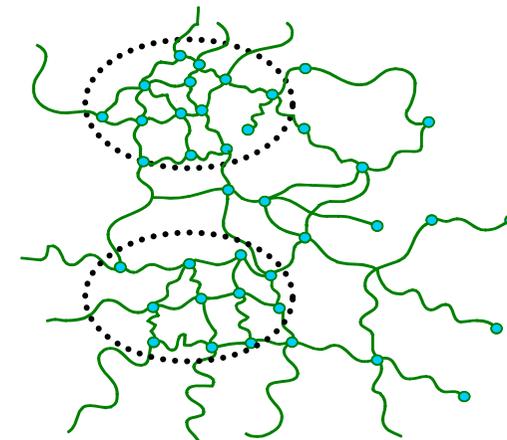


M. Lang, Dissertation, Univ. Regensburg, 2004

# Polymernetzwerke sind nicht ideal!

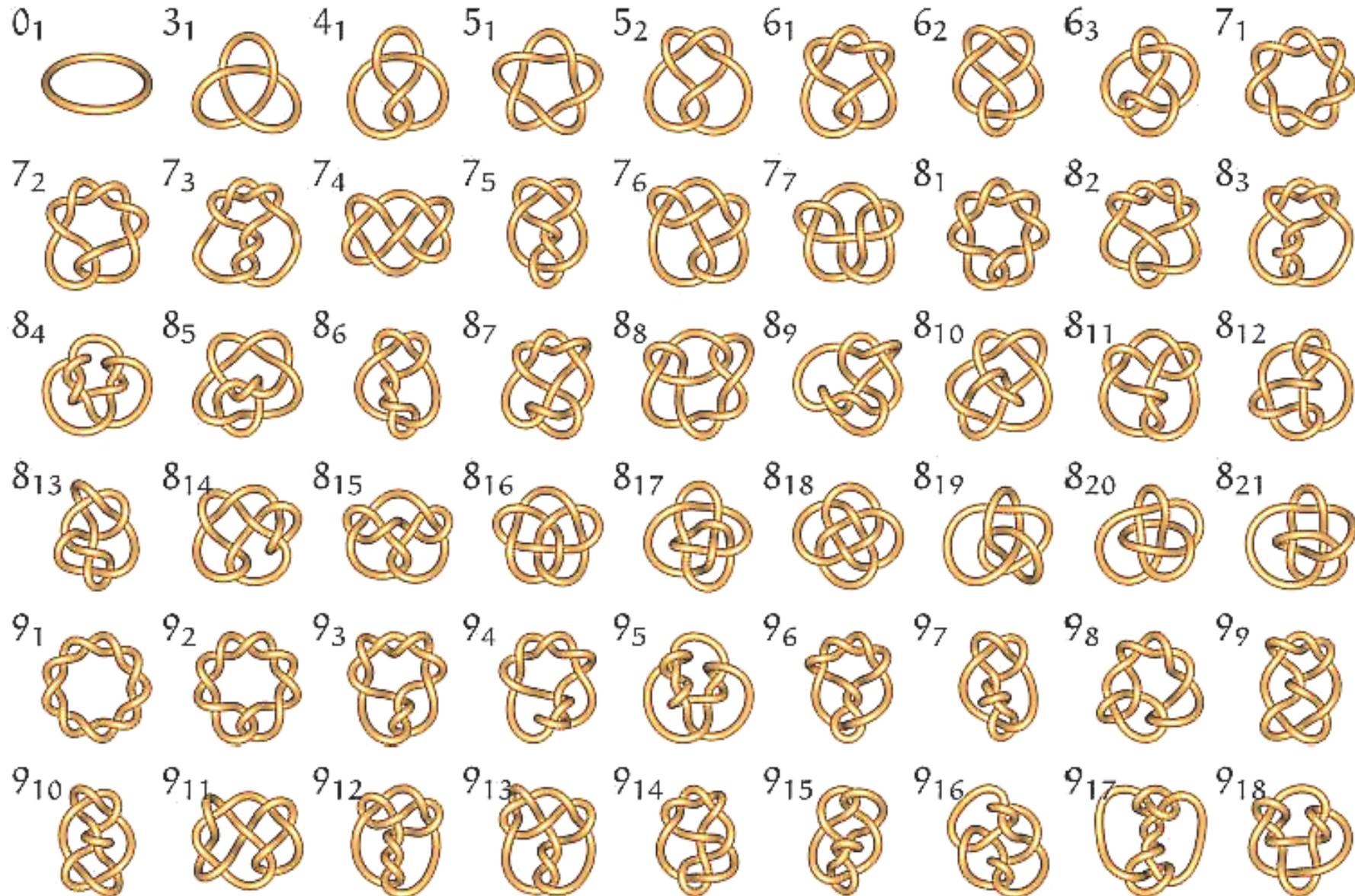


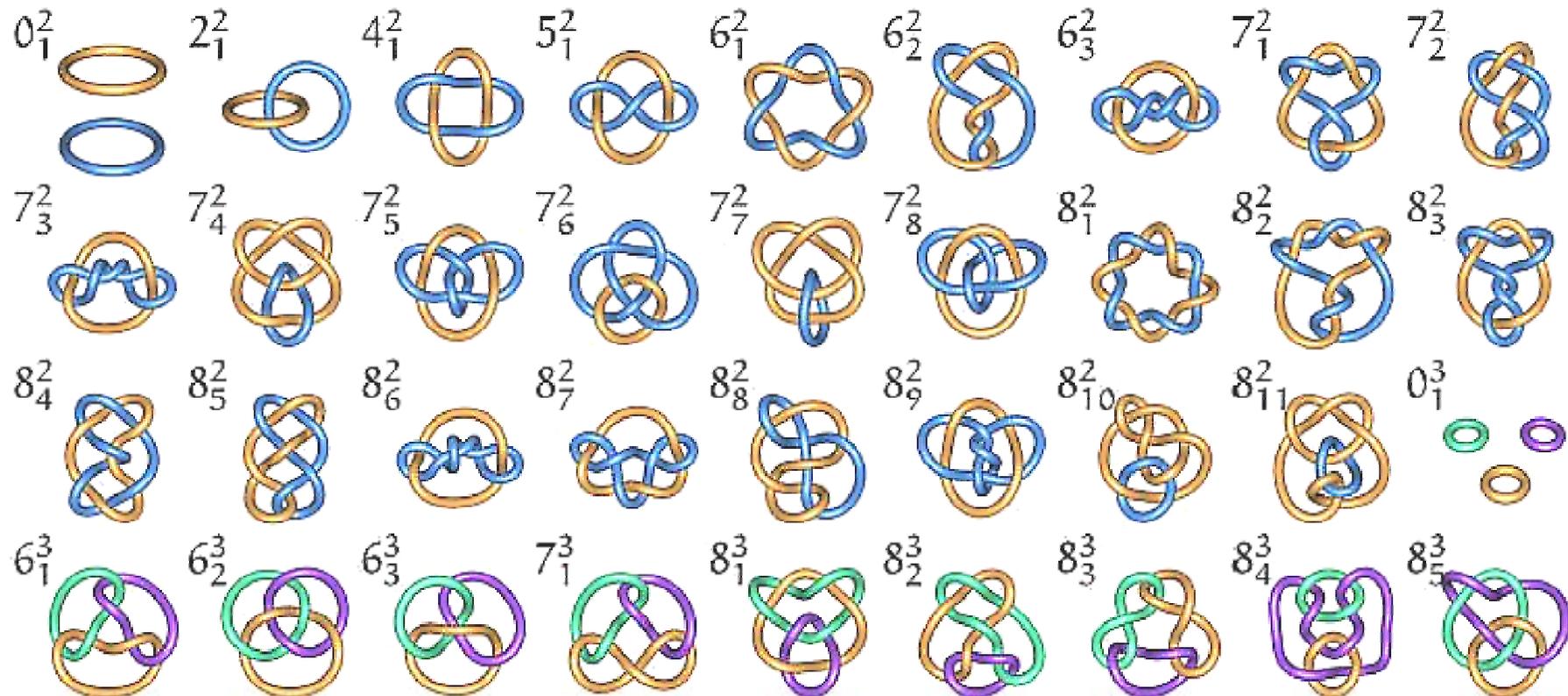
- (a, b) **freihängende Enden**;
- (b) **temporäre Verschlaufungen**;
- (c) **gefangene Verschlaufungen**;
- (d, e) **geschlossene Zyklen**.



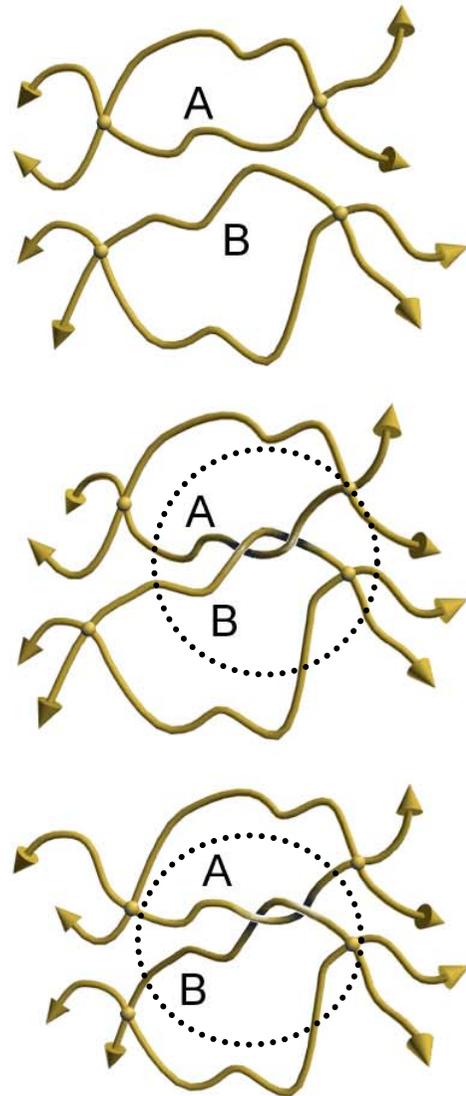
+ Heterogenitäten der  
räumlichen Netzknotenverteilung

# Entanglements in einer Ringstruktur





Die Größenverteilung der Ringstrukturen bestimmt die Möglichkeiten für Entanglements in einem Netzwerk.



**Topologische  
Invariante**  
Inv

**Biot-Savart  
Gesetz  
&  
4. Maxwell-  
gleichung**

Inv = 0

Inv = ± 4π

$$\text{Inv}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \oint \oint (\mathbf{dR}_1 \times \mathbf{dR}_2) \cdot \nabla \frac{1}{|\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1|} = \pm 4\pi n$$

electric current

$\mathbf{H}$  magnetic field

$$d\mathbf{H} = \frac{I}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1|^3} \mathbf{dR}_1 \times (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{R}_2) = \oint d\mathbf{H}$$

$$\oint \mathbf{H}(\mathbf{R}_2) \cdot \mathbf{dR}_2 = \pm I \cdot n$$

↳  $\lim_{n \rightarrow 0}$  n-component gauge field theory (n=1  $\rightarrow$  electrodynamics)

**Connection** between

knot theory (topological invariants for knots and links,  
link polynomials)

and

- statistical models at criticality



- biochemical topology



- quantum gravity



- quantum field theory



.

?

.

