

Wh:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \in nN} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i$$

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

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

Spin-Spin-Korrelationsfunktion

ortsabhängige
magnet. Suszeptibilität

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-Näherung $(m_i = \tanh(\beta \sum_{j \in nN} J_{ij} m_j + \beta h_i))$

Ergebnis:

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

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

Oursen-Zernike-Näherung

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

(~~Langwellig~~ langwelliger Limes)

d.h. große Abstände im Ortsraum

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

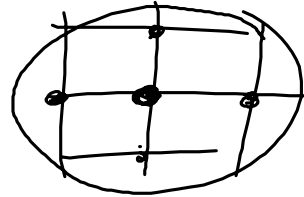
$$\tilde{J}(q) = \frac{1}{V} \int d\underline{r} J(\underline{r}) e^{-iq \cdot \underline{r}} \approx \frac{1}{V} \int d\underline{r} J(\underline{r}) - iq \cdot \frac{1}{V} \int d\underline{r} \underline{r} \cdot J(\underline{r}) - \frac{1}{2} \frac{1}{V} \int d\underline{r} (\underline{r} \cdot \underline{q})^2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

betrachte die einzelnen Terme

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

Mittelwert der Kopplung über eine Einheitszelle

erstreckt sich nun über nächste Nachbarn



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

↑
 Punktsymmetrie gegenüber dem betrachteten Gitterplatz

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

benutze:

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

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

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

Zusammenfassung:

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

werden vernachlässigt bei der
Ordnung-Zerlegung-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

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

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

Umschreiben =

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

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

Fourier-Rücktransformation:

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

Ergebnis:

$$\beta^{-1} \chi(r) = G(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{e^{-r/\xi}}{J' N} = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{e^{-r/\xi}}{N}$$

exponentieller
Abfall!

definiere die sogenannte Korrelationslänge

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

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

Verhalten bei Annäherung an T_c

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

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

• $T \xrightarrow{\quad} T_C$ d.h. $m \neq 0$

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

einsetzen 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 $\nu = \frac{1}{2}$!

Bemerkung

• der Ausdruck $G(r) \sim \frac{e^{-M_g r}}{r}$

gibt nur asymptotisch
 (d.h. für große Abstände r)

da wir ^{uns} bei Herleitung auf
 kleine Wellen q beschränkt haben!
 Zahlen

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:

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

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

z.B. $d=3$, 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 andere Systeme in dieser

Universalitätsklasse!

Insbesondere gilt es auch für Flüssigkeit dicht am Unt.-Punkt

Dirde-Dirde-Korrelationsfunktion

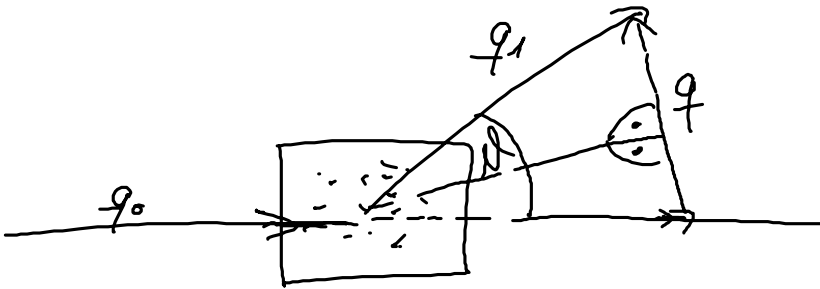
$$g(r) \sim (\langle g(r')g(r'') \rangle - \langle g(r') \rangle \langle g(r'') \rangle)$$

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 Streuereffekt

betrachte Streuexperiment (Röntgenstrahlung, Neutronenstrahlung, Licht, falls die Teilchen genügend groß sind (Kolloidsuspension))



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

es gilt:

$q = q_1 - q_0$ Streuvektor

$|q| = |q_0|$ elastische Streuung und $\sin \frac{\alpha}{2} = \frac{q/2}{q_1}$

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

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

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!)

Annahme: Im interessante Bereich von q variiert $f(q)$ nur schwach

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

D.h., die für die q -Abhängigkeit von $\tilde{I}(q)$ 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:

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

Damit:

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

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

aufßerdem:

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

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

benutze jetzt die Def. der Dicht-Dicht-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 Fouriertransformierte der Korrelationsfunktion!

Umschreiben:

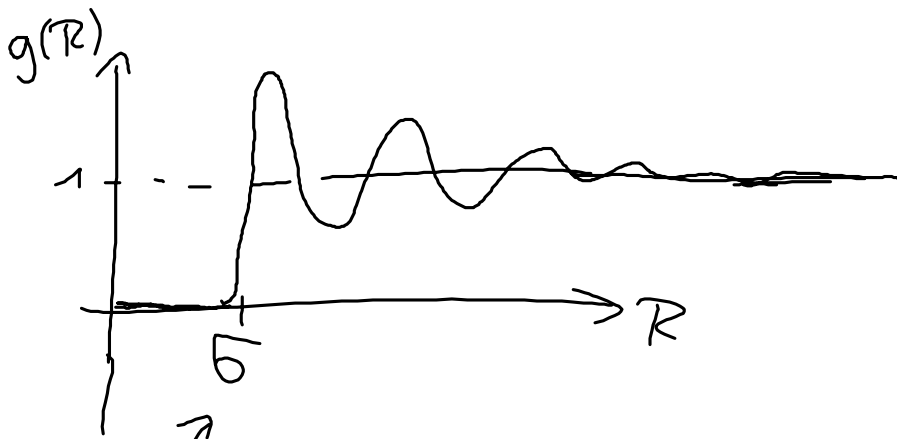
$$g(\underline{R}) = \overset{\text{Paarkorrelationsfkt.}}{\rho^{(2)}(\underline{R})} + \rho \delta(\underline{R}) - \rho^2 = \overset{\text{Paarkorrelationsfkt.}}{\rho^2} g(\underline{R}) + \rho \delta(\underline{R}) - \rho^2$$

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

Zweitelchendich

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

↑ totale Konzentration



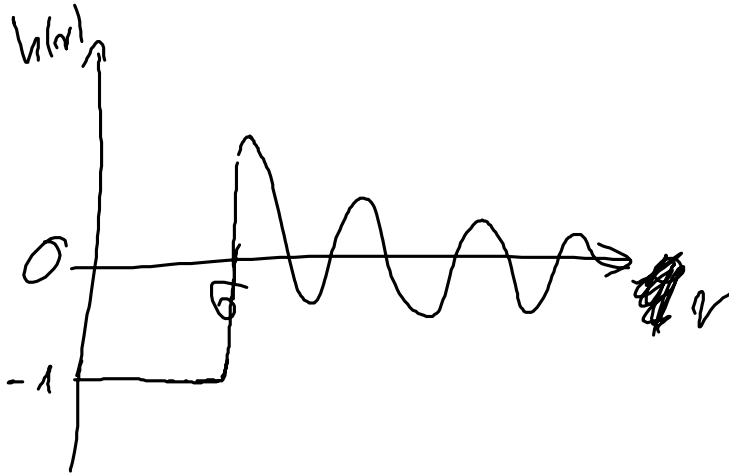
↑ Durchmesser eines Flüssigkeitsmoleküls

typisch:
Oszillationen mit einer
Wellenlänge von ungefähr
einem Teilchen Durchmesser!

→ lokale Struktur in
der Flüssigkeit

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

$$= \sum \hat{h}(q) + 1$$



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

