

Wh:
$$H = -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \in N} J_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i s_i$$

$$J_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{falls } i=j \\ J & \text{falls } i,j \text{ n\u00e4chste Nachbarn} \end{cases}$$

$$\chi_{ij} = \frac{\partial m_i}{\partial h_j} = \beta G_{ij} = \beta (\langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle)$$

s_i - s_j - Korrelationsfunktion

ortsabh\u00e4ngige
magn. Suszeptibilit\u00e4t

Translationsinvarianz: $h_i = 0$, $\forall i=1, \dots, N$, $\chi_{ij} = \chi(r_i - r_j)$
 $m_i = m = \langle s \rangle$

$$\tilde{\chi}(q) = \beta \tilde{G}(q)$$

Fouriertransformierte

Benutze Mean-Field-N\u00e4herung ($m_i = \tanh(\beta \sum_{j \in N} J_{ij} m_j + \beta h_i)$)

Ergebnis:

$$\tilde{\chi}(q) = \frac{\beta}{\frac{1}{1-m^2} - \beta \tilde{J}(q)}$$

mit
$$\tilde{J}(q) = \frac{1}{V} \int d\underline{r} \underline{J}(\underline{r}) e^{-i q \cdot \underline{r}}$$

 Kontinuumsch\u00e4tzung
 f\u00fcr J_{ij}

Ordnung-Zerfall-N\u00e4herung

Idee: Fokus auf kleine Wellenzahlen $q = (q)$

(~~langwellig~~ langwelliger L\u00e4nge)

d.h. gro\u00dfe Abst\u00e4nde im Ortsraum

Vorgehen
 \Rightarrow entwickle $\tilde{J}(q)$ für kleine q

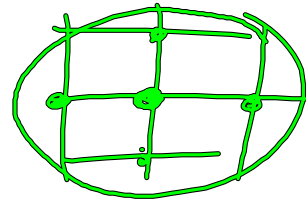
$$\tilde{J}(q) = \frac{1}{V} \int d\underline{r} J(\underline{r}) e^{-iq\underline{r}} \approx \frac{1}{V} \int d\underline{r} J(\underline{r}) - iq \cdot \frac{1}{V} \int d\underline{r} \underline{r} \cdot J(\underline{r}) - \frac{1}{2} \frac{1}{V} \int d\underline{r} (\underline{r} \cdot \underline{q})^2 J(\underline{r}) + \mathcal{O}(q^3)$$

betrachte die einzelnen Terme

$$\frac{1}{V} \int d\underline{r} J(\underline{r}) = \bar{J}$$

erträgt sich
 nur über nächst
 Nachbarn

Mittelwert der Kopplung
 über eine Einheitszelle



$$-iq \cdot \frac{1}{V} \int d\underline{r} \underline{r} J(\underline{r}) = 0$$

↑
 Punktsymmetrie gegenüber
 dem betrachteten Gitterplatz

$$-\frac{1}{2} \frac{1}{V} \int d\underline{r} (\underline{r} \cdot \underline{q})^2 J(\underline{r}) \stackrel{\uparrow}{=} -\frac{1}{2} \frac{1}{V} \int d\underline{r} r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \underbrace{r^2 q^2 \cos^2\theta}_{\text{siehe an: } \underline{q} = q \hat{\underline{e}}_z \text{ o.B.d.A. !}} J(\underline{r})$$

benutze:

$$\int_{-1}^1 dx x^2 = \frac{2}{3}$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{2\sigma} \int d\underline{r} (\underline{r} \cdot \underline{q})^2 J(\underline{r}) = -q^2 J'$$

$$\text{mit } J' = \frac{1}{6V} \int d\underline{r} r^2 J(\underline{r})$$

Zusammenfassung:

$$\Rightarrow \hat{J}(q) = \bar{J} - q^2 J' + \mathcal{O}(q^4)$$

wobei vernachlässigt bei der
Ordnung-Zermitte-Näherung

$$\Rightarrow \left[\tilde{\chi}(q) \approx \frac{\beta}{1+m^2 - \beta \bar{J} + \beta q^2 J'} \right]$$

betrachte Umgebung direkt an T_c

$\rightarrow m$ ist sehr klein: $\frac{1}{1-m^2} \approx 1+m^2$

$$\Rightarrow \tilde{\chi}(q) \rightarrow \frac{\beta}{1+m^2 - \beta \bar{J} + \beta q^2 J'}$$

Umschreiben:

definiere: $z^2 = \frac{1+m^2 - \beta \bar{J}}{\beta J'}$, $a = \frac{\beta}{\beta J'} = \frac{1}{J'}$

$$\Rightarrow \left[\beta^{-1} \tilde{\chi}(q) = \hat{J}(q) = \frac{a}{z^2 + q^2} \right] \textcircled{*} \quad a \text{ konstant}$$

Fourier- Rücktransformation:

$$\beta^{-1} \chi(\underline{r}) = \beta^{-1} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\underline{q} \hat{J}(q) e^{i\underline{q} \cdot \underline{r}}$$

Ergebnis:

$$\beta^{-1} \chi(r) = G(r) = \frac{v}{4\pi} \frac{e^{-\alpha r}}{r} = \frac{v}{2\pi J'} \frac{e^{-\alpha r}}{r}$$

exponentieller
Abfall!

definiere die sogenannte Korrelationslänge

$$\xi = \frac{1}{\alpha} = \sqrt{\frac{\beta J'}{4 + m^2 - \beta J'}}$$

$$\Rightarrow \boxed{G(r) \sim \frac{e^{-r/\xi}}{r}}$$

Verhalten bei Annäherung an T_c

• $T \rightarrow T_c \Leftrightarrow m=0 \rightarrow \xi = \sqrt{\frac{\beta J'}{1 - \beta J'}}$

benutze: $\beta J' = \beta \frac{1}{v} \int d\mathbf{r} J(r)$

$$= \frac{T_c}{T}$$

$$\Rightarrow \xi = \sqrt{\frac{J'}{k_B T (1 - \frac{T_c}{T})}} = \sqrt{\frac{J'}{k_B (T - T_c)}} = \sqrt{\frac{J'}{k_B T_c}} \left(\frac{T - T_c}{T_c} \right)^{-1/2}$$

$\Rightarrow \xi$ divergiert mit Exponent $\nu = \frac{1}{2}$!

• $T \lesssim T_C$ d.h. $m \neq 0$

~~hier~~ benutze $m^2 \approx 3 \frac{T^2}{T_C^2} \left(\frac{T_C - T}{T_C} \right)$
d.h. an T_C

ersetze in $\xi = \sqrt{\frac{\beta J'}{4m^2 - \beta J}}$

man findet: $\xi \sim 2 \left(\frac{T_C - T}{T_C} \right)^{-\frac{1}{2}}$

, auch hier
also $\nu = \frac{1}{2}$!

Bemerkungen

• der Ausdruck $G(r) \sim \frac{e^{-M_\xi}}{r}$ gibt nur asymptotisch
(d.h. für große Abstände r)
da wir ^{uns} bei Herleitung auf
kleine Wellen q beschränkt haben!

auf kurzen Abstände kann $G(r)$ auch
oszillatorisch sein!

• der Ausdruck für $G(r)$ gilt für dreidimensionale
Systeme!

(denn:
bei der Fourier-Rücktransformation haben wir
ein 3D-Integral angenommen!)

- Im Rahmen der OZ-Näherung gilt:

$$\xi \sim \left| \frac{T-T_c}{T_c} \right|^{-\nu} \quad \nu = \frac{1}{2}$$

homogene Suszeptibilität $\rightarrow \chi \sim \left| \frac{T-T_c}{T_c} \right|^{-\gamma} \quad \gamma = 1$

$$\Rightarrow \boxed{\gamma = 2\nu}$$

- „Echtes“ Verhalten der Korrelationsfunktion:

$$g(r) \sim \frac{e^{-M_5 r}}{r^{-(d-2+\eta)}} \quad d \text{ Raumdimension}$$

mit $\xi \sim (T-T_c)^{-\nu}$

z.B. $d=3, \text{ Ising}$

$$g(r) \sim \frac{e^{-M_5 r}}{r^{1+\eta}} \quad \text{mit } \eta \approx 0.037$$

Exponenten: $\nu = 0.638$
 $\gamma = 1.275$

$$\Rightarrow \gamma = (2-\eta)\nu$$

↑
 Null in der OZ-Theorie!

- Das hier gefundene ^{asymptotische} Verhalten von $g(r)$ im kurzreichweitigen Ising-Modell

gilt auch für die anderen Systeme in dieser Universalitätsklasse!

Insbesondere gilt es auch für Flüssigkeiten dicht am Unt. Punkt

Dirac-Dirac-Korrelationsfunktion

$$g(r) \sim (\langle g(r')g(r'') \rangle - \langle g(r') \rangle \langle g(r'') \rangle)$$

mit $r = |r' - r''|$

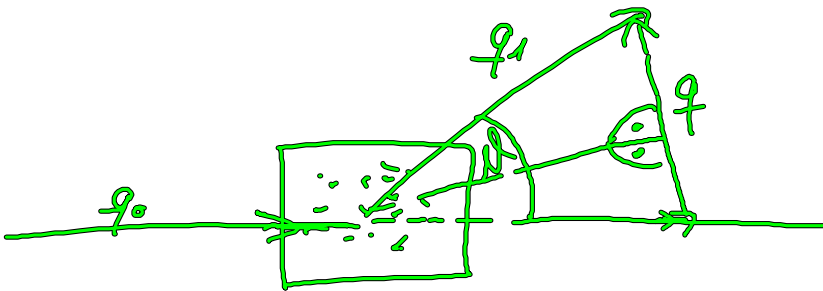
auch hier aber $g(r) \sim \frac{e^{-r/\xi}}{r}$ für $r \rightarrow \infty$
 $T \rightarrow T_c$

II.8. Messungen von (kritischen) Korrelationen in Flüssigkeiten: Der Streuexperiment

betrachte Streuexperiment

(Röntgenstrahlung
Neutronenstrahlung)

Licht, falls die Teilchen genügend groß sind (Wellenlänge)



Ablenkung des Strahls durch Wechselwirkung der Streuzellen mit den Molekülen der Flüssigkeit

es gilt:

$q = q_1 - q_0$ Streuvektor

$|q| = |q_0|$ elastische Streuung und $q_0 \frac{d}{z} = \frac{q^2}{q_1}$

$$\Rightarrow q = 2q_1 \sin \frac{\theta}{2} = 2q_0 \sin \frac{\theta}{2}$$

$$= \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2}$$

Durch Variation des Streuwinkels kann man $|q| = q$ ändern

Kleine $q \Leftrightarrow$ kleine Streuwinkel!

(~~S~~ SANS

Small-angle neutron scattering)

Was misst man überhaupt?

Intensität der gestreuten Strahlung.

$$I(q) = I_0 f(q) S(q)$$

mit $f(q)$: Formfaktor (da abhängig von der Form der Teilchen!)

Anmerkung: Im interessanten Bereich von q variiert $f(q)$ nur schwach

\Rightarrow Setze $f(q) \approx \text{const}$

D.h., die für die q -Abhängigkeit von $I(q)$ relevante Größe ist der sogenannte Strukturfaktor

$$\tilde{S}(q) = \frac{1}{\langle N \rangle} \left\langle \left| \sum_{i=1}^N e^{iq \cdot r_i} \right|^2 \right\rangle - \rho d(q)$$

mit $\rho = \frac{\langle N \rangle}{V}$

Verbindung zwischen $\tilde{S}(q)$ und der räumlichen Dichte \rightarrow Dichte Korrelationsfunktion in der Flüssigkeit

$$\tilde{S}(q) = \frac{1}{\langle N \rangle} \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{iq \cdot (r_i - r_j)} \right\rangle - \rho d(q)$$

definiere:

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N \delta(r - r_i) \quad \text{instantane lokale Dichte}$$

Dann:

$$\tilde{S}(q) = \frac{1}{\langle N \rangle} \left\langle \int dr \int dr' \rho(r) \rho(r') \right\rangle e^{iq \cdot (r - r')} - \rho d(q)$$

Translationsinvarianz: $\langle \rho(r) \rho(r') \rangle$ hängt nur von $\underline{R} = r - r'$ ab!

aufserdem:

$$d(q) = \int d\underline{R} e^{iq \cdot \underline{R}} = \begin{cases} V, & q \rightarrow 0 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \tilde{S}(\underline{q}) &= \frac{1}{\langle N \rangle} V \int d\underline{R} \langle \rho(\underline{R}) \rho(\underline{0}) \rangle e^{i\underline{q} \cdot \underline{R}} \\ &\quad - \rho \int d\underline{R} e^{i\underline{q} \cdot \underline{R}} \\ &= \frac{1}{\rho} \int d\underline{R} \left(\langle \rho(\underline{R}) \rho(\underline{0}) \rangle - \rho^2 \right) e^{i\underline{q} \cdot \underline{R}} \end{aligned}$$

benutze jetzt die Def. der Dichte-Dichte-Korrelationsfkt.:

$$g(\underline{R}) = \langle \rho(\underline{R}) \rho(\underline{0}) \rangle - \underbrace{\langle \rho(\underline{R}) \rangle}_{\rho} \underbrace{\langle \rho(\underline{0}) \rangle}_{\rho}$$

im translationsinvarianten System!

$$\Rightarrow \boxed{\tilde{S}(\underline{q}) = \frac{1}{\rho} \int d\underline{R} e^{i\underline{q} \cdot \underline{R}} g(\underline{R})} \quad (*)$$

d.h. der Strukturfaktor ist die Fouriersumme der Korrelationsfunktion!

umschreiben:

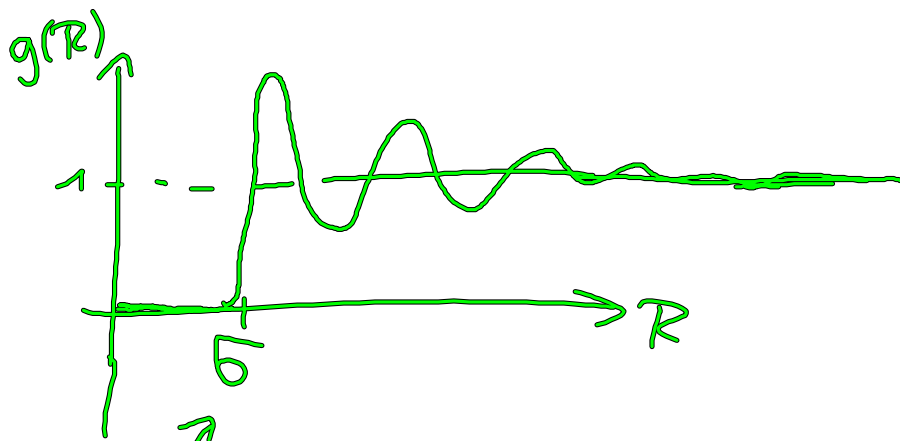
$$g(\underline{R}) = \overset{\text{Paarkorrelationsfkt.}}{\rho^{(2)}(\underline{R})} + \rho \delta(\underline{R}) - \rho^2 = \overset{\text{Paarkorrelationsfkt.}}{\rho^2} g(\underline{R}) + \rho \delta(\underline{R}) - \rho^2$$

$$\text{mit } \rho^{(2)}(\underline{R}) = \left\langle \sum_i \sum_{j \neq i} \delta(\underline{R} - \underline{r}_i) \delta(\underline{0} - \underline{r}_j) \right\rangle$$

Zweifachkennlich

$$\begin{aligned}
 G(\underline{R}) &= \rho^2 g(\underline{R}) + \rho \delta(\underline{R}) - \rho^2 \\
 &= \rho^2 (g(\underline{R}) - 1) + \rho \delta(\underline{R}) \\
 &= \rho^2 h(\underline{R}) + \rho \delta(\underline{R})
 \end{aligned}$$

↑ totale Korrelationsfunktion



↑ Durchmesser eines Flüssigkeitsmoleküls

↑ physik.:
Oszillationen mit einer Wellenlänge von ungefähr einem Teilchen Durchmesser:

→ lokale Struktur in der Flüssigkeit

$$\begin{aligned}
 \hat{S}(q) &= \frac{1}{\rho} \int d\underline{R} e^{i\underline{q} \cdot \underline{R}} G(\underline{R}) \\
 &= \rho \int d\underline{R} e^{i\underline{q} \cdot \underline{R}} h(\underline{R}) + \int d\underline{R} \delta(\underline{R})
 \end{aligned}$$

$$= \mathcal{S} \hat{h}(\varphi) + 1$$

$$\text{mit } \hat{h}(\varphi) = 1 - \hat{g}(\varphi)$$

