

Korrelationsfunktionen und Wechselwirkungen

URS GASSER | GEORG MARET | PETER KEIM

Dieses Dokument enthält Ergänzungen zum Artikel „Das Schmelzen zweidimensionaler Kristalle“ in *Physik in unserer Zeit*, 39. Jahrgang 2008, Nr.1, S. 36.

Translationskorrelationsfunktion

Als Maß für die diskrete Translationssymmetrie eines Kristalls wird die Translationskorrelationsfunktion

$$G_T(r) = \langle \rho_G(\mathbf{R}) \rho_G^*(0) \rangle$$

mit

$$\rho_G(\mathbf{R}) = \exp [i\mathbf{G} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{R})]$$

verwendet. Dabei ist \mathbf{G} ein reziproker Gittervektor minimaler Länge und $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ die Verrückung eines Partikels von seinem Gitterplatz \mathbf{R} . In drei Dimensionen strebt $G_T(r)$ für große Abstände r gegen einen konstanten Wert >0 ; die Ordnung ist langreichweitig. In zwei Dimensionen zerfällt $G_T(r)$ algebraisch:

$$G_T(r) \propto r^{-\eta_T}.$$

Ein solcher algebraischer Abfall der Korrelation wird als quasi-langreichweitige Ordnung bezeichnet. In der Flüssigkeit ist die Ordnung kurzreichweitig, entsprechend ist der Abfall exponentiell:

$$G_T(r) \propto e^{-r/\xi_T}$$

wobei ξ_T die Korrelationslänge ist.

Orientierungskorrelationsfunktion

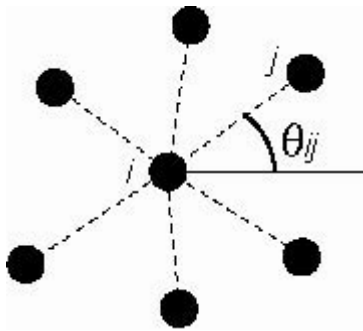


Abb. 1 Schematische Darstellung eines Partikels i mit seinen nächsten Nachbarn, die mit j indiziert sind. Zur Berechnung der Orientierungsordnung werden die Winkel θ_{ij} verwendet.

Auf mikroskopischer Ebene lässt sich die Orientierungsordnung eines Materials anhand des Parameters

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_j \exp[i6\theta_j(\mathbf{r})]$$

quantitativ erfassen. Dabei läuft der Index j über die N nächsten Nachbarn des Teilchens am Ort \mathbf{r} , und $\theta_j(\mathbf{r})$ ist der Winkel zwischen $\mathbf{r}_j - \mathbf{r}$ und einer fixen Richtung, zum Beispiel der x -Achse. Die Orientierungskorrelationsfunktion

$$G_6(\mathbf{r}) = \langle \psi(\mathbf{r}) \psi^*(0) \rangle$$

gibt für den Fall von sechs Nachbarn an, wie groß die Reichweite der Orientierungsordnung ist. In einem 2D-Kristall strebt $G_6(\mathbf{r})$ gegen eine Konstante > 0 , das ergibt eine langreichweitige Ordnung. In der hexatischen Phase wird dagegen ein algebraischer Abfall

$$G_6(\mathbf{r}) \propto r^{-\eta_6},$$

beobachtet, also quasi-langreichweitige Ordnung. Beim Phasenübergang hexatisch-flüssig erreicht der Exponent den kritischen Wert $\eta_6(T_i) = 1/4$ und in der flüssigen Phase gilt

$$G_6(\mathbf{r}) \propto e^{-r/\xi_6},$$

also kurzreichweitige Ordnung; ξ_6 ist dabei die Korrelationslänge der Orientierungsordnung.

Dipol-Dipol-Wechselwirkung

Die Stärke der magnetischen Wechselwirkung Γ zwischen den Kolloidpartikeln wird als Quotient der potentiellen magnetischen Energie benachbarter Partikel E_{magn} und der thermischen Energie $k_B T$ definiert:

$$\Gamma = \frac{E_{\text{magn}}}{k_B T} = \frac{\mu_0 \chi^2 H^2 (\pi \rho)^{3/2}}{4\pi k_B T} \propto \frac{1}{T_{\text{eff}}},$$

wobei k_B die Boltzmann-Konstante und ρ die Anzahldichte der Kolloide in zwei Dimensionen sind, μ_0 ist die Induktionskonstante und χ die magnetische Suszeptibilität. Γ kann somit auch als inverse effektive Temperatur T_{eff} verstanden werden.

Wechselwirkung zwischen zwei Defekten

Um zu bestimmen, ob die Wechselwirkung zwischen zwei Defekten ausreicht, um diese aneinander zu binden, betrachtet man zwei topologische Defekte in einem Kristall und ermittelt deren mittleren quadratischen Abstand:

$$\langle r \rangle = \frac{\int d^2 r \cdot r^2 \exp[-\beta H_D(r)]}{\int d^2 r \exp[-\beta H_D(r)]} = \frac{2 - c_D}{4 - c_D} a_c^2.$$

Dieser Ausdruck divergiert für $c_D = 4$. Ein divergierender Abstand bedeutet aber gerade, dass die Defekte dissoziieren und nicht mehr gebunden sind. Dies heißt aber auch, dass die betrachtete Phase – Kristall bei Dislokationen, hexatische Phase bei Disklinationen – schmilzt. Die Bedingung $c_D = 4$ liefert einen Zusammenhang zwischen den Kopplungskonstanten und der Übergangstemperatur T_m . Man erhält

$$c_D(T \rightarrow T_m) = \lim_{T \rightarrow T_m} \frac{K(T) a_0^2}{k_B T} = 16\pi$$

für Dislokationen, wobei K das Youngsche Elastizitätsmodul und a_0 die Gitterkonstante sind, und

$$c_D(T \rightarrow T_m) = \lim_{T \rightarrow T_m} \frac{F_A(T)}{k_B T} = \frac{72}{\pi}$$

für Disklinationen, mit der Frank-Konstanten F_A .