

$$g_{ij} = \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \quad \text{Korrelationsfkt.}$$

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

Suszeptibilität

translates invariant  
→ Fourierraum  
Auswertung

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

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

mit  $a = \frac{\beta}{|\beta J|}$

"Oursin-Zumike-Näherung"

$T \rightarrow T_c$   
 $q \rightarrow 0$

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

"Rücktrafo":  $g(n) \sim \frac{a e^{-zN}}{N}$

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

Verhalten von  $\xi$  bei Annäherung an  $T_c$ :

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

$$\xi = \sqrt{\frac{|\beta J|}{1 - \beta J}} = \sqrt{\frac{|J|}{k_B T (1 - \frac{T_c}{T})}} = \sqrt{\frac{|J|}{k_B (T - T_c)}}$$

$$\sim \underbrace{\sqrt{\frac{|J|}{k_B T_c}}}_{\xi} \left( \frac{T - T_c}{T_c} \right)^{-\frac{1}{2}} \sim \xi^{-\frac{1}{2}}$$

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

Krit. Exponent der Korrelationslänge

Erinnerung:

$$\beta J = \beta \frac{J}{k_B T} = \frac{T_c}{T}$$

$$T \leq T_c : m \neq 0, m^2 \underset{T \rightarrow T_c}{\approx} 3 \frac{T^2}{T_c^2} (T_c - T)$$

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

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

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad \frac{T}{T_c} \approx 1$$

$$\sim 2 \left( \frac{T_c - T}{T_c} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

↑  
Amplitude

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

### Bemerkungen

- beachte:  $\xi \rightarrow \infty$  bedeutet (für festes  $n$ ),  $\left( e^{-\frac{1}{\xi^n}} \rightarrow 1 \right)$   
dass  $g(n) \sim \frac{1}{N}$  !!

• 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.  $\tilde{G}(q)$   
und  $\tilde{\chi}(q)$

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

Bei der Rücktransformation  $\tilde{\chi}(q) \rightarrow \chi(r) \sim G(r)$   
geht die Raumdimension ein!

bisher betrachtet:  $d=3$

allgemeiner:

$$G(r) \sim \int dq e^{iq \cdot r} \tilde{G}(q)$$

Umwandlung in  
Kugelkoordinaten

$$\sim \int dq q^{d-1} \tilde{G}(q) \frac{\int_{d/2-1}^{d/2-1}(qn)}{(qn)^{d/2-1}} \quad \begin{array}{l} \text{mit } q=|q| \\ \text{Besselfunktion} \\ \text{erster Art} \end{array}$$

Ergebnis der Winkelintegrale

Betrachte 2 Grenzfälle

a)  $z = \frac{1}{\xi}$  fest,  $N \rightarrow \infty$

$$\Rightarrow G(r) \sim \frac{e^{-zr}}{r^{d-1}}$$

entspricht für  
 $d=3$  dem  
alten Ergebnis

b)  $N$  fest und groß,  $z \rightarrow 0$  ( $\Leftrightarrow \beta \rightarrow \infty$ )

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

• 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  $\beta \rightarrow \infty$ ,  $N$  fest

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

Dabei ist  $\eta$  der sogenannte "Fisher"-Exponent

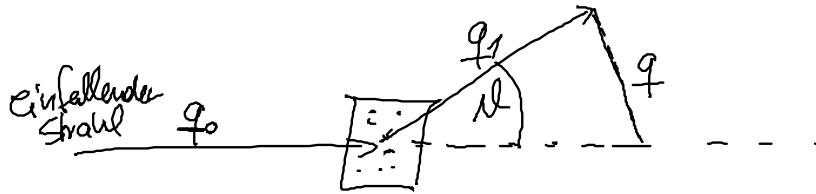
(M.E. Fisher)  
 ~~$\eta$~~   $\eta$  bildet kleine Korrekturen

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 des Flüssigkeits

Es gilt:

$$q = q_1 - q_0 \quad \text{mit} \quad |q_1| = |q_0|, \quad \sin \frac{\alpha}{2} = \frac{q}{2q_1}$$

elastisch Streuung

$$\Rightarrow q = 2q_1 \sin \frac{\alpha}{2} = 2q_0 \sin \frac{\alpha}{2} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\alpha}{2}$$

$q_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$

Intensität des gestreuten Strahls:

$$I(\alpha) = I(q)$$

$$\nearrow = I_0 f(q) S(q)$$

Ansatz

wobei  $f(q)$  "Formfaktor" (da abhängig von der  
Form der Teilchen)

$S(q)$ : Strukturfaktor

Zum Formfaktor:

„Einteilcheneigenschaften“

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

Born'sche Näherung

Formfaktorenformale des  
Wechselwirkung zw.  
Strahlung und Fluid-Teilchen!  
enthält  
nicht: Wechselwirkungen zw.  
den Fluid-Teilchen!

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

es gibt Näherungsweise-Konstante im  $q$ -Raum

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

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

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

Verbindung zu räuml. Korrelationen?

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

definieren:

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

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

Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion =

$$g(\underline{r}) = \frac{\langle \hat{\rho}(\underline{r}) \hat{\rho}(\underline{0}) \rangle - \langle \hat{\rho}(\underline{r}) \rangle \langle \hat{\rho}(\underline{0}) \rangle}{\rho^2}$$

Aus  $\textcircled{P}$

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

$\textcircled{**}$

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

benutzt außerdem:  $d(\underline{q}) = \int d\underline{R} e^{i\underline{q} \cdot \underline{R}}$

und: nehme an, dass System im Mittel translationsinvariant

$$\int d\underline{r} \int d\underline{r}' \langle \hat{\rho}(\underline{r}) \hat{\rho}(\underline{r}') \rangle \rightarrow V \int d\underline{R} \langle \hat{\rho}(\underline{R}) \hat{\rho}(\underline{0}) \rangle$$

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

Einsetzen in  $(*)$

$$\Rightarrow S(q) = \frac{1}{\langle N \rangle} \int d\mathbf{R} \langle \hat{\rho}(\mathbf{R}) \hat{\rho}(0) \rangle e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} - \rho \int d\mathbf{R} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} \quad \rho = \frac{N}{V}$$

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

$g(\mathbf{R})$

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

im homogenen System !!

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

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

Exakt!

Häufig schreibt man  $(*)$  noch etwas um

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



Translation-invarianz

$$\begin{aligned}
 &= \langle \hat{\rho}(\underline{r}) \hat{\rho}(\underline{r}') \rangle - \rho^2 \\
 &= \left\langle \sum_{i=1}^N d(\underline{r} - \underline{r}_i) \sum_{j=1}^N d(\underline{r} - \underline{r}_j) \right\rangle - \rho^2 \\
 &= \underbrace{\left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N d(\underline{r} - \underline{r}_i) d(\underline{r} - \underline{r}_j) \right\rangle}_{\text{Zweipunktendicht}} + \left\langle \sum_{i=1}^N d(\underline{r} - \underline{r}_i) d(\underline{r}' - \underline{r}_i) \right\rangle - \rho^2 \\
 &\quad \downarrow \\
 &\quad \rho^{(2)}(\underline{r}, \underline{r}') \\
 &\quad = \rho^{(2)}(\underline{r} - \underline{r}') \\
 &\quad = \rho^{(2)}(\underline{R})
 \end{aligned}$$

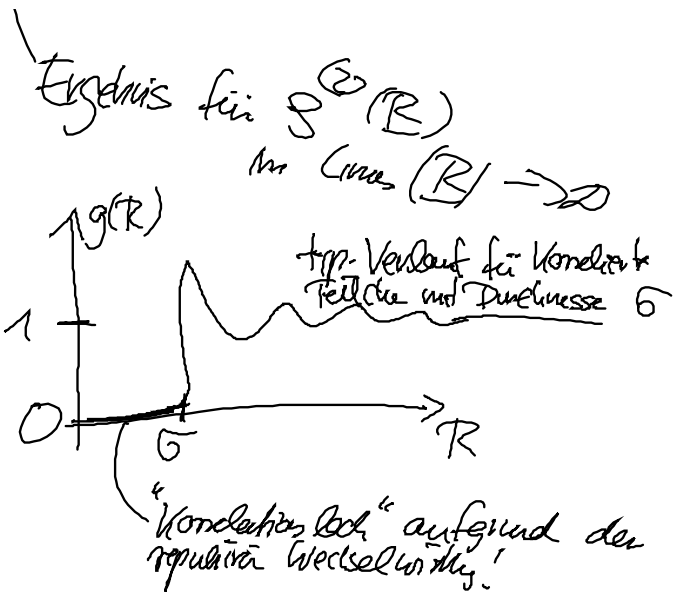
$$\Rightarrow \rho(\underline{R}) = \underbrace{\rho^{(2)}(\underline{R})}_{\text{Zweipunktendicht}} + \rho d(\underline{R}) - \rho^2$$

das ist die "eigentliche interessierende Größe!"

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

man definiert nun weiter:

$$\rho^{(2)}(\underline{R}) = \int \rho^2 g(\underline{R}) \quad \text{Korrelationsfunktion}$$



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

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

$$= \rho^2 (g(\mathbb{R}) - 1) + \rho \delta(\mathbb{R})$$

$h(\mathbb{R})$   
 („totale Korrelationsfunktion“)

$h \neq 0 : g(\mathbb{R}) \neq 1$   
 $\hat{=}$  Vorhandensein echter  
 Zweiteilchenkorrelation!

Zurück zum Strukturfaktor.

$$\begin{aligned}
 S(q) &= \frac{1}{\mathcal{V}} \int d\mathbf{R} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} g(\mathbf{R}) \\
 &= \frac{1}{\mathcal{V}} \int d\mathbf{R} \left( \rho^2 e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} h(\mathbf{R}) + \rho \delta(\mathbf{R}) \right) \\
 &= \rho \hat{h}(q) + 1
 \end{aligned}$$

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

Verhalten im Grenzfall  $|q| \rightarrow 0$

$$\begin{aligned}
 S(q \rightarrow 0) &= 1 + \rho \hat{h}(q \rightarrow 0) \\
 &= \frac{1}{\mathcal{V}} \hat{g}(q \rightarrow 0) = \frac{1}{\mathcal{V}} \int d\mathbf{R} g(\mathbf{R}) \\
 &= \frac{1}{\mathcal{V}} \int d\mathbf{R} \left\langle \sum_{i=1}^N d(\mathbf{R} - \mathbf{r}_i) \sum_{j=1}^N d(\mathbf{0} - \mathbf{r}_j) \right\rangle \\
 &\quad - \rho \int d\mathbf{R} \\
 &= \frac{1}{\mathcal{V}} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \left\langle \sum_{i=1}^N d(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \sum_{j=1}^N d(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) \right\rangle
 \end{aligned}$$

Dichte-Dichte-Korrelationsfkt.

$$= \frac{1}{\Omega V} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \underbrace{\int_{\Omega} d\mathbf{r} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)}_1 \underbrace{\int_{\Omega} d\mathbf{r} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)}_{-\Omega V} \rangle$$

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

$$\int_{\Omega} d\mathbf{r} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

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

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

Relative  
kleine Menge  
den Teil der Zahl!

