

Zusammenfassung

In der Arbeit wird das universelle, trikritische Verhalten von langen Kettenmolekülen in Lösung in der Umgebung des sogenannten Teta-Punkts in drei Dimensionen näher untersucht.

Ausgehend von einem diskreten Feder-Perle-Modell einer Kette mit Zwei- und Drei-Punktwechselwirkungen ist zunächst die renormierte Störungstheorie zur Berechnung von thermodynamischen Erwartungswerten makroskopischer Observablen von hochverdünnten und halbverdünnten Polymerlösungen dargestellt. Damit wird anschließend zum Einen die führenden Korrelationskorrekturen im osmotischen Druck der Lösung in einer 1-loop-Rechnung ermittelt und mit dem bekannten mean-field-Ergebnis verglichen. Die daraus numerisch ermittelten kritischen Entmischungspunkte bei einer endlichen mittleren Kettenlänge zeigen eine starke Polydispersitätsabhängigkeit, während für unendlich lange Ketten im halbverdünnten Limes die Entmischungskonzentration durch die 1-loop-Korrekturen zu deutlich kleineren Konzentrationen hin verschoben ist.

Zum Anderen wird die Zustandssumme und der End-End-Abstand einer Einzelkette in zweiter Ordnung Störungstheorie in den Kopplungskonstanten berechnet. Die Korrekturen in zweiter Ordnung bei der Teta-Temperatur stellen sich dabei als so groß heraus, dass sie den dominierenden Beitrag für die in Experimenten und Simulationen erreichbaren Kettenlängen liefern. Da es sich dabei offensichtlich um die typische Struktur der Skalenfunktionen von Einzelkettengrößen handelt, ist das von der Theorie vorhergesagte universelle, trikritische Verhalten experimentell nicht beobachtbar. Ein Fit des Schwellfaktors des End-End-Abstands an die in Monte-Carlo-Simulationen eines Domb-Joyce-Modells ermittelten Daten, wird durch einen resummierten Renormierungsgruppenfluss zwar möglich, ist aber wegen zwei unabhängigen Fitparameter nicht aussagekräftig.