

II.6

Strukturfaktor $S(q)$

Streuexperiment $I(N) = I(q)$

$\sim f(q) S(q)$

$$S(q) = \frac{1}{\langle N \rangle} \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{iq(\underline{r}_i - \underline{r}_j)} \right\rangle \quad \text{--- } S d(q)$$

$$S(q) = \frac{1}{S} \int d\underline{r} e^{iq \cdot \underline{r}} g(\underline{r})$$

Strukturfaktor ist die
Fouriertransformierte der
Dichte-Dichte-Korrelations-
funktion

$$g(\underline{r}) = \langle \rho(\underline{r}) \rho(\underline{0}) \rangle - \frac{\langle \rho(\underline{r}) \rangle \langle \rho(\underline{0}) \rangle}{S}$$

$$\rho(\underline{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)$$

$$g(\underline{R}) = \left\langle \sum_{i=1}^N \delta(\underline{r} - \underline{r}_i) \sum_{j=1}^N \delta(\underline{r}' - \underline{r}_j) \right\rangle$$

$$\underline{R} = \underline{r} - \underline{r}' \quad - S^2$$

$$= \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \delta(\underline{r} - \underline{r}_i) \delta(\underline{r}' - \underline{r}_j) \right\rangle \quad \text{Zweifelderdichte } \rho^{(2)}(\underline{r}, \underline{r}') \quad \underline{R}$$

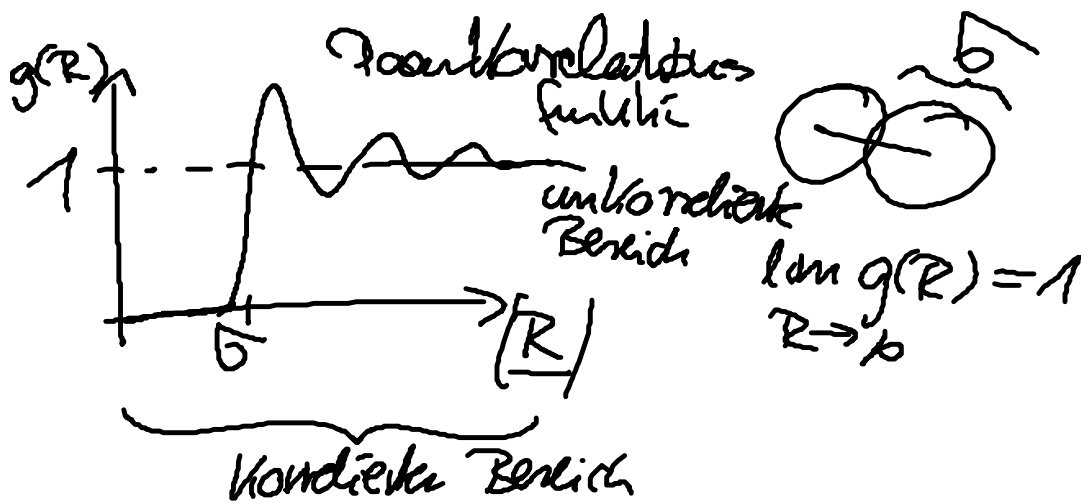
$$+ \left\langle \sum_{i=1}^N \delta(\underline{r} - \underline{r}_i) \delta(\underline{r}' - \underline{r}_i) \right\rangle \quad - S^2$$

$$S d(\underline{r} - \underline{r}')$$

$$\Rightarrow g(\underline{R}) = g^{(2)}(\underline{R}) + g d(\underline{R}) - g^2$$

$$= g^2 g(\underline{R}) + g d(\underline{R}) - g^2$$

\uparrow Paar-Korrelationsfunktion



$g(R) \approx 0$, für $R \leq b$: Teilchen können sich nicht nahe kommen

$R \geq b$: Oszillationen

\rightarrow Schalenstruktur um ein Teilchen



definiere noch: $h(R) = g(R) - 1$

totale
Korrelationsfunktion

→ Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion:

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

Zusammenhang zum Strukturfaktor

$$S(q) = \frac{1}{\rho} \int d\underline{R} e^{iq \cdot \underline{R}} g(\underline{R})$$

$$= \frac{1}{\rho} \rho^2 \int d\underline{R} e^{iq \cdot \underline{R}} h(\underline{R}) + \frac{1}{\rho} \rho \int d\underline{R} e^{iq \cdot \underline{R}} \delta(\underline{R})$$

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

exakt!

a) Verhalten im Limes $q \rightarrow 0$

$$S(q \rightarrow 0) = 1 + g \tilde{h}(q \rightarrow 0)$$

$$= \frac{1}{g} \tilde{g}(q \rightarrow 0)$$

$$= \frac{1}{g} \int d\underline{R} g(\underline{R})$$

mit $\tilde{g}(q) = \int d\underline{R} e^{iq \cdot \underline{R}} g(\underline{R})$

$$\underline{R} = \underline{r} - \underline{r}'$$

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

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

- $g \cdot V$

$$S(q \rightarrow 0) = \frac{1}{gV} \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle$$

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

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

$$= \underline{\underline{\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2}} \quad \uparrow$$

$\langle N \rangle$

Fluktuationen der Teilchenzahl!

Erinnerung:

$$\chi_T = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_T = \frac{1}{S k_B T} \left(\frac{\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2}{\langle N \rangle} \right)$$

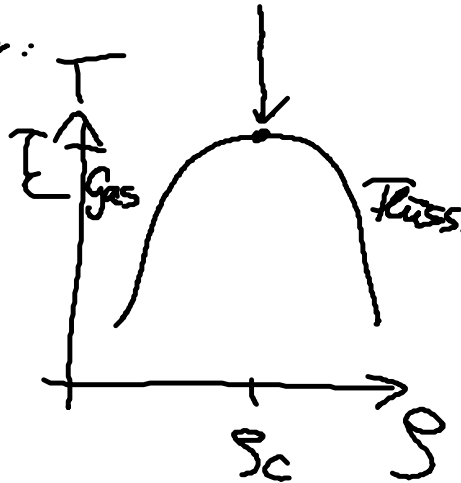
$$\Rightarrow S(q \rightarrow 0) = S k_B T \chi_T$$

!!

Damit ist schon klar:

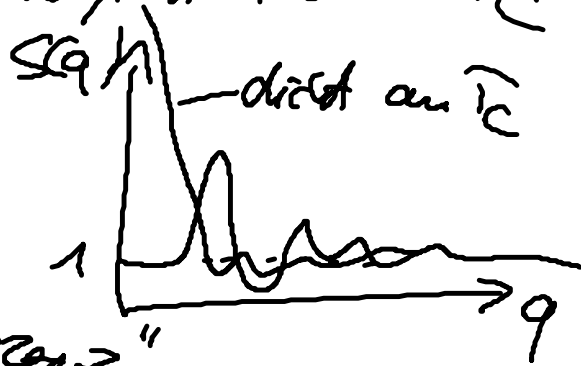
$$T \rightarrow T_C$$

$$\Leftrightarrow \chi_T \rightarrow \infty$$



das heißt:

$S(q \rightarrow 0)$ divergiert für $T \rightarrow T_C$!



$T < T_C$ (flüssig)

"kritische Opaleszenz"

Bei Annäherung an den krit. Punkt nimmt die Streuintensität bei "Vorwärtsstreuung" ($q \rightarrow 0$) stark zu

b) Verhalten von $S(q)$ für:
 kleine, endliche q (d.h. kleine
 Streuwinkel)

→ erlaubt Einblick über die sogenannte
 Konditionsbeziehung

benutze Theorie von Onstein und Zenitz
 → genauere Beschreibung der
 Unt.opalineszenz

Onstein-Zenitz-Gleichung

$$h(n_1, n_2) = \underbrace{c(n_1, n_2)}_{\text{direkte Konditionsfunktion}} + \underbrace{g \int d\underline{n}_3 h(n_1, n_3) c(n_3, n_2)}_{\substack{\text{Faltung} \\ \rightarrow \text{indirekter Effekt}}}$$

totale Konditionsfunktion

strenge Begründung der OZ-Gleichung

↑
 (Onstein-Zenitz)

über Dichtefunktionaltheorie

Fouriertransformation der OE-Gleichung

$$\hat{h}(q) = \hat{c}(q) + g \hat{h}(q) \hat{c}(q)$$
$$\hat{h}(q) - g \hat{h}(q) \hat{c}(q) = \hat{c}(q)$$

OE-g.
im
Fourierwa

$$\hat{h}(q) (1 - g \hat{c}(q)) = \hat{c}(q)$$

$$\Leftrightarrow \hat{h}(q) = \frac{\hat{c}(q)}{1 - g \hat{c}(q)}$$

$$\Rightarrow S(q) = 1 + g \hat{h}(q)$$

$$= \frac{1}{1 - g \hat{c}(q)}$$

Zusammenhang
Strukturfaktor
— dichte
veränderungsfäh.

exakt

$$(S(q))^{-1} = 1 - g \hat{c}(q)$$

entwickelt um $q=0$

$$\hat{c}(q) = \int d\underline{r} e^{iq \cdot \underline{r}} c(\underline{r})$$

$$= 1 - g \hat{c}(0) + g \hat{c}^{(1)}(0) + \frac{g^2}{2} \hat{c}^{(2)}(0) + O(g^3)$$

wobei $\hat{c}(0) = \int d\underline{r} c(\underline{r})$

$$\hat{c}^{(1)}(0) = i \int d\underline{r} \underline{r} c(\underline{r}) = 0$$

versch. versch.
aus Symmetriegründe

$$\hat{c}^{(2)}(0) = -\frac{4\pi}{3} \int_0^\infty dr r^4 c(r)$$

$$\Rightarrow (S(q))^{-1} \approx 1 - g \hat{c}(0) + g^2 \hat{c}^{(2)}(0) q^2$$

um das genau auszuwerten, braucht man Information über $\hat{c}(q)$ bzw $c(\underline{r})$

einfachster Ansatz: $c(\underline{r}) = -\beta \psi(\underline{r})$
Potential

(begründbar
über Dichtefunktionaltheorie)

man sieht:
 $\tilde{c}(0), \tilde{c}^{(2)}(0)$ endlich für Konzentrations $c(r)$
 \Leftrightarrow für Konzentrations Parabol
 d.h. Abfall schnell,
 als r^{-4} !

$$\Rightarrow S(q) = \frac{1}{1 - \rho \tilde{c}(0) + \rho \xi \tilde{c}^{(2)}(0) q^2}$$

$$\approx \frac{a}{z^2 + q^2}$$

$$= 1 + \rho \tilde{h}(q)$$

wobei:

$$a = (\rho \xi \tilde{c}^{(2)}(0))^{-1}$$

$$z^2 = \frac{1 - \rho \tilde{c}(0)}{\rho \xi \tilde{c}^{(2)}(0)}$$

Rücktransformation in den
 Ortsraum ($\rightarrow u(r)$)

$$h(r) \sim \underline{e^{-r/\xi}}$$

mit $\xi = \frac{1}{z}$ Kondensat-
 länge



$$\xi = \frac{1}{z} = \frac{\sqrt{\rho \xi^2 c^2(0)}}{\sqrt{1 - \rho \bar{c}(0)}}$$

$$= \sqrt{\frac{\rho \xi^2 c^2(0)}{z^2 c^2(0)}} \sqrt{\frac{1}{1 - \rho \bar{c}(0)}}$$

$$= \sqrt{\frac{\rho \xi^2 c^2(0)}{z^2 c^2(0)}} \sqrt{\frac{1}{S(0)}} \quad !$$

$$\boxed{S(q) = 1 + \rho \bar{h}(q)} \\ = \frac{1}{1 - \rho \bar{c}(q)}$$

Beachte:

In der Nähe des krit. Punktes ($T \rightarrow T_c$) divergiert χ_T . Damit divergiert auch ξ .

Bei Annäherung an T_c werden räumliche Korrelationen "unendlich langreichweitig".

$$h(n) \sim \frac{e^{-n/\xi}}{n} \rightarrow \frac{1}{n} \quad \text{für } n \text{ sehr lange Reichweite!}$$

Beachte auch:

Im Rahmen der van-der-Waals Theorie hatten

wie gesehen $\chi_T \sim (T - T_c)^{-1}$

Damit folgt Satz $\xi \sim (T - T_c)^{-\frac{1}{2}}$

$\Rightarrow \frac{1}{2}$ ist der
vdW-Exponent
für ξ !