Ziel: Beschreibung des ersten Einsetzens der spinodalen Entmischung $\Leftrightarrow$ Domänenbildung

$\Downarrow$

Spontane raum-zeitliche Symmetriebrechung

Ausgangspunkt (1-Komponentiges System)

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho(\underline{r},t) = D\nabla\rho(\underline{r},t)\nabla\frac{\delta F[\rho]}{\delta\rho}}\quad \text{DDFT}$$

Kein äußeres Potential $\Rightarrow F[\rho] = F^{id} + F^{ex}$

$$F^{id} = k_BT\int d\underline{r}\,\rho(\underline{r})\ln(\lambda^3\rho(\underline{r})-1)$$

$$\nabla\frac{\delta F}{\delta\rho} = \frac{1}{\rho(\underline{r},t)}\nabla\rho(\underline{r},t) + \nabla c^{(1)}(\underline{r},t)$$

$$c^{(1)} \sim \frac{\delta F^{ex}}{\delta\rho}$$

Einsetzen

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\underline{r},t) = D\nabla^2\rho(\underline{r},t) - D\nabla\rho(\underline{r},t)\nabla c^{(1)}(\underline{r},t)$$

$$\rho(\underline{r},t) = \underbrace{\rho_b}_{\text{homogen zeitl. konstant}} + \underbrace{\tilde{\rho}(\underline{r},t)}_{\text{Störung}}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\tilde{\rho}(\underline{r},t) = D\nabla^2\tilde{\rho}(\underline{r},t) - D\rho_b \nabla^2 c^{(1)}(\underline{r},t) - D\nabla\tilde{\rho}(\underline{r},t)\nabla c^{(1)}(\underline{r},t)$$

Was ist $c^{(1)}(\underline{r},t)$

Idee: Entwickle diese Größe um ~~die~~ die Dichte $\rho(\underline{r},t) = \rho_b$ (also $\tilde{\rho} = 0$) herum

$$c^{(1)}(\underline{r},t) \overset{\uparrow}{=} \underbrace{c^{(1)}[\rho_b]}_{\text{räumlich konstant}} + \underbrace{\int d\underline{r}' \left.\frac{\delta c^{(1)}(\underline{r})}{\delta\rho(\underline{r}')}\right|_{\rho_b}}_{\text{Zweiteilchen-direkte Korrelationsfunktion eines homogenen Systems mit Dichte } \rho_b!} \overbrace{(\rho(\underline{r},t) - \rho_b)}^{\tilde{\rho}(\underline{r},t)} + O(\tilde{\rho}^2)$$

funktionale Taylorentwicklung

setze dies ein:

$$\frac{\partial \tilde{\rho}(\underline{r},t)}{\partial t} = D\nabla^2\tilde{\rho}(\underline{r},t) \cancel{- D\rho_b\nabla^2 c^{(1)}[\rho_b]} \leftarrow \text{da } c^{(1)}[\rho_b] = \text{const}$$

$$(*) \quad - D\rho_b\nabla^2\int d\underline{r}'\, c^{(2)}(|\underline{r}-\underline{r}'|;\rho_b)\,\tilde{\rho}(\underline{r}',t)$$

$$\cancel{- D\nabla\tilde{\rho}(\underline{r},t)\nabla c^{(1)}[\rho_b]}$$

$$\cancel{- D\nabla\tilde{\rho}(\underline{r},t)\nabla\int d\underline{r}'\, c^{(2)}(|\underline{r}-\underline{r}'|;\rho_b)\,\tilde{\rho}(\underline{r}',t)}$$

Annahme: Störungen $\tilde{\rho}(\underline{r},t) = \rho(\underline{r},t) - \rho_b$ klein!

$\Longrightarrow$ linearisiere (*) in $\tilde{\rho}$!

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\rho}(\underline{r},t) = D\nabla^2\tilde{\rho}(\underline{r},t) - D\rho_b\nabla^2\int d\underline{r}'\, c^{(2)}(|\underline{r}-\underline{r}'|;\rho_b)\,\tilde{\rho}(\underline{r}',t)}$$

linearisierte Gleichung für die Zeitentwicklung der Dichtefluktuationen!

Vereinfachung durch Fouriertransformation

$$\tilde{\rho}(\underline{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\underline{k}\, e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}}\,\bar{\rho}(\underline{k},t)$$

$$c^{(2)}(|\underline{r}-\underline{r}'|;\rho_b) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\underline{k}\, e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}}\, c(|\underline{k}|)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\bar{\rho}(\underline{k},t) = D\left(-k^2\bar{\rho}(\underline{k},t)\right) + D\rho_b k^2 c(k)\,\bar{\rho}(\underline{k},t)$$

$$= R(k)\,\bar{\rho}(\underline{k},t)$$

lineare, homogene DGL in der Zeit

mit $R(k) = -Dk^2 + Dk^2\rho_b\, c(k)$

Lösung:

$$\boxed{\bar{\rho}(\underline{k},t) = \bar{\rho}(\underline{k},0)\,e^{R(k)t}}$$

Interpretation:

Dichtefluktuationen wachsen exponentiell mit der Zeit an, falls $R(k) > 0$ für irgendein k

$\Longleftrightarrow$ Eintreten der spinodalen Entmischung

$R(k) \triangleq$ "Wachstumsrate"

$R(k) \leq 0$ für alle k $\Rightarrow$ System stabil gegen raumzeitl. Fluktuation

~~R(k)~~

$R(k) > 0$ für einen bestimmten Bereich in $k > 0$ $\rightarrow$ Domänenbildung

Beachte

$$R(k) = -Dk^2 \left(1 - \rho_b c(k)\right)$$

$$= -Dk^2 \frac{1}{S(k)}$$

$\leftarrow$ statischer Strukturfaktor