$$G_{ij} = \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle$$ Korrelationsfkt.

$$\beta G_{ij} = \chi_{ij} = \frac{\partial m_i}{\partial h_j}$$

Suszeptibilität

translationsinvariant $\Rightarrow$ Fourierraum-Auswertung

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

$$\underset{\substack{T \to T_c \\ q \to 0}}{\approx} \frac{a}{z^2 + q^2}$$ mit $a = \frac{\beta}{\beta J'}$,

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

„Ornstein-Zernike-Näherung"

"Rücktrafo": $G(r) \sim a \frac{e^{-zr}}{r}$

Korrelationslänge: $\xi = \frac{1}{z} = \sqrt{\frac{\beta J'}{1+m^2 - \beta \bar{J}}}$ $(*)$

Verhalten von ξ bei Annäherung an T_c:

Erinnerung: $\beta \bar{J} = \beta \frac{1}{V} \int dr\, J(r) = \frac{T_c}{T}$

$T \geq T_c$: $m = 0$

$$\xi \overset{(*)}{=} \sqrt{\frac{\beta J'}{1-\beta \bar{J}}} = \sqrt{\frac{J'}{k_B T (1 - \frac{T_c}{T})}} = \sqrt{\frac{J'}{k_B (T - T_c)}}$$

$$\approx \sqrt{\frac{J'}{k_B T_c}} \Big(\underbrace{\frac{T - T_c}{T_c}}_{\varepsilon}\Big)^{-\frac{1}{2}} \sim \varepsilon^{-\frac{1}{2}}$$

$$\Rightarrow \nu = \frac{1}{2}$$

krit. Exponent der Korrelationslänge

$T \lesssim T_C \; : \; m \neq 0 \; , \; m^2 \underset{T \to T_C}{\approx} 3 \frac{T^2}{T_C^2} \left(\frac{T_C - T}{T_C} \right)$

$$\xi = \sqrt{\frac{\beta J'}{1 + 3 \frac{T^2}{T_C^2} \frac{T_C - T}{T_C} - \frac{T_C}{T}}}$$

$$= \sqrt{\frac{J'}{k_B \left(3 \frac{T^2}{T_C^2} \left(\frac{T_C - T}{T_C} \right) - \frac{T_C}{T} \left(\frac{T_C - T}{T_C} \right) \right)}}$$

$\beta = \frac{1}{k_B T}$

$\frac{T}{T_C} \approx 1$

$$\sim \underset{\uparrow}{2} \left(\frac{T_C - T}{T_C} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

Amplitude

auch hier: $\nu = \frac{1}{2}$
aber andere Amplitude
als für $T > T_C$

Bemerkungen

- beachte: $\xi \to \infty$ bedeutet (für festes r), $\left(e^{-\frac{1}{\xi} r} \to 1 \right)$
  dass $G(r) \sim \frac{1}{r}$!!

- Wir haben gesehen
  $$\xi \sim \left(\frac{T - T_C}{T_C} \right)^{-\nu}$$
  ...

$$\chi \sim \left(\frac{T-T_c}{T_c}\right)^{-\gamma}$$

in der Ornstein-Zernike-Theorie gilt

aufgrund des engen Zusammenhangs zw. $\hat{G}(\underline{q})$ und $\hat{\chi}(\underline{q})$

$$\gamma = 1\,,\ \nu = \frac{1}{2} \implies \boxed{\gamma = 2\nu}$$

- Bei der Rücktransformation $\hat{\chi}(q) \to \chi(r) \sim G(r)$ geht die Raumdimension ein!

bisher betrachtet: $d=3$

allgemeiner:

$$G(r) \sim \int d\underline{q}\, e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}} \underbrace{\hat{G}(\underline{q})}_{\hat{G}(q)} \quad \sim \hat{\chi}(\underline{q})$$

mit $q = |\underline{q}|$

$$\sim \int dq\, q^{d-1}\, \hat{G}(\underline{q})\, \underbrace{\frac{J_{d/2-1}(qr)}{(qr)^{d/2-1}}}_{\text{Ergebnis der Winkelintegrale}}$$

Umwandlung in Kugelkoordinaten

Besselfunktion erster Art

Betrachte 2 Grenzwerte

a) $\xi = \frac{1}{5}$ fest, $r \to \infty$

$$\implies G(r) \sim \frac{e^{-\xi r}}{r^{\frac{d-1}{2}}}$$

entspricht für $d=3$ dem alten Ergebnis

b) r fest und groß, $t \to 0$ ($\Leftrightarrow \xi \to \infty$)

$$G(r) \sim \begin{cases} \ln r & d=2 \\ \frac{1}{r^{d-2}}, & d \geq 3 \end{cases}$$

- Für $d=2$ ist das Verhalten ($G(r) \sim \ln r$) im Widerspruch zur exakten Lösung des 2d-Ising-Modells (Onsager)

- Für $d=3$ ergibt sich im Limes $\xi \to \infty$, r fest

$$G(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}$$

Dabei ~~ist~~ ist η der sogenannte "Fisher"-Exponent (M.E. Fisher)

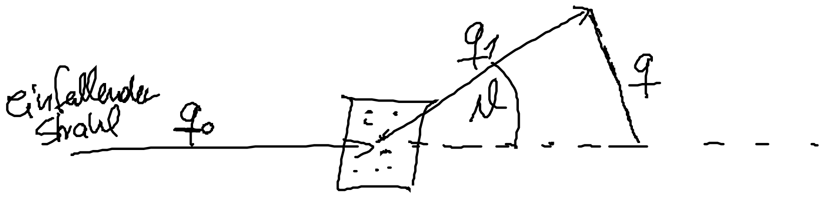
η bildet kleine Korrektur

Relation zw. den Exponenten:

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

III. 6. Messung von kritischen Korrelationsfunktionen: Strukturfaktor

betrachte Streuexperiment an einem Fluid
(Röntgen, Neutronen, Licht)



Ablenkung des Strahls durch Wechselwirkung zwischen Streuteilchen und den Teilchen der Flüssigkeit

Es gilt:

$$\underline{q} = \underline{q}_1 - \underline{q}_0 \quad \text{mit} \quad \underbrace{|\underline{q}_1| = |\underline{q}_0|}_{\text{elastische Streuung}}, \quad \sin\frac{\vartheta}{2} = \frac{q/2}{q_1}$$

$$\Rightarrow q = 2q_1 \sin\frac{\vartheta}{2} = 2q_0 \sin\frac{\vartheta}{2} = \frac{4\pi}{\lambda}\sin\frac{\vartheta}{2}, \qquad q_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Intensität der gestreuten Strahlung:

$$I(\vartheta) = I(\underline{q})$$
$$= I_0 \, f(\underline{q}) \, S(\underline{q})$$

Ansatz

wobei $f(\underline{q})$ "Formfaktor" (der abhängig von der Form der Teilchen)

$S(\underline{q})$: Strukturfaktor

Zum Formfaktor:

„Einteilcheneigenschaft"

$$f(q) \sim |v(q)|^2$$

Fouriertransformierte der Wechselwirkung zw. Streuteilchen und Fluid-Teilchen!

enthält nicht: Wechselwirkungen zw. den Fluid-Teilchen!

Born'sche Näherung

$f(q)$ hängt meist nur schwach von $|q|$ ab, da das Potential $v(r)$ zw. Streu- und Fluidteilchen ist kurzreichweitig $v(r) \approx \delta(r)$

ergibt näherungsweise Konstante im q-Raum

$\Rightarrow$ Relevant für die q-Abhängigkeit der Streuintensität ist der Strukturfaktor!

Def.: $$S(q) = \frac{1}{\langle N \rangle} \left\langle \left| \sum_{l=1}^{N} e^{iq\cdot r_l} \right|^2 \right\rangle - \rho\,\delta(q)$$

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

Verbindung zu räuml. Korrelationen?

$$(*)\quad S(q) = \frac{1}{\langle N \rangle} \left\langle \sum_{l=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} e^{iq(r_l - r_j)} \right\rangle - \rho\,\delta(q)$$

definieren:

$$\hat{\rho}(\underline{r}) = \sum_{l=1}^{N} \delta(\underline{r} - \underline{r}_l)$$

$$\langle \hat{\rho}(\underline{r}) \rangle = \rho(\underline{r})$$

Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion:

$$G(\underline{r}) = \langle \hat{\rho}(\underline{r}) \hat{\rho}(0) \rangle - \langle \hat{\rho}(\underline{r}) \rangle \langle \hat{\rho}(\underline{0}) \rangle$$

Aus (*)

$$S(q) = \frac{1}{\langle N \rangle} \int d\underline{r} \int d\underline{r}' \langle \hat{\rho}(\underline{r}) \hat{\rho}(\underline{r}') \rangle e^{iq\cdot(\underline{r}-\underline{r}')} - \rho\, \delta(q) \quad (**)$$

(sieht man durch Einsetzen von $\hat{\rho}(\underline{r})$, $\hat{\rho}(\underline{r}')$)

benutze außerdem: $\delta(q) = \int d\underline{R}\, e^{iq\cdot\underline{R}}$

Und: nehme an, dass System im Mittel translationsinvariant

$$\int d\underline{r} \int d\underline{r}' \langle \hat{\rho}(\underline{r}) \hat{\rho}(\underline{r}') \rangle \xrightarrow[\underline{R} = \underline{r} - \underline{r}']{} V \int d\underline{R} \langle \hat{\rho}(\underline{R}) \hat{\rho}(0) \rangle$$

Einsetzen in (**)

$$\Rightarrow S(\underline{q}) = \overbrace{\frac{1}{\langle N\rangle} V}^{1/\rho} \int d\underline{R} \, \langle \hat{\rho}(\underline{R})\hat{\rho}(0)\rangle e^{i\underline{q}\cdot\underline{R}}$$

$$- \rho \int d\underline{R} \, e^{i\underline{q}\cdot\underline{R}} \qquad \rho = \frac{\langle N\rangle}{V}$$

$$= \frac{1}{\rho} \left(\int d\underline{R} \left(\underbrace{\langle \hat{\rho}(\underline{R})\hat{\rho}(0)\rangle - \rho^2}_{G(\underline{R})} \right) e^{i\underline{q}\cdot\underline{R}} \right)$$

mit $\langle \hat{\rho}(\underline{R})\rangle = \langle\hat{\rho}(0)\rangle = \rho$

im homogenen System!!

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

Der Strukturfaktor ist (bis auf Vorfaktor) die Fouriertransformierte der Dichte-Dichte Korrelationsfunktion

Exakt!

Häufig schreibt man (*) noch etwas um

$$G(\underline{R}) = \langle \hat{\rho}(\underline{R})\hat{\rho}(0)\rangle - \rho^2$$

$$= \langle \hat{\rho}(\underline{r})\, \hat{\rho}(\underline{r}') \rangle - \rho^2$$

Translations-invarianz

$$= \Big\langle \sum_{i=1}^{N} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i) \sum_{j=1}^{N} \delta(\underline{r}' - \underline{r}_j) \Big\rangle - \rho^2$$

$$= \underbrace{\Big\langle \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)\, \delta(\underline{r}' - \underline{r}_j) \Big\rangle}_{\text{Zweiteilchendichte}} + \Big\langle \sum_{i=1}^{N} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)\, \delta(\underline{r}' - \underline{r}_i) \Big\rangle - \rho^2$$

Zweiteilchendichte

$$\rho^{(2)}(\underline{r}, \underline{r}')$$

$$= \rho^{(2)}(\underline{r} - \underline{r}')$$

$$= \rho^{(2)}(\underline{R})$$

$$\Rightarrow G(\underline{R}) = \rho^{(2)}(\underline{R}) + \rho\, \delta(\underline{R}) - \rho^2$$

das ist die eigentlich interessierende Größe!!

$\rho^{(2)} \hat{=}$ Wahrsch., ein Teilchen am Ort $\underline{R}$ und ein anderes Teilchen am Ort $\underline{0}$ zu finden

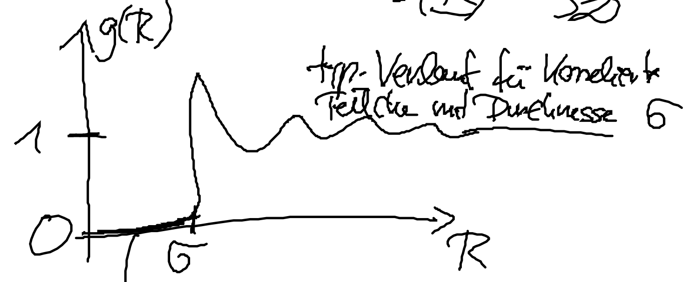
man definiert nun weiter

$$\rho^{(2)}(\underline{R}) = \rho^2\, g(\underline{R})$$

Paarkorrelationsfunktion

Ergebnis für $g^{(2)}(\underline{R})$

im Limes $|\underline{R}| \to \infty$



„Korrelationsloch" aufgrund der repulsiven Wechselwirkung!

Einsetzen in $G(\underline{R})$

$$G(\underline{R}) = \rho^2 g(\underline{R}) + \rho\,\delta(\underline{R}) - \rho^2$$

$$= \rho^2 \underbrace{\left(g(\underline{R}) - 1\right)}_{h(\underline{R})} + \rho\,\delta(\underline{R})$$

„totale Korrelationsfunktion"

$h \neq 0$: $g(\underline{R}) \neq 1$

$\hat{=}$ Vorhandensein echter Zweiteilchenkorrelation!

Zurück zum Strukturfaktor.

$$S(\underline{q}) = \frac{1}{\rho} \int d\underline{R}\, e^{i\underline{q}\cdot\underline{R}}\, G(\underline{R})$$

$$= \frac{1}{\rho} \int d\underline{R} \left(\rho^2 e^{i\underline{q}\cdot\underline{R}}\, h(\underline{R}) + \rho\, \delta(\underline{R}) \right)$$

$$= \rho\, \hat{h}(\underline{q}) + 1$$

$$\Rightarrow \boxed{S(\underline{q}) = 1 + \rho\, \hat{h}(\underline{q})} \quad (**)$$

Verhalten im Grenzfall $|\underline{q}| \to 0$

Dichte-Dichte-Korrelationsfkt.

$$S(\underline{q}\to 0) \overset{(**)}{=} 1 + \rho\, \hat{h}(\underline{q}\to 0)$$

$$= \frac{1}{\rho} \hat{G}(\underline{q}\to 0) = \frac{1}{\rho} \int d\underline{R}\, G(\underline{R})$$

$$= \frac{1}{\rho} \underbrace{\int d\underline{R}}_{\frac{1}{V}\int d\underline{r}\int d\underline{r}'} \left\langle \sum_{i=1}^{N} \delta(\underline{R} - \underline{r}_i) \sum_{j=1}^{N} \delta(\underline{0} - \underline{r}_j) \right\rangle$$

$$- \rho \int d\underline{R}$$

$$= \frac{1}{\rho V} \int d\underline{r} \int d\underline{r}' \left\langle \sum_{i=1}^{N} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i) \sum_{j=1}^{N} \delta(\underline{r}' - \underline{r}_j) \right\rangle$$

$$= \frac{1}{\rho V} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \Big\langle \underbrace{\int d\underline{r}\, \delta(\underline{r}-\underline{r}_i)}_{1 \;-\rho V} \underbrace{\int d\underline{r}\, \delta(\underline{r}-\underline{r}_j)}_{1 \;-\rho V} \Big\rangle$$

$$S(q \to 0) = \frac{1}{\rho V} \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle \qquad \boxed{\rho = \frac{\langle N \rangle}{V}}$$

$$= \frac{\langle N^2 \rangle}{\langle N \rangle} - \langle N \rangle =$$

$$= \frac{\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2}{\langle N \rangle}$$

Relative Schwankungen der Teilchenzahl!