

Диссертационная работа на соискание учёной
степени доктора физико–математических наук по
специальности 01.04.07 – физика
конденсированного состояния

**Неравновесная динамика стекольного
перехода в квази-неэргодической
конденсированной системе**

М. Г. Васин

2011

Содержание

Введение	7
1 Стекло и стекольный переход (теоретические и экспериментальные исследования процесса стеклования)	12
1.1 Введение	13
1.2 Экспериментальные наблюдения	14
1.2.1 Восприимчивость (линейный и нелинейный вклады)	14
1.2.2 Температурная зависимость теплоёмкости	17
1.2.3 Зависимость температуры стеклования от скорости закалки	18
1.2.4 Расходимость времени релаксации системы, закон Фогеля-Фулчера-Таммана	21
1.2.5 Временная корреляционная функция	23
1.3 Теоретические подходы к описанию стеклования	25
1.3.1 Энтропийная модель	25
1.3.2 Теория энергетического рельефа	27
1.3.3 Теория “свободного” объёма	28
1.3.4 Упругая модель	30
1.3.5 Теория связанных мод (mode-coupling theory)	31
1.3.6 Теория Адама-Гиббса-Ди-Марцио (АГДМ)	35
1.3.7 Метод реплик	39
1.4 Ультраметричное пространство состояний (“долин”)	42
1.4.1 Теория ограниченных фрустрациями флуктуаций	43

1.5	Гелеобразование	50
1.6	Связь между процессом образования слабого геля и сте- кольным переходом	52
1.7	Выводы к главе 1	56
2	Неравновесная динамика квази-неэргодической конден- сированной системы	57
2.1	Введение	58
2.2	Метод динамического производящего функционала . . .	59
2.3	Келдышевская техника	61
2.3.1	Келдышевский функционал	62
2.4	Динамическое решение неупорядоченной мягкой модели спинового стекла методом келдышевского функционала .	65
2.4.1	Вывод уравнения теории связанных мод	65
2.4.2	Исследование модели в парамагнитной области . .	69
2.5	Функция Грина квази-неэргодической системы многих тел	71
2.6	Теоретическое описание кроссовера жидкость–слабый гель в стеклообразующей системе	75
2.7	Выводы к главе 2	79
3	Описание перехода спиновая жидкость–стекло в моде- ли Эдвардса–Андерсона с помощью метода неравновес- ной критической динамики	81
3.1	Формулировка модели в рамках метода динамического производящего функционала	83
3.2	Коррелятор поля J	85

3.3	Формулировка модели с помощью Келдышевского формализма	86
3.4	Процедура перенормировки	89
3.4.1	Перенормировка $\Gamma_{\alpha\beta}$	93
3.4.2	Система уравнений ренормгруппы при $t \ll \tau_{\alpha\beta}$. .	94
3.4.3	Система уравнений ренормгруппы при $t \gg \tau_{\alpha\beta}$. .	97
3.4.4	Сшивка решений	98
3.5	Недостатки предложенного подхода.	100
3.6	Выводы к главе 3	102
4	Описание неупорядоченной конденсированной системы с помощью теории дефектных состояний ориентационного порядка	103
4.1	Введение	104
4.2	Модель	105
4.3	Континуальная теория дефектов	108
4.3.1	Основные положения континуальной теории дефектов	110
4.4	Лагранжиан системы дисклиний	113
4.5	Нарушение симметрии	116
4.6	Поле линейной дисклинии (квазистационарное приближение)	121
4.7	Топологический момент	123
4.8	Взаимодействие между топологическими моментами . . .	127

4.8.1	Взаимодействие между дисклинационными топологическими моментами	128
4.9	Параметр порядка	131
4.10	Описание стеклования в дисклинационных системах . . .	133
4.11	Выводы к главе 4	146
5	Калибровочная теория стекольного перехода во фру- стрированной 3D модели Гейзенберга	148
5.1	Введение	149
5.2	Формулировка калибровочной модели	151
5.3	Исследование неравновесной динамики модели	154
5.4	Ренормализационная группа	156
5.5	Нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ)	162
5.6	Оценка линейного и нелинейного вклада в восприимчи- вость	164
5.7	Теплоёмкость	167
5.8	Зависимость температуры стеклования, T_g^* , от скорости охлаждения, v	170
5.9	Корреляционная функция $\langle \phi \phi \rangle_t$ вблизи температуры стек- лования	172
5.10	Вывод уравнения теории связанных мод	174
5.11	Феноменологическая интерпретация калибровочной тео- рии стекольного перехода	176
5.12	Выводы к главе 5	180
	Заключение	182

Публикации по теме диссертации	188
Список литературы	191

Введение

Стекло известно человечеству очень давно, начиная со времён древней Египетской цивилизации, но предметом интенсивных исследований оно стало лишь в конце прошлого века. Существуют различные методы получения аморфного твёрдого состояния. Однако обычно стекло формируется охлаждением жидкости со скоростью, не позволяющей ей успеть закристаллизоваться. Этот процесс называют стекольным переходом. Стекольные переходы долгое время оставались неизвестными большинству физиков и почти не упоминались в учебниках по физике конденсированного состояния. Ситуация изменилась в 80-х годах прошлого столетия, когда исследования аморфных полупроводников и спиновых стёкол привели к росту интереса к стёклам вообще и процессам их формирования в частности. Сегодня область применения стёкол широка, начиная от прочных металлических стёкол на основе циркония до халькогенидных стекол в Blu-ray и HD-DVD дисках. К сожалению, на современном этапе развития физики конденсированного состояния, достижения в этой области в значительной степени строятся на методе проб и ошибок вследствие плохого понимания физики процесса стеклования. В теоретических исследованиях сложных неэргодических конденсированных систем, к которым относятся жидкофазные системы и стёкла, доминирующими стали методы компьютерного моделирования, позволяющие на молекулярном уровне проследить за протекающими в подобных системах сложными микроскопическими процессами. Однако, до сих пор не существует

теории, позволяющей качественно и количественно описывать стекольный переход. Поэтому, для более глубокого понимания физики этого процесса и объяснения наблюдаемых универсальных особенностей поведения стеклующихся систем, необходимо дальнейшее развитие аналитических методов их теоретического описания.

Центральный вопрос физики стекольного состояния можно сформулировать следующим образом: является ли стекольный переход фазовым переходом, или его природа является исключительно динамической? Стекольный переход, с непрерывным изменением объёма и энтропии и резким изменением их производных, похож на фазовый переход второго рода по классификации Эренфеста. Но этот переход не сопровождается появлением у системы дальнего порядка, расходимостью восприимчивости и зависит от скорости охлаждения системы, что не позволяет отнести его к полноценным фазовым переходам. Кроме того, релаксационные процессы при стекольном переходе описывается формулой Фогеля-Фулчера-Таммана, а не степенным выражением, характерным для динамики в критической точке. Однако, описание стекольного перехода, как динамического эффекта, при котором стекольное состояние не является термодинамической фазой, не может объяснить расходимость нелинейной восприимчивости и неаррениусовское поведение температурной зависимости времени релаксации при температуре стеклования.

Ключом к ответу на эти вопросы считается тот факт, что время релаксации системы вблизи стекольного перехода расходится. В этом случае система является неравновесной и неэргодической, поскольку

время релаксации настолько велико, что она не может достигнуть равновесного состояния за время наблюдения, а физические свойства системы зависят от кинетики протекающих процессов. В диссертации рассмотрены квази-неэргодические конденсированные системы. Физическая система является *квази-неэргодической*, если время её релаксации соизмеримо со временем наблюдения, $\hat{t}$. В этом случае, на конечных макроскопических временах система демонстрирует свойства неэргодической системы, оставаясь эргодической в статическом пределе, $\hat{t} \rightarrow \infty$. Результаты исследований таких систем зависят от характерного временного масштаба эксперимента, например, времени наблюдения или частоты наложенного на систему внешнего возмущения. Строго говоря, любая физическая система на временных масштабах меньших чем время её релаксации является квази-неэргодической, но на практике это не вызывает проблем из-за малости времени релаксации по сравнению с временами наблюдения. Однако, в некоторых случаях эту проблему не удаётся обойти, например, при исследовании систем, находящихся вблизи стекольного перехода. Это в корне отличает задачу описания стекольного перехода от равновесной, в которой обычно рассматривается статический предел. Её решение требует развития фундаментальных представлений о неравновесной динамике замерзания сложных неэргодических систем и привлечения новых методов статистической физики, выходящих за рамки устоявшихся в данной области теоретических подходов.

Цель работы и решаемые задачи.

Цель работы — Теоретическое описание стекольного перехода в квази-неэргодических конденсированных системах. Развитие методов квантовой теории поля, неравновесной динамики и флуктуационной теории фазовых переходов для их применения в физике стекольных переходов. Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

1. Разработать метод описания неравновесной динамики квази-неэргодической конденсированной системы, учитывающий ультраметрическую структуру пространства состояний и основанный на современных методах неравновесной динамики и квантовой теории поля.
2. Провести аналитическое исследование релаксационной динамики неравновесной квази-неэргодической системы, находящейся вблизи фазового перехода второго рода.
3. Построить теоретическую модель стекольного перехода в конденсированной системе, не требующую априорного задания ультраметрической структуры пространства состояний.
4. Провести аналитическое исследование сформулированной модели с помощью методов неравновесной динамики и динамической флуктуационной теории фазовых переходов в области температур, близких к переходу жидкость-стекло.

Структура диссертации

Изложение материала в диссертации построено следующим образом:

После постановки целей и задач, изложенной во *введении*, в *первой главе* приводится обзор основных экспериментально наблюдаемых свойств стекольного перехода и теоретических методов его описания.

Во *второй главе* дано краткое введение в основные методы неравновесной динамики, использованные в данной работе, и обсуждается возможность использования этих методов для описания квази-неэргодических фрустрированных систем. В качестве примера использования метода динамического производящего функционала, исследуется осцилляции неравновесной системы вблизи фазового перехода второго рода.

В *третьей главе* рассматривается неравновесная критическая динамика скалярной модели с иерархией времён релаксации.

В *четвёртой главе* рассматривается описание неупорядоченной конденсированной системы с помощью теории дефектных состояний ориентационного порядка, после чего полученные результаты используются для описания процесса замораживания в системе дефектов.

В *пятой главе* на примере спиновой фрустрированной системы предложено теоретическое описание стеклования без априорного задания иерархии времён релаксации, построенное на основе калибровочной модели спинового стекла.

В заключении приведены основные выводы и выносимые на защиту положения.

1 Стекло и стекольный переход (теоретические и экспериментальные исследования процесса стеклования)

В этой главе приводится обзор основных экспериментально наблюдаемых свойств, характерных для стекольного перехода, обсуждается вопрос об *универсальности* стекольного перехода в котором драматическим образом сочетаются как характерные черты термодинамических фазовых переходов, так и признаки, говорящие о его динамической природе. За тем кратко изложены основные теоретические подходы к описанию стеклования. В заключение обсуждаются связь между процессами стекольного перехода и гелеобразования.

1.1 Введение

Стекло — структурно-аморфное вещество, агрегатно относящееся к разряду твёрдых тел. Стеклообразное состояние — твёрдое аморфное метастабильное состояние вещества, в котором нет выраженной кристаллической решётки, условные элементы упорядочения структуры наблюдаются лишь в “среднем порядке” (кластеры размера порядка одной–двух координационных сфер). В отличие от жидкого состояния стекольное состояние является неравновесным, поскольку его характерное время релаксации значительно превосходит время наблюдения.

Обычно стекло формируется при охлаждении жидкости со скоростью не позволяющей ей успеть закристаллизоваться. Этот процесс называют стекольным переходом. Стекольные переходы долгое время оставались неизвестными большинству физиков и почти не упоминались в учебниках по физике конденсированного состояния. Ситуация изменилась в 80-х годах прошлого столетия, когда исследования аморфных полупроводников и спиновых стёкол привели к бурному росту интереса к стёклам вообще и процессам их формирования в частности. Стекольная динамика различных типов неоднократно наблюдалась в совершенно различных системах, начиная от высокомолекулярных систем и неупорядоченных магнитных систем, заканчивая экономическими моделями и нейросетями. В 90-х годах исследования в области “вязких жидкостей и стекольных переходов” оформились в полноценное направление исследований физики конденсированного состояния вещества и привело к появлению большого количества фундаменталь-

ных проблем, многие из которых не решены до сих пор.

Как уже было сказано выше, центральной проблемой физики стекольного состояния остаётся поиск ответа на открытый вопрос: является ли стекольный переход фазовым переходом, или его природа является исключительно динамической? Стекольный переход, с одной стороны, похож на фазовый переход второго рода, но с другой стороны, обладает характерными свойствами, позволяющими утверждать, что состояние стекла не является термодинамической фазой, а представляет собой лишь результат резкого уменьшения подвижности атомов. Для того чтобы дать некоторое представление об этих экспериментальных данных и их интерпретации далее приводится обзор основных экспериментально наблюдаемых свойств стекольных переходов, а также некоторые подходы к их теоретическому описанию.

1.2 Экспериментальные наблюдения

1.2.1 Восприимчивость (линейный и нелинейный вклады)

Спиновые стёкла стали модельными объектами исследования благодаря наибольшему, по сравнению с другими типами стекольных систем, прогрессу в их теоретическом описании. С одной стороны, при описании спиновых стёкол можно использовать довольно простые модели, с другой стороны, спиновые стёкла демонстрируют на эксперименте характерные особенности, присущие всем стекольным системам.

Магнитная восприимчивость, является очень удобным физическим свойством в случае спиновых систем, поскольку может быть экспериментально измерено и, в то же время, хорошо определено теоретиче-

ски. При этом, восприимчивость очень чётко демонстрирует особенность стекольного перехода, заключающуюся в том, что два вклада в восприимчивость, линейный, χ_l , и нелинейный, χ_{nl} , ведут себя по-разному: при приближении температуры к T_g линейная восприимчивость резко возрастает, но не расходится, как это должно было бы быть при фазовом переходе второго рода, а достигает конечного максимального значения в T_g (рис. 1), нелинейный же вклад в восприимчивость

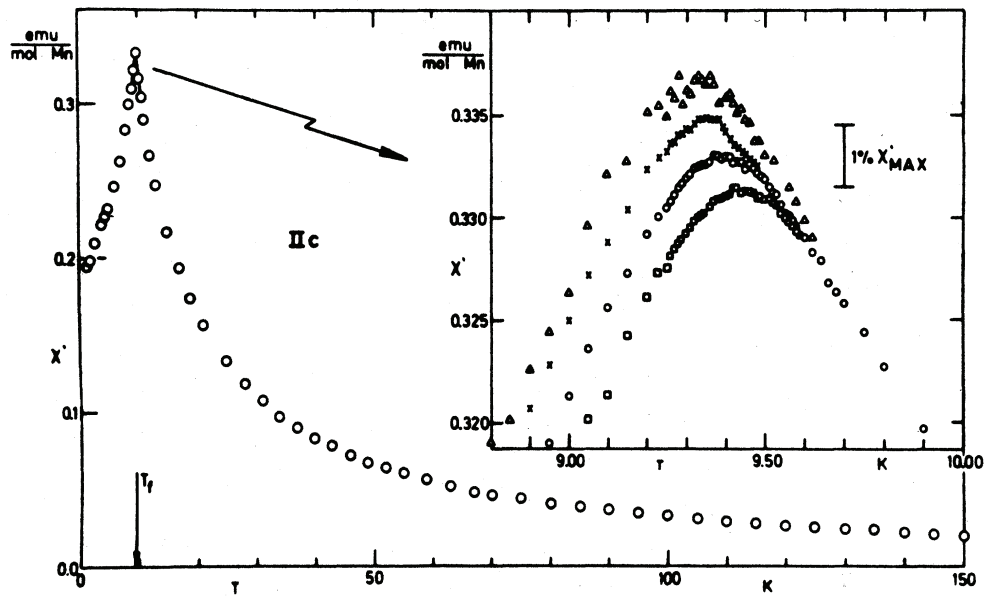


Рис. 1: Реальная часть χ' комплексной восприимчивости $\chi(\omega)$ как функция температуры (CuMn с 0.94 атомных процентов Mn) [2].

испытывает гигантский скачок вблизи температуры стеклования T_g (рис. 2), и, в отличие от линейной части восприимчивости, может быть описан как расходящаяся в T_g функция $1/(T - T_g)^\gamma$. Показатель γ не является универсальным, в различных экспериментальных и теоретических работах его значение варьируется в диапазоне $1 < \gamma < 4$ [4].

Первыми экспериментальными данными по стекольному переходу в спиновых системах, не согласующимися с простой картиной фазового

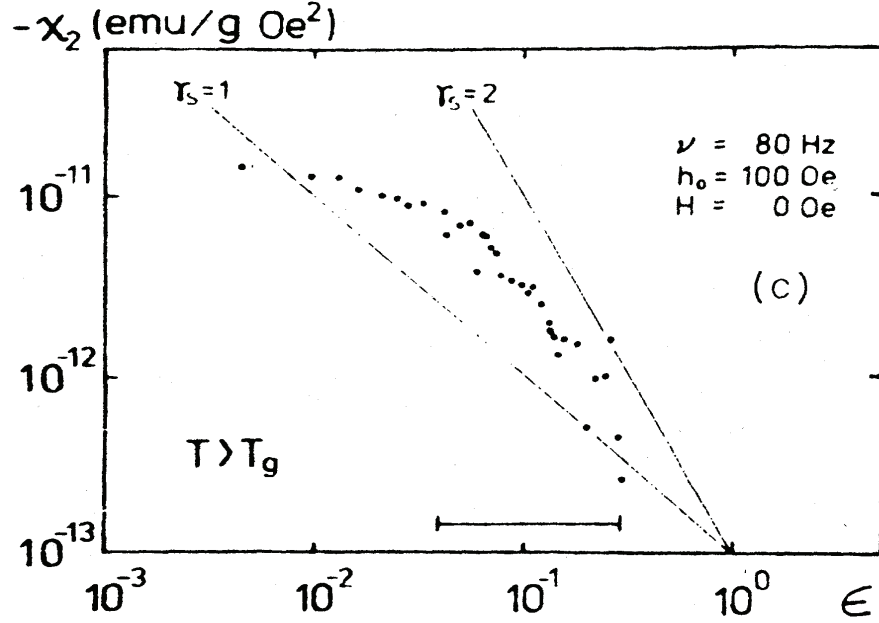


Рис. 2: Log-Log график зависимости нелинейной магнитной восприимчивости χ_{nl} от $\epsilon = |T - T_g|/T_g$ для сплава AuFe с содержанием 0.97 атомных процентов железа [3].

перехода, были результаты исследований частотной зависимости положения излома частотной восприимчивости. При фазовом переходе восприимчивость должна испытывать излом, положение которого не должно зависеть от частоты возбуждающего поля, $\hat{\omega}$. Однако, эксперимент показал, что при очень низких частотах положение этого излома сильно зависело от частоты (рис. 3). Важно, что не только температура стекольного перехода, T_g , но и восприимчивость имеет сильную дисперсию в этой области частот. При этом, небольшая (порядка 5 %) часть восприимчивости линейно зависит от логарифма частоты, т.е.

$$\Delta \text{Re} \chi \propto -\ln \hat{\omega}. \quad (1)$$

Такое поведение абсолютно нехарактерно для обычных фазовых переходов [6].

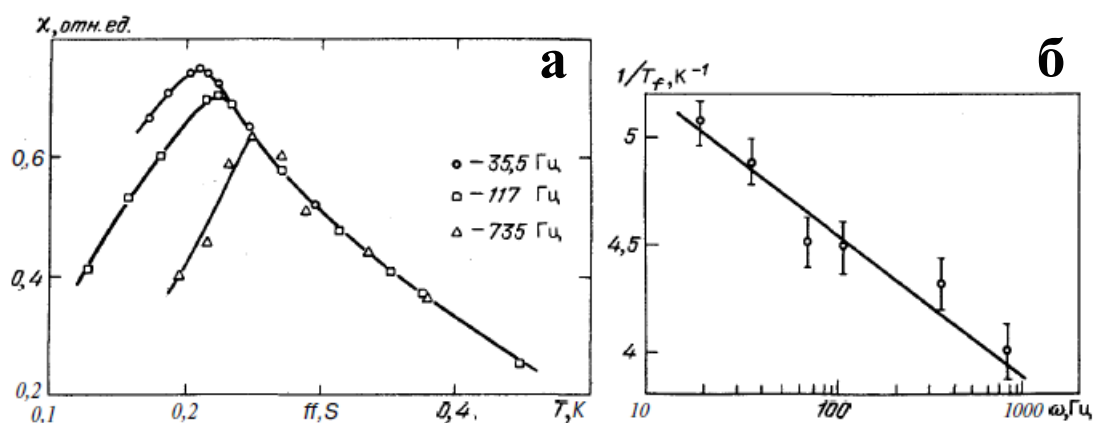


Рис. 3: а) Экспериментальная зависимость восприимчивости χ для $(Y_{0.99}Gd_{0.01})Al_2$ при разных частотах б) Зависимость $1/T_g$ от частоты для $(Y_{0.99}Gd_{0.01})Al_2$ [5] (из [6]).

1.2.2 Температурная зависимость теплоёмкости

Большинство систем, испытывающих стекольный переход, демонстрируют схожее поведение термодинамических свойств. Так, исследования теплоёмкости стеклообразующих систем различной природы, свидетельствуют об общем для всех этих систем характере температурной зависимости теплоёмкости: При понижении температуры теплоёмкость переохлаждённой жидкости имеет небольшой максимум вблизи температуры стеклования, спадающий в T_g . Такое поведение теплоёмкости при стекольном переходе делает его схожим с фазовыми переходами, при которых происходит асимптотический рост теплоёмкости в точке фазового перехода. Конечная величина пика теплоёмкости, ΔC_p , при стекольном переходе может быть объяснена, фазовым переходом, происходящем в системе с ограниченным (конечным) пространственным масштабом. Однако, прямых экспериментальных доказательств, подтверждающих эту гипотезу, нет.

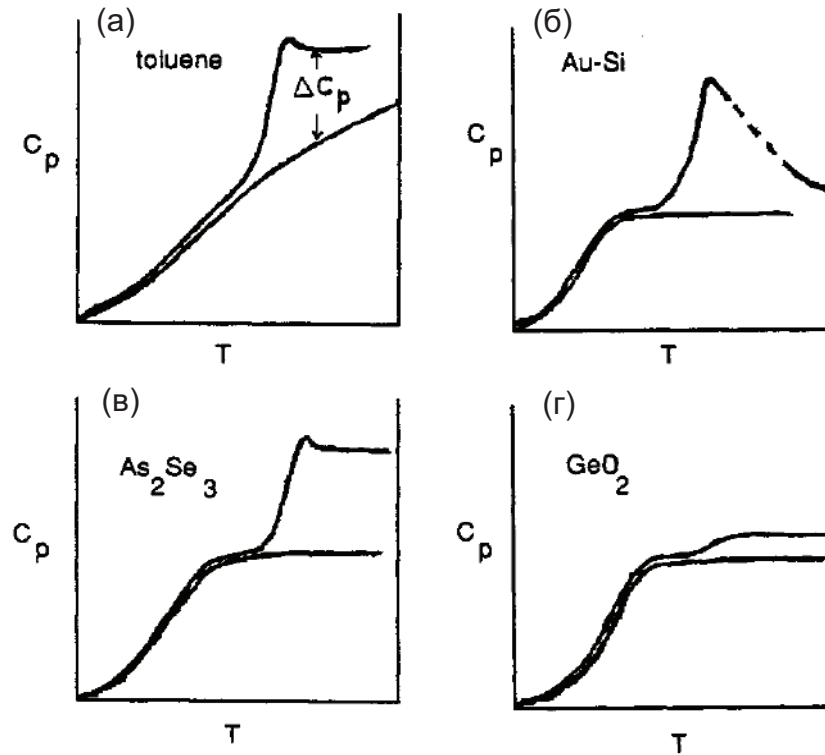


Рис. 4: Теплоёмкость жидкой фазы вблизи стекольного перехода и кристаллической фазы различных веществ: (а) молекулярная система (толуол) [7], где стекольный переход происходит в области, где теплоёмкость кристалла является неклассической; (б) Металлические системы (Al-Si) [8], в которых кристалл и стекло достигают классического режима до того, как происходит стекольный переход; (в) Системы с ковалентными связями (As_2Se_3) [9], в которых скачѐк теплоёмкости жидкости происходит на классическом фоне, и ΔC_p находится значительно выше T_g ; (г) открытые сетевые системы (GeO_2) [10], в которых ΔC_p мало и происходит на классическом фоне (графики взяты из работы [11])

1.2.3 Зависимость температуры стеклования от скорости закалки

Существуют экспериментальные факты, которые указывают на динамическую природу стекольного перехода. Главным среди них является зависимость температуры стеклования от скорости закалки. Как известно фазовые переходы являются равновесными, в том смысле, что

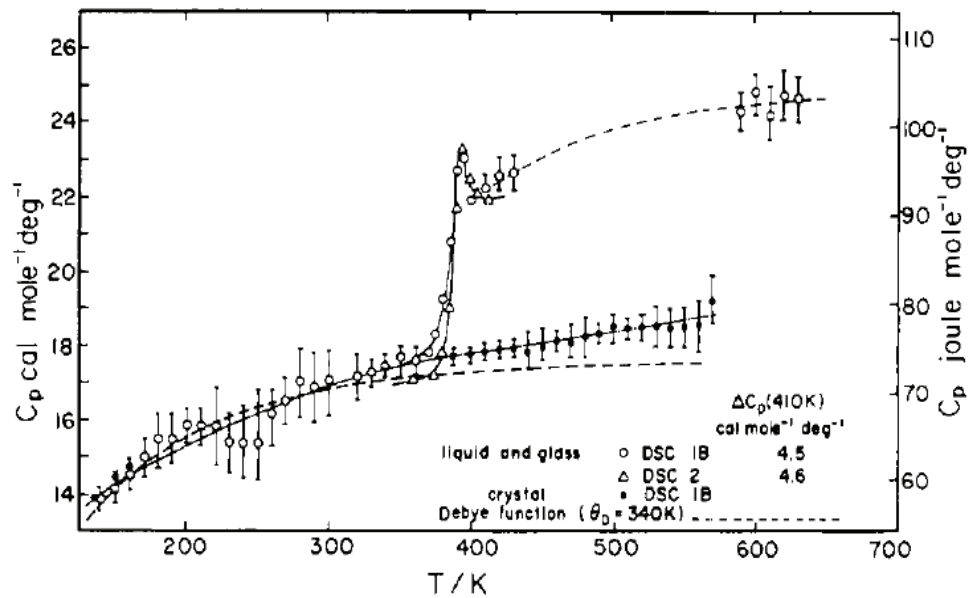


Рис. 5: Теплоёмкость жидкого, аморфного и кристаллического состояний ZnCl_2 . Пунктирная кривая — график Дебаевской теплоёмкости [12].

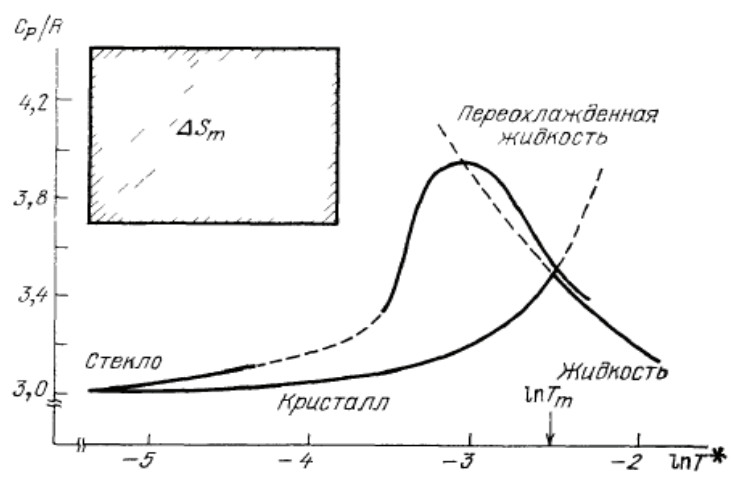


Рис. 6: Качественный ход кривых теплоёмкости модельной системы мягких сфер $\Phi(r) \sim r^{-12}$ жидкости, твёрдой фазы и аморфизирующей системы в области плавления и стеклования [13, 14].

представляют собой переходы от одной равновесной фазы в другую. Поэтому в термодинамике хорошо определена величина температуры фазового перехода, которая, благодаря относительно высоким скоростям достижения теплового равновесия, практически не зависит от

скорости изменения температуры. Отличительной же чертой стекольного перехода является сильная зависимость температуры перехода от скорости охлаждения. Это является веским аргументом, противников гипотезы о термодинамической природе стекольного перехода. Дей-

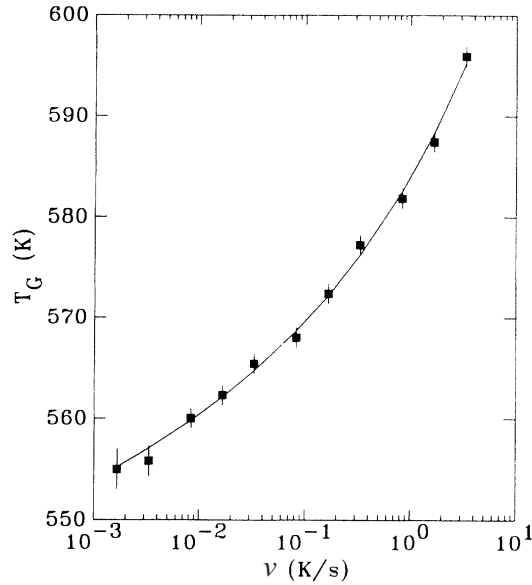


Рис. 7: Зависимость положения стекольного перехода в $\text{Pd}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{19}\text{Si}_1$ от логарифма скорости охлаждения. Сплошная линия соответствует формуле $T_g^*(v) = T_g + A/\ln(B/v)$. [15]

ствительно, вполне разумно предположить, что стеклование не является термодинамическим фазовым переходом, а имеет чисто динамическую природу, т.е. его основной причиной является быстрое охлаждение системы, фиксирующее её исходную структуру. Система достигает состояния теплового равновесия, т.е. состояния с выравненными по объёму кинетическими энергиями молекул, но остаётся неравновесной относительно медленных степеней свободы, связанных с коллективными движениями. Согласно этим представлениям, при достижении температур, лежащих значительно ниже энергии активации кол-

лективных движений, время релаксации становится макроскопически большим, превышающим время наблюдения за системой. В результате, полученное стекольное состояние системы представляет собой мгновенный “снимок” исходного состояния жидкой фазы, медленно релаксирующий со временем.

Тем не менее, эти рассуждения не помогают объяснить экспериментально наблюдаемую зависимость температуры стекольного перехода, T_g^* , от скорости охлаждения, v (рис. 7):

$$T_g^*(v) = T_g + A/\ln(B/v)$$

(A и B — константы не зависящие от v).

1.2.4 Расходимость времени релаксации системы, закон Фогеля-Фулчера-Таммана

Как и при фазовом переходе второго рода в точке стеклования время релаксации расходится при $T \rightarrow T_g$. Однако в отличие от фазового перехода, когда $\tau \sim 1/(T - T_g)^{z\nu}$ (ν — критический показатель, $z \approx 2$ — динамический показатель), поведение $\tau(T)$ не является универсальным, т.е. если аппроксимировать температурную зависимость времени релаксации как $\tau \sim 1/(T - T_g)^x$, то показатель x меняется в широком интервале значений. Вблизи T_g на эксперименте наблюдается два типа релаксации: Аррениуссовская релаксация, $\tau \sim \exp(E/kT)$, и релаксация по закону Фогеля-Фулчера-Таммана (ФФТ)

$$\tau \sim \exp [B/(T - T_g)] . \quad (2)$$

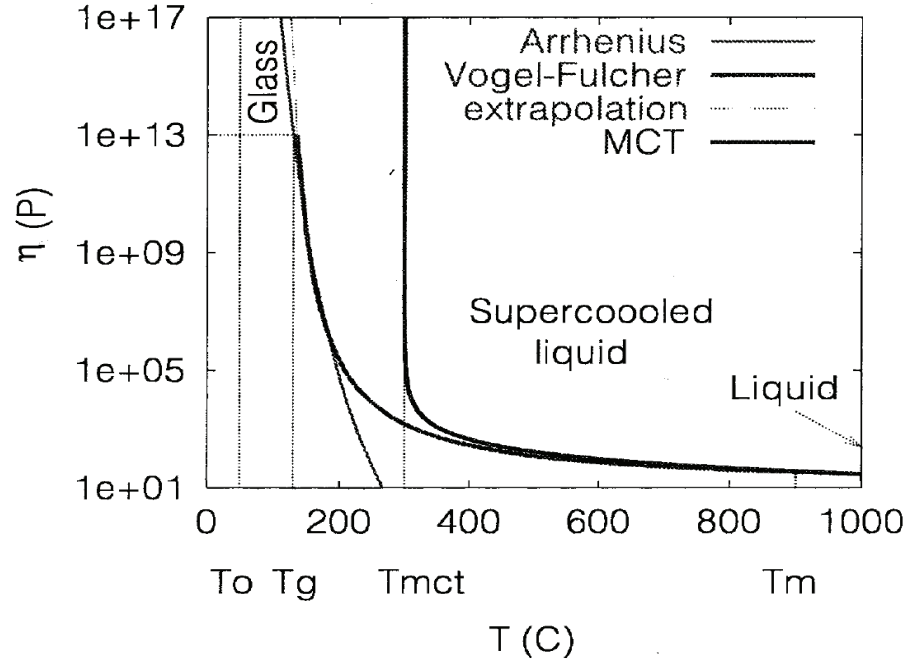


Рис. 8: Три режима температурной зависимости вязкости, η , вблизи стекольного перехода: при высоких температурах эта зависимость может быть описана степенной функцией, соответствующей теории взаимодействующих мод; при малых температурах зависимость $\eta(T)$ становится Аррениусовской; зависимость ФФТ позволяет наиболее точно аппроксимировать экспериментальные результаты на всём интервале температур [17].

Феноменологическая функция ФФТ оказывается наиболее точной при аппроксимации большинства экспериментальных кривых $\tau(T - T_g)$, кроме неё иногда используют степенные функции $\tau \sim (T - T_g)^{-x}$, например, когда сравнивают экспериментальные кривые с результатами расчётов, выполненных с помощью теории взаимодействующих мод (ТВМ), но точность аппроксимации при этом уменьшается, а показатель x , как уже упоминалось выше, не является универсальным, и его значение сильно меняется в зависимости от описываемой системы.

Согласно классификации стеклюющихся систем, которую предло-

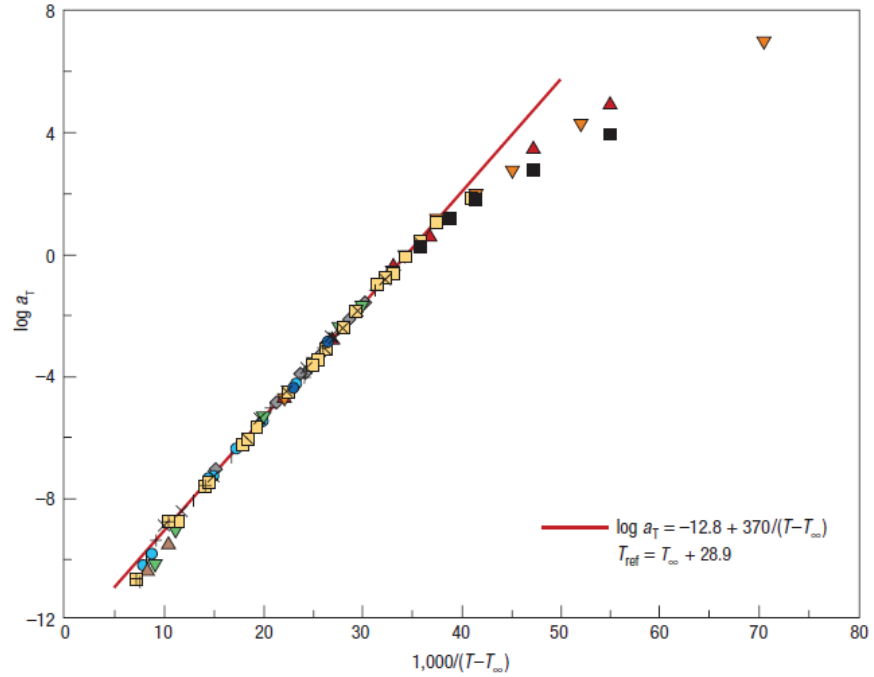


Рис. 9: Экспериментальные температурные зависимости сдвигового модуля полистирола, a_T , приведённые в [18, 19], являются типичными для стеклообразующих систем. Участок с линейной зависимостью $\log a_T$ от $1/(T - T_g)$, соответствует режиму ФФТ-релаксации.

жил Angell [16], системы, релаксирующие по ФФТ называются “fragile” (“хрупкие”), к другому классу стёкол, “strong” (“сильные”), он отнёс системы, релаксирующие по Аррениуссовскому закону (рис. 10).

1.2.5 Временная корреляционная функция

Для всех стеклующихся систем, находящихся в переохлаждённом состоянии вблизи (выше) температуры стеклования, график временной корреляционной функции имеет характерный вид (рис. 11), обусловленный существованием двух типов релаксационных процессов: первый — относительно быстрый дебаевский релаксационный процесс; второй — обычно объясняется “клеточным эффектом” (“cage effect”)

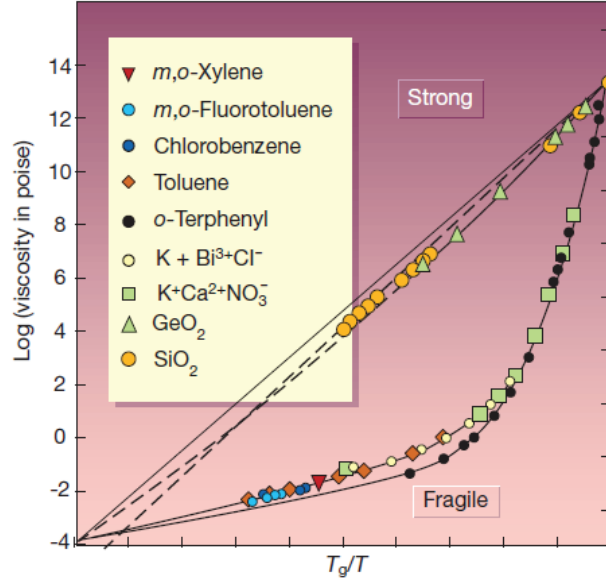


Рис. 10: “strong”-жидкости демонстрируют приближённо линейную зависимость вязкости от T_g/T : $E = d \ln \eta / d(1/T) = \text{const}$ (Аппениусовское поведение), “fragile”-жидкости демонстрируют супер-Аппениусовское поведение, при котором энергия активации возрастает с уменьшением температуры. Иллюстрация, построенная на основе работ [20, 16], взята из статьи P.G.Debenedetti [21], [20, 16].

подавления подвижности молекулы под влиянием её окружения, за счёт которого релаксационные процессы значительно растягиваются по времени. Эти процессы называют α -релаксацией. Для них характерно неаррениусовская зависимость времени релаксации от температуры и стремление времени релаксации к ∞ при $T^+ \rightarrow T_g$ (см. выше закон Фогеля-Фулчера-Таммана). Часто на временной корреляционной функции переохлаждённых систем наблюдается т.н. “бозонный пик”, представляющий собой аномальное возбуждение на терагерцевых частотах (на временах порядка 1 пика секунды, см. рис. 11). Бозонный пик объясняется появлением колебательных мод, соответствующих совместному согласованному движению большого числа моле-

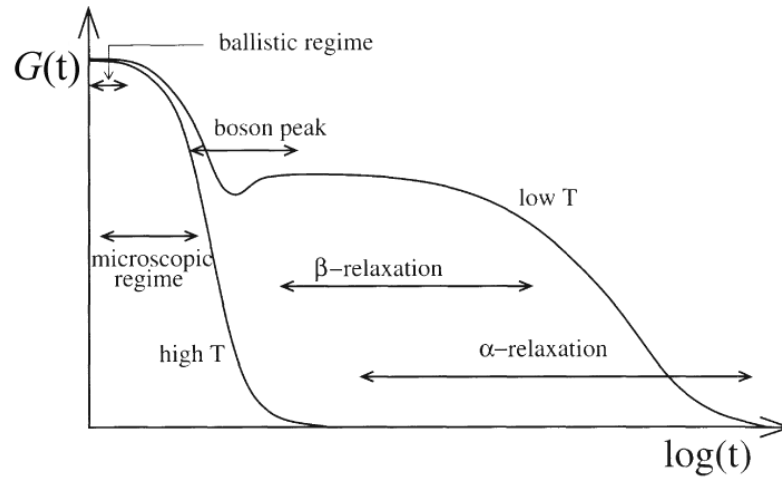


Рис. 11: Типичная временная корреляционная функция $G(t) = \langle \phi(0)\phi(t) \rangle$ стеклообразующей системы. Два графика соответствуют различным температурам: 1) относительно высокие температуры 2) температуры, при которых релаксационная динамика системы становится стекольной [22].

кул (молекулярных кластеров).

1.3 Теоретические подходы к описанию стеклования

1.3.1 Энтропийная модель

Главная идея энтропийной модели заключается в том, что времена медленной релаксации при низких температурах вызваны недостатком структурных конфигураций [23, 24]. Полагая, что молекулярные переориентации имеют кооперативный характер область, в которой происходит перестройка, определяется требованием, чтобы она содержала по крайней мере два различных конфигурационных состояния [24]. По мере понижения температуры размеры кооперативно переориентируемых областей растут. При предположении, что энергия активации процесса переориентации пропорциональна объёму области,

модель предсказывает, что температурная зависимость времени релаксации системы, $\tau = \tau_0 \exp(C/S_{conf}(T))$ (где S_{conf} — конфигурационная энтропия, а C — независимый от температуры параметр) [24], сильно отличается от Аррениусовской. Если считать, что конфигурационная энтропия представляет собой избыточную энтропию, $S_{conf} \cong S_{exc}$, и сформулировать парадокс Каузмана как $S_{conf} \propto T - T_K$ (T_K — температура Каузмана, при которой экстраполированный в область низких температур график энтропии жидкой фазы и график энтропии кристаллической фазы пересекаются), то в первом приближении энтропийная модель приводит к закону Фогеля-Фулчера-Таммана (2), в котором температура стеклования, T_g , тождественна температуре Каузмана: $T_g \cong T_K$ [25].

Энтропийная модель связывает динамику с термодинамикой предполагая, что наблюдаемое при охлаждении критическое увеличение времени релаксации отражает существование фазового перехода второго рода в состояние с нулевой конфигурационной энтропией, именуемое как фаза идеального стекла. Этот привлекательная теория некоторое время была доминирующей, несмотря на существование достаточно серьёзных проблем: 1) На концептуальном уровне можно заявить о том, что фаза идеального стекла существует. Однако эта фаза очень специфична, поскольку до сих пор никто не знает, что она может из себя представлять; 2) Следующей фундаментальной проблемой является то, что модельные параметры, обычно неявно выражающие кооперативно переориентируемые области, при стекловании содержат от четырёх до восьми молекул, а при более высоких температурах и

того меньше [26]. Этого недостаточно для подтверждения предположения о независимом кооперативном движении этих переориентируемых областей; 3) Предположение о том, что энергетический барьер пропорционален объёму области коррелированного движения плохо обосновано; 4) Экспериментальная проверка энтропийной модели основано на предположении, что $S_{conf} \cong S_{exc}$, которое так-же является плохо обоснованным. Если конфигурационная энтропия является не зависящей от температуры частью избыточной энтропии [27], то модель тоже предсказывает $\tau = \tau_0 \exp(C/S_{conf}(T))$, однако не очевидно, что это будет так [28]. 5) И наконец, недавние результаты численных расчётов говорят о том, что предположенное равенство $T_g \cong T_K$, необходимое для описания экспериментальных наблюдений, в большинстве случаев также не выполняется [29].

1.3.2 Теория энергетического рельефа

В этой теории центральной идеей при описании стеклования является предположение о существовании сложного рельефа свободной энергии, который физически проявляется в виде спектра времён релаксации системы и самоподобия при изменении масштаба. В этой картине гелеобразование и стеклование характеризуются нарушением эргодичности системы, что приводит к твердо-подобным откликам, но, при этом, система имеет жидко-подобную микроструктуру, которая все ещё может трансформироваться.

Энергетический рельеф может быть определён только если можно сконструировать функционал свободной энергии с помощью под-

ходящей крупноструктурирующей процедуры, такой, например, как в среднеполевой модели спинового стекла. Энергетический рельеф свободной энергии меняется со временем, поэтому “конфигурационная энтропия”, также называемая “запутанностью” (“complexity”) [30], которую можно определить как логарифм числа доступных минимумов свободной энергии, отличается от “конфигурационной энтропии”, вычисленной из рельефа свободной энергии.

Понятие энергетического рельефа за счёт своей простоты очень привлекательно при объяснении наблюдаемого поведения жидкостей и стёкол, а так же для качественного описания медленной динамики в комплексных системах в широком спектре областей физики [31]. Кроме того, оно сыграло важную роль в развитие энтропийной модели и других феноменологических теориях, таких, например, как модель мягкого потенциала [32]. Тем не менее, до сих пор в рамках этой теории не предложено объяснения физического механизма, ответственного за отличительные свойства вязкого замедления переохлаждённой жидкости.

1.3.3 Теория “свободного” объёма

Ключевая идея теории “свободного” объёма заключается в том, что для перегруппировки молекулам необходим “свободный” объём. Поскольку жидкость при охлаждении сжимается происходит уменьшение свободного объёма. Если обозначить удельный “свободный” объём, приходящийся на одну молекулу через ν_f , то время релаксации выражается через него следующим образом: $\tau = \tau_0 \exp(C/\nu_f)$ (— некоторая

константа) [33]. Существует несколько различных взаимонесогласующихся формулировок модели “свободного” объёма вследствие того, что невозможно определить свободный объём строго. Коэн с соавторами определял его как часть объёма, который не может быть перераспределён без затраты энергии, и полагал, что эта величина достигает нуля при некоторой конечной температуре T_0 . Тогда, первый порядок разложения ν_f по $T - T_0$ даёт закон Фогеля-Фулчера-Таммана (2). Другая интерпретация “свободного” объёма [34] определяет его как вычитание объёма молекул из общего объёма, предполагающее, что $\nu_f = 0$ только при $T = 0$. Модель свободного объёма основана на предположении, что транспорт молекул в вязких жидкостях происходит только в случае пустоты имеют объём больше чем достаточно чтобы расположить перераспределением некоторого “свободного объёма”, последний определяется как некоторый излишек объёма, незанятый молекулами. Таким образом, диффузия в этой модели представляет собой результат перераспределения свободного объёма и является неактивационным процессом.

Основная критика моделей свободного объёма связана с двумя слабыми моментами: 1) Концепция свободного объёма плохо обоснована, что приводит к различным интерпретациям и сложности в нахождении надлежащей процедуры даже для простейших модельных систем; 2) Модель не в состоянии адекватно воспроизводить зависимость вязкости (и времени α -релаксации) от давления. Последнее обнаружено во многих исследованиях, и является результатом наблюдения, сделанного ранее, что замедление жидкости при 1 атмосфере и ниже кон-

тролируется преимущественно температурой, а не давлением. Кроме того в настоящее время установлено, что формирование стекла из переохлаждённой жидкости обусловлено преимущественно не уменьшением свободного объёма, а скорее термически активационными процессами [35].

1.3.4 Упругая модель

Основная идея теорий, основанных на упругой модели, заключается в том, что динамика жидкой системы определяется спектром энергий активации, которая, в свою очередь, определяется существенными на малых временных масштабах упругими свойствами молекулярной системы. Первые работы, основанные на этом подходе, появились в середине прошлого века [36], в которой вязкость определялась скоростью молекул,двигающихся от одного локального положения равновесия к другому. Энергия активации этого движения пропорциональна модулю сдвига, G_∞ : $\Delta E = \lambda_2 a^3 G_\infty$, где $\lambda_2 \sim 1$ — некоторый постоянный параметр, а a^3 — микроскопический объём. В настоящее время полагается, что она определяется работой, необходимой для сопровождающего перескок атома с одного положения в другое “расталкивания” окружающих атомов [35]. Полагается, что в простейшем случае сферической области задействованных в движении молекул в ней происходит чисто сдвиговые деформации, что приводит к $\Delta E \sim G_\infty(T)$.

К настоящему времени методами молекулярной динамики была выявлена связь между быстрыми и медленными степенями свободы стеклообразующих жидкостей, что подтвердило основные положения упру-

гой модели. Однако, фундаментальной проблемой теорий, основанных на упругой модели, является то, что эта модель применима только к динамике равновесной системы. Стеклюющиеся же системы являются существенно неравновесными, что приводит к внутренней противоречивости этих теорий. Принимая во внимание эту проблему можно предположить, что дальнейшее развитие такого подхода возможно в рамках теоретического описания, основанного на гипотезе о локальном равновесии. На большой потенциал такого подхода указывает и тот факт, что идея о пропорциональности энергии активации модулю упругости (даже в своём “равновесном” варианте) была успешно применена для объяснения релаксации системы при температуре ниже T_g . Granato и Khonik [37] сформулировали такую теорию, которая позволила объяснить увеличение эффективной вязкости со временем $\eta_{eff} = A + Bt$ (A и B — независимые от t параметры).

1.3.5 Теория связанных мод (mode-coupling theory)

Теория связанных мод (ТСМ) в настоящее время остаётся единственной последовательной теорией для описания стеклования. Отправной точкой ТСМ является гипотеза о том, что структурные свойства стеклообразующей жидкости очень схожи со свойствами “нормальной”, т.е. высокотемпературной, жидкости. Вторым важным моментом является тот факт, что переохлаждённая жидкость демонстрирует разделение временных масштабов протекающих в ней процессов на быстрые, порядка периода колебаний на микроскопических масштабах, и медленные времена релаксации, на порядки превосходящие первые. В

ТСМ удаётся реализовать оба эти свойства стеклующихся жидкостей с помощью выделения существенных медленно меняющихся наблюдаемых, задаваемых плотностью распределения частиц, и вывода уравнений движения для этих медленных переменных. Для того чтобы определить эти уравнения движения часто используется наиболее удобный для понимания формализм проекционного оператора Званжиги-Мори (Zwanzig-Mori).

Мы опустим подробное описание этого метода и остановимся лишь на некоторых ключевых моментах. Стартуя непосредственно с системы уравнений движения системы, задаваемой зависящим от координат $\mathbf{x}_i$ и импульсов $\mathbf{q}_i$ всех частиц гамильтонианом H , среди прочих выделяется класс наиболее медленных величин — флуктуации плотности, $\delta\rho(\mathbf{q}, t)$, определённые на фазовом пространстве системы. Наиболее интересную для теории корреляционную функцию флуктуаций плотности,

$$F(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{N} \langle \delta\rho(\mathbf{q}, t) \delta\rho^*(\mathbf{q}, t) \rangle,$$

можно непосредственно определить из эксперимента, например, с помощью неупругого рассеяния нейтронов.

Применив формализм проекционного оператора Званжиги-Мори и проделав довольно длинные аналитические выкладки можно показать, что уравнения ТВМ для нормированной корреляционной функции

$$\Phi(q, t) = F(q, t)/F(q), \quad (3)$$

где $F(q) = F(q, 0)$ — статический структурный фактор, имеют следу-

ющий вид:

$$\frac{d^2}{dt^2}\Phi(q, t) + \Omega^2(q)\Phi(q, t) + \int_0^t M(q, t - t')\frac{d}{dt}\Phi(q, t')dt' = 0, \quad (4)$$

$\Omega^2(q)$ — квадрат частоты, который определяется из уравнений движения частиц и имеет вид:

$$\Omega(q) = q^2 kT / mF(q), \quad (5)$$

где m — масса частицы,

$$M(q, t) = \frac{m}{NkTq^2} \langle \ddot{\rho}^*(q) Q e^{-iQLQt} Q \ddot{\rho}(q) \rangle \quad (6)$$

— не зависящая от времени функция памяти, которая довольно сложно определить, поскольку в неё входят все быстрые моды, о присутствии некоторых из которых мы можем даже и не подозревать. Само согласованное решение полученной системы уравнений предсказывает замедление релаксации, которое приписывается, в рамках гомогенной картины, механизму обратной связи. Это решение демонстрирует динамическое замедление в критической точке, T_c , которое связывается с переходом от эргодического к неэргодическому состоянию с замедляющей сингулярностью в гидродинамике и структуре системы. Основное достижение приближения взаимодействующих мод — это предсказание аномального роста времени релаксации и появления двухстадийных релаксационных процессов при уменьшении температуры, действительно наблюдаемых экспериментально в “хрупких” стеклообразующих системах и системах, моделируемых методами молекулярной динамики [38, 39]. Тем не менее, с помощью как эмпирической подгонки к экспериментальным данным, так и с помощью сравнения с

результатами моделирования было показано, что данное критическое замедление при T_c не описывает ни наблюдаемого стекольного перехода при T_g , ни перехода к “идеальному стеклу” при температурах ниже T_g . Сингулярность в T_c отсутствует из-за нарушения простой аппроксимации теории связанных мод, а температура перехода T_c существует в так называемой “идеализированной” теории связанных мод как точка кроссовера, ниже которой начинают преобладать дополнительные активационные релаксационные механизмы. К сожалению, далее некоторого эмпирического рассмотрения активационные процессы не могут быть теоретически описаны с помощью подходов, основанных на теории связанных мод [40, 41]. Таким образом, например, теория α -релаксации не может быть продолжена в область температур, лежащих ниже T_c . Приближение связанных мод вполне приемлемо для описания обычного критического замедления, но не подходит для скейлингового описания активационной динамики наблюдаемой в изинговской модели со случайными взаимодействиями. Эта неудача связана с природой данного приближения, которая соответствует однопетлевой самосогласованной схеме расчёта в технике теории возмущения [42].

Таким образом, приближение связанных мод лучше всего описывает динамику умеренно переохлаждённой жидкости. Её достаточно точные успешные предсказания производятся именно в этом интервале температур. Кроме того, заслугой теории связанных мод является то, что она стимулировала развитие экспериментальных техник исследования, таких, например, как техника рассеяния нейтронов и деполяризованного света, а также методов компьютерного моделирования,

пригодных для исследования ранней стадии вязкого замедления; Однако, предсказываемая в ТСМ динамическая сингулярность не даёт возможности сделать каких-либо чётких выводов о качественной адекватности теории, что привело к интенсивной дискуссии в последнее время [43].

Следует заметить, что ТСМ не является техникой описания только переохлаждённых жидкостей и стекольных переходов, а может быть использована для всех случаев, когда в какой-либо системе возникают медленные переменные.

1.3.6 Теория Адама–Гиббса–Ди-Марцио (АГДМ)

Первая успешная попытка теоретически увязать увеличение корреляционного радиуса с уменьшением конфигурационной энтропии была сделана в серии работ, опубликованных Г. Адамом, Дж. Гиббсом и Е. Ди-Марцио между 1956 и 1965 годами [44, 45, 46]. Хотя, основывались эти работы на расчётах, выполненных Флори [47], которые не имели ничего общего с физикой стекла.

Прежде всего следует заметить, что в работах Флори, а затем Адама, Гиббса и Ди-Марцио, слово “конфигурация” используется в смысле, который сейчас придаётся термину “состояние”. В частности, эти авторы не принимали во внимание различия между колебательной и конфигурационной частями энтропии, они рассматривали только конфигурационную часть, не обращая внимания на колебательную часть. В случае полимера на решетке (Флори) использование термина “конфигурации” вполне оправдано, тогда как в контексте стеклообразую-

щих жидкостей (Адама–Гиббса–Ди-Марцио) такой термин не совсем точен, так как можно ожидать, что “состояние” при конечных T будет фактически содержать множество “конфигураций”, связанное с колебательной энтропией этого “состояния”.

Ключевая идея теории заключается в том, что при уменьшении температуры релаксация проходит через перестройку всё больших и больших областей коррелированных частиц, которые называются кооперативно перестраиваемые области (Cooperative Rearranging Regions). Теория определяет типичную КПО как наименьший кластер, способный перестраиваться независимо от его окружения. Это значит, что различные части этой области не могут перестраиваться независимо друг от друга и, следовательно, уже не могут вносить вклад в комбинаторный рост количества состояний, доступных для КПО. В результате типичная КПО имеет только небольшое число возможных локально равновесных состояний, Ω . Согласно теории Адама–Гиббса это число постоянно: оно не зависит ни от температуры, ни от размера коррелированной области. Необходимо лишь, чтобы это число было больше 1, например $\Omega = 2$. В этом случае количество возможных состояний всей системы, состоящей из N частиц, будет $Z = \Omega^{N/n}$, где n — количество частиц в КПО, а N/n — количество независимых КПО в системе. Конфигурационная энтропия такой системы имеет вид:

$$S_c = \frac{1}{Z} \log Z = \frac{\log \Omega}{n}.$$

Поскольку $n \sim \xi^d$, это выражение объясняет увеличение корреляционной длины при уменьшении конфигурационной энтропии.

Чтобы найти время релаксации необходимо задать связь между размером КПО, ξ , и энергетическим барьером, Δ , который необходимо преодолеть для её перегруппировки. Согласно теории Адама-Гиббса

$$\Delta \sim n \sim \frac{1}{S_c},$$

поэтому время релаксации системы:

$$\tau_R = \tau_0 \exp\left(\frac{\Delta}{T}\right) = \tau_0 \exp\left(\frac{B}{TS_c(T)}\right), \quad (7)$$

где B содержит все постоянные параметры.

Нам точно неизвестно, как ведёт себя энтропия при низкой температуре. Однако, можно оценить температурную зависимость $S_c(T)$ используя простые термодинамические соотношения. Полагая, что

$$\frac{dS_c}{dT} = \frac{d}{dT}(S_{LQ} - S_{CR}) = c_p^{LQ} - c_p^{CR} \equiv \Delta c_p$$

можно записать:

$$S_c(T) - S_c(T_k) = \int_{T_k}^T dt \frac{\Delta c_p}{T},$$

где T_k — температура Каузмана. Следуя рассуждениям Адама и Гиббса будем полагать, что теплоёмкость не зависит от температуры, и $S_c(T_k) = 0$, тогда температурную зависимость теплоёмкости можно представить как $S_c(T) = \Delta c_p \log(T/T_k)$. Раскладывая эту функцию в ряд Тейлора вблизи T_k получаем:

$$S_c(T) \sim \Delta c_p \frac{T - T_k}{T_k}, \quad (8)$$

что совпадает с линейным поведением избыточной энтропии в экспериментах [35]. Подстановка (8) в (7) приводит к соотношению Фогеля-

Фулчера-Таммана:

$$\tau_R = \tau_0 \exp \left(\frac{A}{T - T_k} \right),$$

где A включает в себя постоянные параметры.

Таким образом, теория Адама–Гиббса–Ди-Марцио приводит к важным результатам: Во-первых, она обеспечивает изящное объяснение энтропийного кризиса Каузмана в терминах термодинамического фазового перехода; Во-вторых, она обеспечивает прямую зависимость между конфигурационной энтропией и размерами коррелированных областей, объясняя тем самым супер-Аррениуссовское возрастание времени релаксации; В-третьих, она связывает понятие хрупкости (неустойчивости) со скоростью уменьшения конфигурационной энтропии, т.е. со скачком теплоёмкости при стекольном переходе; В-четвёртых, она даёт зависимость Фогеля-Фулчера-Таммана времени релаксации системы от температуры вблизи стекольного перехода. При этом теория проста и элегантна, и не удивительно, что она очень популярна.

Однако, теория Адама–Гиббса–Ди-Марцио не может полностью удовлетворить всем требованиям к теории, поскольку имеет серьёзные недостатки: Во-первых, вызывает сомнения утверждение о том, что стекольная фаза является равновесной фазой вещества с резким нарушением эргодичности при T_k ; Во-вторых, динамический стекольный переход при T_g является всего лишь предшественником термодинамического фазового перехода при T_k , что не может объяснить крайне важного экспериментально наблюдаемого явления — двухстадийной релаксации при температурах выше T_g . Таким образом, данная теория не может одинаково удовлетворительно объяснить всю феномено-

логию стекольных переходов.

1.3.7 Метод реплик

Важным понятием в физике стекла является понятие **реплики**. Его появление в теории связано с необходимостью усреднения по замороженному беспорядку, т.е. по постоянно присутствующей в системе случайной статической неоднородности какого-либо параметра, например, случайного знака потенциала взаимодействия между соседними элементами. Сначала проводится усреднение по статистическому ансамблю, суммирование по всем конфигурациям её свободных параметров, при фиксированной конфигурации замороженного беспорядка, а затем уже полученное среднее опять усредняется *по реализациям* случайных статических параметров. Эта ситуация эквивалентна усреднению экспериментальных данных по результатам серии экспериментов, проведённых на разных образцах. Проблема теории состоит в том, что практически вычислить статистическую сумму для конкретной реализации случайных параметров невозможно [6].

Для того чтобы обойти эту проблему был предложен метод реплик. В качестве примера рассмотрим простейшую модель стекла Эдвардса-Андерсона с гамильтонианом

$$H(S) = \sum_{\{i,j\}} J_{ij} S_i S_j, \quad (9)$$

где S_i — спин, находящийся в пространстве в точке i , который может находиться только в двух возможных состояниях: $S_i = 1$, или $S_i = -1$, $J_{i,j}$ — случайное взаимодействие ($\overline{J} = 0$, $\overline{J^2} \neq 0$), суммирование по

$\{i, j\}$ обозначает, что суммирование проводится только по ближайшим соседям.

Суть метода реплик можно продемонстрировать на примере вычисления свободной энергии. Для вычисления физической свободной энергии системы необходимо усреднить её по реализациям случайных взаимодействий:

$$F \equiv \overline{F_J} = -\frac{1}{\beta} \overline{\ln Z_J}, \quad (10)$$

где верхняя черта обозначает усреднение по J с некоторым распределением $P(J)$,

$$\overline{\ln Z_J} \equiv \left(\prod_{\{i,j\}} \int dJ_{ij} \right) P(J) \ln Z_J, \quad (11)$$

а

$$Z_J = \sum_{\{S\}} \exp(-\beta H(S)) \quad (12)$$

— статистическая сумма со случайной фиксированной конфигурацией взаимодействий. Чтобы усреднить логарифм статистической суммы по конфигурациям J используется тождество

$$\ln Z_J = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z_J^n - 1}{n}. \quad (13)$$

Полагается, что n — целое число, а Z_J^n представляется в виде произведения одинаковых величин Z_J (**реплик**) [6, 48]:

$$Z_J^n = \prod_{a=1}^n \left[\sum_{\{S_a\}} \exp \left(\beta \sum_{\{i,j\}} J_a S_{ai} S_{aj} \right) \right], \quad (14)$$

где индекс a обозначает номер реплики. В случае ненарушенной *репличной симметрии* во всех репликах реализация случайных взаимодействий одинакова, поэтому коррелятор

$$\langle J_a(x)J_b(x') \rangle = \delta(x - x') \quad (15)$$

не зависит от индексов a и b . Использование тождества (13) позволяет усреднять свободную энергию также, как и обычную статистическую сумму с гамильтонианом (14):

$$F = -\frac{1}{\beta} \overline{\ln Z_J} = -\frac{1}{\beta} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\overline{Z_J^n - 1}}{n} = -\frac{1}{\beta} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\overline{Z_J^n} - 1}{n} \simeq -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \overline{Z_J^n}. \quad (16)$$

Если определить новую величину

$$F_n = -\frac{1}{\beta n} \ln \overline{Z_J^n}, \quad (17)$$

можно показать, что в пределе $n \rightarrow 0$ $\overline{Z_J^n}$ можно использовать в качестве эффективной статсуммы:

$$\lim_{n \rightarrow 0} F_n = -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \ln \overline{Z_J^n} = -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \ln[\overline{\exp(n \ln Z_J)}] = \quad (18)$$

$$= -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \ln[1 + n \overline{\ln Z_J}] = -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \ln[1 + n \overline{\ln Z_J}] = \quad (19)$$

$$= -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \ln[\exp(n \overline{\ln Z_J})] = -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta} \overline{\ln Z_J} = F. \quad (20)$$

Это позволяет использовать для вычислений стандартные методы равновесной статической механики. Для чего сначала требуется вычислить усредняемую величину для целого n , а за тем полученную функцию n аналитически продолжить на нецелые n и перейти к пределу $n \rightarrow 0$ [48].

1.4 Ультраметричное пространство состояний (“долин”)

Понятие “реплика” является математическим, а введение реплик в теорию представляет собой технический приём, физический смысл которого неочевиден. Следует отличать это понятие от понятия “долина” [6, 48], которое имеет важное значение в физике стекольных переходов. Между двумя этими понятиями можно проследить связь. Однако, “долины”, в отличие от “реплик”, имеют вполне определённый физический смысл.

Появление “долин” в физической системе проще всего проиллюстрировать на примере системы, испытывающей фазовый переход второго рода. В критической точке вместо одного равновесного состояния в системе возникает несколько равновесных состояний, разделённых высокими энергетическими барьерами. Другими словами, происходит вырождение равновесного состояния. При фазовом переходе происходит спонтанное нарушение симметрии, при котором система “выбирает” то состояние, в котором она будет находиться впоследствии. Другие состояния становятся при этом недоступными, в результате чего в пространстве всех возможных состояний система “выбирает” только одну его часть, которую принято называть “долиной”. Физический смысл имеют только термодинамические средние “внутри долины”. В “долине” выполняется термодинамический предел, $N \rightarrow \infty$, поэтому в ней выполняются законы равновесной термодинамики, что позволяет использовать для теоретического описания обычные методы статистической физики.

В случае стекольного перехода физическая картина усложняется. Предполагается, что как и при фазовом переходе второго рода существует некоторая T_c , выше которой эргодичность системы не нарушена [48]. При понижении температуры ниже T_c происходит фазовый переход нарушения эргодичности, при котором фазовое пространство разделяется не на две, как при фазовом переходе, а на много (бесконечно много в макроскопической системе) “долин”, разделенных бесконечными барьерами свободной энергии. Количество “долин” становится бесконечно большим в результате каскада фазовых переходов, вызванного индуцируемой беспорядком фрустрацией системы. В результате каждого такого фазового перехода пространство состояний очередной “долины” делится на несколько “долин” следующей генерации и т.д. Как и при фазовом переходе второго рода, только термодинамические средние “внутри долины” имеют физический смысл.

1.4.1 Теория ограниченных фрустрациями флуктуаций

Теория ограниченных фрустрациями флуктуаций (ТОФФ) или frustration-limited-domains theory (FLDT) [49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58] была предложена относительно недавно. Она базируется на гипотезе о том, что супер-аррениусовский рост времени релаксации переохлаждённых жидкостей, формирующих хрупкие стёкла, связано с ростом некоего кооперативного порядка в системе. Как и в теории АГДМ, и в мозаичной теорий, в ТОФФ предполагается, что такое упорядочение должно быть термодинамического происхождения. Отличие, заключается в определении физической природы этих коррелированных обла-

стей.

ТОФФ основана на двух основных концепциях: о существовании локально предпочтительной структуры и о существовании геометрических фрустраций (их так-же называют структурными или топологическими фрустрациями). Теория предполагает, что в жидкости есть локально предпочтительные структуры (ЛПС), которые отличаются от локальной структуры термодинамически стабильного кристалла. ЛПС может быть определена как расположение молекул, минимизирующее локальную свободную энергию. В отсутствие фрустраций при понижении температуры жидкость заморозилась бы в ЛПС-структуру в критической точке перехода второго рода, T_c . Однако, система не имеет возможности сделать это, потому что ЛПС является несовместимой с дальним порядком, и не может замостить всё пространство. Это и есть причина геометрической фрустрации. Одним из ключевых моментов теории является то, что наличие геометрической фрустрации подавляет фазовый переход при T_c , но эта исчезнувшая критическая точка продолжает сильно влиять на физические свойства системы, в частности, приводит к резкому замедлению кинетики, типичному для стеклообразующих жидкостей.

Наблюдаемым следствием подавленной критичности, является то, что дальний порядок, который мог бы установиться в нефрустрированной системе, не может быть устойчивым в присутствии фрустраций. По этой причине система разбивается на домены масштаба ξ . Другими словами, “молекулы в жидкости ... как правило располагаются в локально предпочтительной структуре, соответствующей минимуму ло-

кальной свободной энергии, но пространственная протяженность этой локальной упорядоченности нарушается вездесущими геометрическими фрустрациями, которые предотвращают периодическое разбиение пространства” [55]. Этот статический масштаб не следует путать с корреляционным радиусом, ξ_0 , связанным со скрытой критической точкой, T_c . В отсутствие фрустрации корреляционный радиус растёт при приближении к критической точке, $\xi_0 \rightarrow \infty$, но уменьшается, когда температура понижается ниже T^* . С другой стороны, $\xi = \infty$ при любой температуре ниже критической точки, если фрустрации отсутствуют. Теория предполагает, что концентрация фрустраций довольно мала, поэтому $\xi \gg \xi_0$.

В модели ТОФФ постулируется “оргублённый” гамильтониан для переменной локальной структуры, первая часть гамильтониана описывает нефрустрированную систему и характеризуется критической точкой. Это может быть любая модель ферромагнетика с близкодействующим взаимодействием J , например, модель Изинга. Важным моментом является то, что переменная локального порядка (спин) должна иметь несколько возможных “ориентаций” или “цветов”, чтобы воспроизводить несоответствие между различными доменами. К возмущенной первой части гамильтониана добавляется слабая дальнедействующая анти-ферромагнитная часть силы K , которая соответствует геометрической фрустрации системы:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{O}_i \mathbf{O}_j + (Ka_0/2) \sum_{\langle ij \rangle} \frac{\mathbf{O}_i \mathbf{O}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|},$$

где i и j обозначают узлы гипотетической решётки, $\mathbf{O}_i$ — переменная

порядка (order variable) в узле i [49], $\langle ij \rangle$ обозначает суммирование по ближайшим соседям, a_0 — постоянная решётки (межмолекулярное расстояние), и $J \gg K > 0$. Первое слагаемое соответствует близкодействующему ферромагнитному взаимодействию, второе — дальноедействующему антиферромагнитному взаимодействию, фрустрирующему модель. Феноменологическое продолжение модели даёт следующее представление для зависимости свободной энергии кластера от его размера, L :

$$F_{clust} = \sigma L^2 - \phi L^3 + sL^5,$$

где L^3 — объём кластера, а включающее его слагаемое соответствует выигрышу в энергии при упорядочении кластера, σL^2 — энергия поверхности кластера, sL^5 — энергия упругого взаимодействия фрустраций. Локальный минимум свободной энергии кластеров определяет максимальный их размер (см. рис. 12). Фазовый переход, определяемый ферромагнитным членом J , подавляется слабой дальнедействующей фрустрацией K . Физическая интерпретация поведения рассматриваемой модели следующая: При уменьшении температуры объём областей с предпочтительной структурой растёт как и в случае обычного фазового перехода, но при приближении их размеров к значению L^* , соответствующему некоторой температуре T^* , рост доменов замедляется и полностью прекращается при $T = T_g$ [49].

Идея о связи стеклования с геометрическими фрустрациями восходит к началу 80-х [59, 60, 61, 62], когда геометрические фрустрации изучались в связи с исследованием искривлённых пространств (см. также [58]). Кроме того, в [63, 64] было впервые обнаружено, что кон-

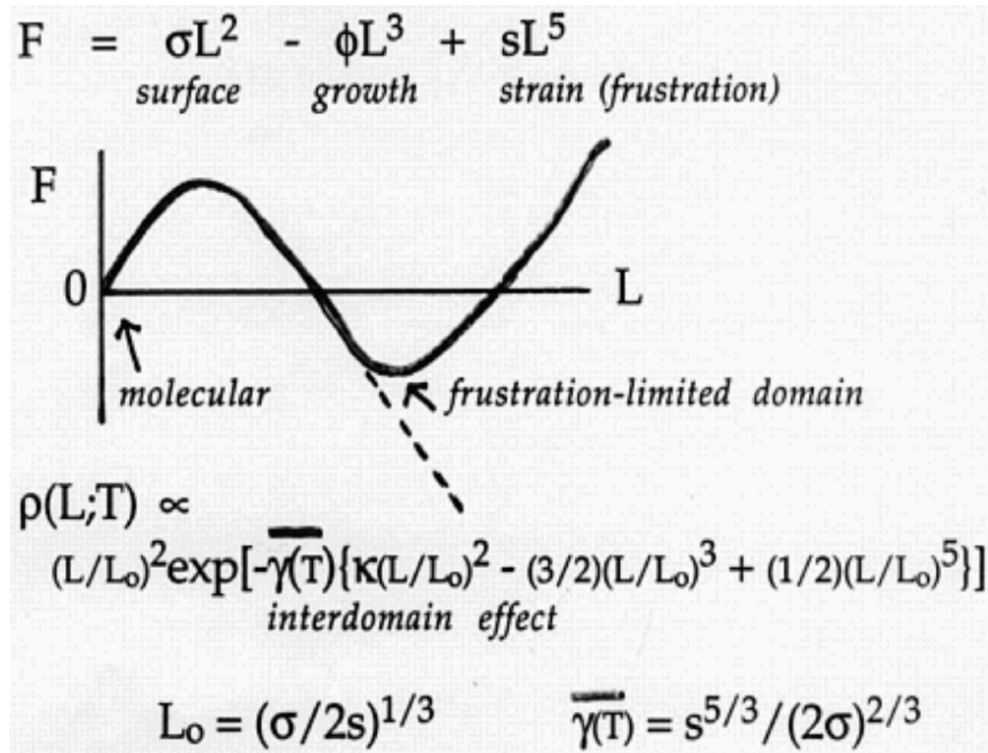


Рис. 12: Иллюстрация из лекции Д. Кивелсона

куренция между ферромагнитным взаимодействием ближайших соседей и антиферромагнитным взаимодействием со следующим за ближайшими соседями окружением приводит к логарифмическому замедлению динамики спиновой системы, подобному замедлению, наблюдаемому в стекольной динамике. Тем не менее, ТОФФ была первым звеном в последовательном обосновании влияния геометрических фрустраций на кооперативное поведение переохлаждённой жидкости. При этом главное достижение ТОФФ заключается в том, что она объясняет на понятном физическом языке почему система разбивается на домены, в то время как другие схемы иногда просто констатируют, что такие области существуют, и сосредотачивают внимание только на причинах их роста. В ТОФФ было показано, что супер-Аррениусовская

температурная зависимость вязкости и времени α -релаксации от температуры и неоднородная динамика характерны для таких систем.

В развитии этого подхода в последнее время наблюдается значительный прогресс, достигнутый в результате использования скейлингового подхода. Однако, предполагаемый параметр порядка, описывающий предпочтительную локальную структуру, до сих пор должным образом не был определён. Кроме того, так же как и в случае обобщённой спин-стекольной модели, необходимо дать убедительное обоснование того, что 3-х мерные статистико-механические фрустрированные модели демонстрируют предполагаемую активационную динамику.

Согласно ТОФФ обычный фазовый переход первого рода жидкость–кристалл также является следствием существования подавленной критической точки, T_c . Рост локального порядка при приближении к T_c вызывает деформации, которые ведут к росту энергии упругих напряжений при понижении температуры. После определенного момента, эти напряжения делают систему термодинамически неустойчивой, что приводит к резкой реструктуризации жидкости, представляющей собой фазовый переход первого рода жидкость–кристалл при T_m [57]. По этой причине в соответствии с ТОФФ $T^* > T_m$ [50]. В таком представлении, переход первого рода жидкость–кристалл также является следствием фрустрации системы.

Помимо этого важного результата теория приводит к ряду других интересных результатов. В частности, ТОФФ-модели связывают количество геометрических фрустраций в системе с хрупкостью жидкости, в результате чего в рамках теории могут быть воспроизведены различ-

ные виды релаксационного поведения. Кроме того, удаётся объяснить разделение релаксации переохлаждённой жидкости. В соответствии с ТОФФ, медленная релаксация системы связана с перестройкой ограниченных фрустрациями доменов на масштабе ξ , а β -релаксация соответствует нефрустрированной и, следовательно, быстрой динамике на масштабах, превышающих критический масштаб, $\xi_0 \ll \xi$.

Ещё одним преимуществом ТОФФ является то, что теория естественным образом объясняет явление поли-аморфизма, т.е. сосуществования неэквивалентных аморфных фаз [57]. В частности, наличие промежуточных структурных факторов между полностью аморфным стеклом и упорядоченным кристаллом в замороженном состоянии некоторых хрупких жидкостей (таких как трифенилфосфид) предполагает, что поли-аморфное состояние представляет собой недостаточно закристаллизованную фазу, т.е. порошок полидисперсных кристаллитов, образующихся в результате конкуренции между локально упорядоченными структурами (ЛУС) и геометрическими фрустрациями. Это очень хорошо объясняется в рамках теории ТОФФ. С другой стороны, возникает вопрос, почему в обычных (неполи-аморфных) системах, стандартные методы, такие как исследование статического структурного фактора, не обнаруживают существование ограниченных фрустрациями доменов. Это может быть связано либо с чрезмерной полидисперсностью поликристалла ЛУС, либо с необычными (и до сих пор неизвестными) свойствами его симметрии. Конечно, теория ТОФФ может быть подтверждена непосредственным наблюдением ограниченных фрустрациями доменов, но пока ещё этого не про-

изошло.

1.5 Гелеобразование

Другим физическим явлением, родственным по своей природе стеклованию, является процесс гелеобразования, хорошо известный в физической химии.

Гелем называют макроскопическую сеть связанных между собой полимерных цепей. Эти ассоциации могут быть как необратимыми (химическими гелями), так и обратимыми (физическими гелями). Химические гели образуются в результате сшивания полимеров сильными химическими связями (например, вулканизация), в то время как физические гели могут быть образованы множеством различных типов взаимодействий, таких как Вандервальсовские взаимодействия, водородные связи, и электростатические взаимодействия.

Связывание в гелевую сеть обусловлено образованием локальных связей и является результатом действия короткодействующих взаимодействий, которые, однако, формируют длинные цепочки образуя макроскопические сети. Сборка длинных полимеров с помощью коротких связей в пространственно распределенную сеть не является однородной.

В отличие от упорядоченной кристаллической структуры, микроскопическая структура гелевой сети случайна и в ней нет дальнего порядка. Считается, что неоднородность вкупе с аperiодической структурой приводят к тому, что полимерный гель обладает свойствами как жидких, так и твердых веществ. На коротких временных масштабах,

неоднородные микро-структуры подобно твёрдым веществам остаются эластичными и имеют механически фиксированную форму. Но на длительных временных периодах, апериодические структуры в геле термически нестабильны по сравнению с периодической структурой кристалла; эти структуры способны медленно эволюционировать, что придаёт системе свойства жидкости, например, конечную вязкость. Эти свойства гелей полностью совпадают со свойствами стеклющихся систем.

В случае образования химического геля переход золь-гель является естественным примером перколяции [65], который характеризуется появлением макроскопического кластера. Точка гелеобразования определяется как критическая точка теории протекания, которая характеризуется пороговой вероятностью существования связи (“бонд”-задача), или заполнения узла (“сайт”-задача) размещения вероятности. Если количество связей превышает критическое значение, то в системе происходит перколяция (она в фазе геля), среди малых кластеров существует макроскопический бесконечный (перколяционный) кластер; ниже критического порога, присутствуют только конечные кластеры, и система находится в золь-фазе. Вблизи порога протекания физические свойства, включая распределение вероятностей конечных кластеров, являются универсальными и могут быть рассчитаны в рамках теории перколяции.

Однако, перколяционная модель оказывается неприменимой в случае обратимого геля. Причина этого — неоднозначность определения перехода золь-гель в перколяционной сети со слабыми связями [66, 67,

68, 69, 70, 71] и зависимость этого перехода от динамических свойств системы [72, 73]. Полученные результаты свидетельствовали о том, что при теоретическом описании образования слабого геля, так же как и при описании стекольного перехода, необходимо отказаться от перколяционной картины и строить модель обратимого гелеобразования, основанную на микроскопии и учитывающую динамику микроскопических процессов.

1.6 Связь между процессом образования слабого геля и стекольным переходом

В обратимом геле структура сети может трансформироваться в результате разрывов и восстановления связей. Поэтому, помимо эластичности, свойственной твердому телу, обратимый гель обладает динамическими свойствами жидкостей, что становится особенно заметным на больших временных масштабах. В практических приложениях считается, что гелеобразование происходит в момент, когда система приобретает конечный модуль упругости при низких частотах (от 1 до 10³ Гц).

В [74] было обнаружено, что динамические свойства гелевой фазы (но не золь-фазы, т. е. при температуре ниже точки гелеобразования) непосредственно зависят от времени жизни и числа обратимых связей. Кроме того, была рассчитана частотная зависимость динамического модуля и масштабирование вязкости вдали от точки гелеобразования. Результаты расчётов подтверждают предположение, что обратимый гель состоит из временных сетеподобных структур, и динамика систе-

мы определяется разрушением отдельных связей, а не мезоскопических кластеров.

Эксперименты и моделирование показали, что процесс обратимого гелеобразования имеет много общего со стеклованием, и гелевая фаза, как правило, характеризуется статической неоднородностью и нарушением эргодичности; в частности, динамические свойства зависят от релаксационных процессов как на мезоскопических, так и на микроскопических масштабах.

В [75] было изучено обратимое гелеобразование в слабо притягивающихся коллоидных системах с помощью рассеяния света. При сравнении наблюдаемых на эксперименте свойств со свойствами стекольного перехода, обнаружили следующие особенности: во-первых, неэргодические образцы напоминают аморфные стёкла, которые обладают свойствами нормальных твёрдых веществ, но не имеют дальнего кристаллического порядка. Во-вторых, гелеобразование аналогично стеклованию, так как это плавный переход, который происходит в конечном интервале температур, и не имеет порогового характера. Кроме того оба перехода сопровождаются кроссовером динамических характеристик, а окончательный распад функции динамического рассеяния света аналогичен таковому в структурных стёклах и характеризуется расхождением по степенному закону. Промежуточные функции рассеяния имеют тот же скейлинговый вид, какой предсказывает теория взаимодействующих мод для стеклования [76]. При исследовании обратимого перехода золь-гель в системе, состоящей из поливинилового спирта, Конго красного, и воды были обнаружены два типа релаксации

аналогичные, соответственно, α -релаксации и β -релаксации, наблюдаемых в стёклах [77, 78]. Аналогичные результаты были получены для желатина [79]. Кроме того, моделирование методом Монте-Карло фазовой диаграммы и процесса гелеобразования обратимо связанных полимеров [72, 73] показало, что при высоких температурах (энергия связи порядка kT), “Гель”-структура характеризуется геометрической перколяцией (связанной сетью), не обладает характерными реологическими свойствами геля, например, эластичностью, на малых временных масштабах. Вместо этого, изменение динамических свойств происходит вблизи так называемого “перехода кластеризации”, что приводит к резкому увеличению времени жизни кластера на небольшом интервале температур. Этот переход похож на стеклование в стеклообразующих жидкостях. Кроме того, результаты вычислений коэффициента диффузии хорошо описываются законом Фогеля-Фулчера-Таммана, который, как говорилось ранее, описывают релаксацию в “хрупких” стеклах.

Полученные результаты показывают, что (1) обратимые гели характеризуются нарушением эргодичности (статической неоднородностью), (2) релаксация вблизи точки гелеобразования очень похожа на релаксацию в переохлажденных жидкостях вблизи точки стеклования, как правило, характеризуется степенной температурной зависимостью для стеклообразного состояния и экспоненциальной Аррениусовской зависимостью для жидкого состояния; (3) в случае “слабого” взаимодействия (энергия связи сравнима с kT) происходит физическое гелеобразование, которое характеризуется динамическим переходом,

обычно сопровождающимся геометрической перколяции.

Сходство между обратимым гелеобразованием и стеклованием очевидно и с микроскопической точки зрения. Например, при низкой концентрации полимеры в растворе образуют мицеллы, при увеличении концентрации образуются мицеллы с большим числом агрегации, и, наконец, эти мицеллы пересекаются друг с другом с образованием макроскопической сети связанных полимеров. Тем самым гелеобразование имеет сходство с микрофазными переходами порядок-беспорядок в растворе ассоциированных полимеров. Однако, поскольку эти мицеллы имеют различные размеры, их упаковка может происходить случайным образом образуя структуру, схожую со случайной плотной упаковки шаров, что также свойственно стекольным переходам. Это микроскопическое сходство между полимерными гелями и “хрупкими” стёклами также отражается и на схожести их физических свойств, включая неравновесную релаксацию и частичное нарушение эргодичности.

Обратимое гелеобразование по существу связано с микрофазным переходом в системе, и его можно рассматривать как “стеклование”, альтернативное переходу упорядочения, или, говоря другими словами, переход от неупорядоченной жидкой фазы к твердо-подобному состоянию со случайной структурой, которое может по-прежнему медленно течь.

1.7 Выводы к главе 1

1. Из анализа литературы следует, что стекольный переход является универсальным явлением и наблюдается в конденсированных системах с различной физической природой демонстрируя при этом общие свойства: критическое замедление, сглаженный пик теплоёмкости, конечный скач к восприимчивости, расходимость нелинейной части восприимчивости, скач к параметра порядка Эдвардса-Андерсона.
2. Имеющиеся экспериментальные факты с одной стороны указывают на сходство стекольного перехода с термодинамическим фазовым переходом второго рода: универсальность, критическое замедление; скач к теплоёмкости; расходимость нелинейной части восприимчивости; скач к параметра порядка Эдвардса-Андерсона, но при этом демонстрируют свойства указывающие на его динамическую природу: зависимость температуры стеклования от скорости охлаждения; отсутствие дальнего порядка в стекольном состоянии.
3. В настоящее время не существует микроскопической аналитической модели, позволяющей в полной мере теоретически описать стекольный переход.

2 Неравновесная динамика квази-неэргодической конденсированной системы

В этой главе кратко изложены функциональные методы неравновесной динамики, на которых основана диссертационная работа: метод динамического производящего функционала, и Келдышевская техника описания динамики неравновесных систем (метод келдышевского функционала). Затем в мягкой модели спинового стекла Эдвардса-Андерсона показан вывод уравнения теории связанных мод методом келдышевского функционала. Обсуждается возможность использования функциональных методов для описания квази-неэргодических фрустрированных систем, для чего предлагается способ введения ультраметрии времён релаксации системы в метод келдышевского функционала. Основным кинетическим свойством, исследуемым при изучении стекольных переходов, является вязкость, поэтому в данной главе предложено теоретическое описание кроссовера вязкости, свойственного стеклующимся жидкостям.

2.1 Введение

Развитие аналитических методов исследования квази-неравновесных процессов в неупорядоченных системах является актуальной задачей [80]. Одной из основных проблем кинетики неупорядоченных систем является наличие широкого спектра времён релаксации, который сильно усложняет написание каких либо кинетических уравнений из-за трудностей, связанных с разделением масштабов на “быстрые” и “медленные”. Кроме того, имеется стандартная для таких систем проблема с усреднением по беспорядку и по пространству состояний. Решаются эти проблемы разными способами. Наиболее общий подход основан на суперсимметричной технике, в которой динамические уравнения типа Ланжевена записываются в виде функционального интеграла с комплексными и грассмановыми полями, учитывающего детерминант динамических уравнений, см., например, [6]. К сожалению, этот подход не получил широкого распространения из-за нефизичности грассмановых полей и громоздкости метода. Поэтому при решении большинства динамических задач обычно используются численные методы, основанные на “приближении связанных мод” [6, 81], которое лишь только в некоторых предельных случаях имеет обоснование (например, в рамках суперсимметричного метода [82, 83, 6]). При этом, практически не существует других аналитических описаний кинетики стекольных систем, существенно выходящих за рамки приближения среднего поля. Поэтому, нахождение аналитического непертурбативного описания кинетики стекольных систем остаётся фундаментальной задачей теории

неравновесных систем.

2.2 Метод динамического производящего функционала

Прежде всего приведём общую информацию об уравнениях стохастической динамики и об их сведении к континуальным моделям. В качестве исходных динамических уравнений обычно записывают уравнения Ланжевена со случайными силами $\xi(\mathbf{r}, t)$:

$$\Phi\{\varphi(\mathbf{r}, t)\} \equiv \frac{\partial \varphi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathcal{A} \frac{\delta H}{\delta \varphi(\mathbf{r}, t)} - \xi(\mathbf{r}, t), \quad (21)$$

где H — заданный t -локальный (т.е. зависящий лишь от полей φ и их производных) функционал, $\mathcal{A}$ — кинетический коэффициент Онзагера, обратно пропорциональный времени релаксации системы. Шум ξ соответствует тепловым флуктуациям, обычно для ξ предполагается гауссово распределение с нулевым средним $\langle \xi(\mathbf{r}) \rangle = 0$ с заданным коррелятором:

$$\langle \xi(\mathbf{r}, t) \xi(\mathbf{r}', t') \rangle = 2\mathcal{A} \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (22)$$

Выбор коррелятора (2.2) определяется требованиями взаимной согласованности динамики и статики, такой шум не коррелирован и имеет бесконечный равномерный частотный и пространственный спектры.

Для того чтобы перейти к полевому описанию системы запишем её статистическую сумму в виде континуального интеграла:

$$\hat{Z} = \int \prod_{\mathbf{r}, t} D\varphi(\mathbf{r}, t) \delta(\Phi\{\varphi(\mathbf{r}, t)\}) |\det(\delta\Phi\{\varphi(\mathbf{r}, t)\} / \delta\varphi(\mathbf{r}', t'))| \equiv 1. \quad (23)$$

С его помощью можно просуммировать все возможные состояния системы с различными конфигурациями поля φ , удовлетворяющими системе уравнений движения $\Phi\{\varphi(\mathbf{r}, t)\} = 0$, что позволяет провести усреднение по этим состояниям. Первый множитель в (2.2) представляется в виде функционала

$$\delta(X(\mathbf{r}, t)) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{\varphi} e^{i\bar{\varphi}X(\mathbf{r}, t)},$$

для чего вводится дополнительное поле $\bar{\varphi}(\mathbf{r}, t)$. Со вторым множителем в (2.2), нормирующим δ -функцию, можно поступить двумя способами: либо представить его в экспоненциальной форме с помощью дополнительных грассмановых полей, η и $\bar{\eta}$:

$$\det(X(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')) = \int_{-\infty}^{\infty} D\bar{\eta} D\eta e^{-\bar{\eta}(\mathbf{r}, t)X(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')\eta(\mathbf{r}', t')};$$

либо принять его за постоянный множитель, который, как было показано в [84], никак не влияет на результат усреднения. Первый способ представляется более последовательным, однако, с помощью диаграммной техники можно показать, что в случае локального потенциала H , интегрирование по грассмановым полям действительно сводится лишь к умножению статсуммы на дополнительный множитель [84]. В этом случае нет необходимости усложнять анализ модели оставляя грассмановы поля.

Заметим, что оба способа имеют одинаковые недостатки: они описывают системы, для которых уже определены уравнения движения (2.2) и применимы только при условии однозначности функционала $X(\mathbf{r}, t)$, что ограничивает круг задач, к которым этот метод можно

применить.

2.3 Келдышевская техника

Более универсальным представляется другой метод описания неравновесных систем, известный как метод Келдыша. Известно, что метод Келдыша, в принципе, описывает любую неравновесную систему [85, 86]. В частности, можно попытаться адаптировать метод Келдыша к описанию кинетики сильнонеупорядоченных систем типа спинового стекла. В данной работе с помощью техники функционального интеграла, обобщающей диаграммную технику Келдыша, описана кинетика стеклования. В отличие от суперсимметричного метода, этот подход позволяет обойтись без дополнительных грассмановых полей и проследить нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы в явном виде. Ниже с помощью данного метода описана кинетика модели типа мягкого спинового стекла Эдвардса-Андерсона и воспроизведены уравнения молекулярного поля для параметра порядка спинового стекла, которые раньше были получены методом суперсимметрии. Рассмотрена также динамика модели Эдвардса-Андерсона во флуктуационной области вблизи перехода парамагнетик-стекло. Традиционно при описании динамики долины не рассматриваются [80]. Ниже будет показано, что для (микроскопического) учета ультраметрии времен релаксации все-же необходимо ввести долины в динамику, в нашем случае, в келдышевскую технику. Существенной особенностью рассматриваемой теории и одним из ключевых результатов является появление в процессе перенормировки эффективных температур $T_{\alpha\beta}$, характеризу-

ющих состояния, в которых долины α и β находятся в равновесии между собой. Только в случае, когда $\alpha = \beta$, флуктуационно-диссипативная теорема (ФДТ) будет выполняться. Динамика типа Фогеля-Фулчера-Таммана развивается тогда, когда в пространстве долин в процессе динамической перенормировки келдышевского действия полностью нарушается ФДТ.

2.3.1 Келдышевский функционал

Покажем, как можно описать динамику спинового стекла с помощью функциональной техники Келдыша. Рассмотрим кинетику скалярного поля $m(\mathbf{r})$, описывающего, например, локальную “намагниченность” в модели Изинга, где $\mathbf{r}$ – пространственная координата.

Для того, чтобы рассмотреть диссипативную динамику данной системы, поступим стандартным образом [86]: будем считать, что скалярное поле взаимодействует с тепловым резервуаром, посредством поля $\phi(x)$. Тогда келдышевская статсумма для этой системы может быть представлена в форме функционального интеграла:

$$Z = \int Dm D\phi \exp \left\{ i \int_{\mathcal{C}} dt \int d\mathbf{r} ((\partial_t m)^2 - H[m] + \sqrt{\Gamma} \int m(\partial_x \phi)_{x=0}) + i S_{\text{osc}}[\phi] \right\}, \quad (24)$$

где H – гамильтониан скалярного поля, $\mathcal{C}$ – келдышевский контур, S_{osc} – келдышевское действие теплового резервуара, Γ – константа взаимодействия системы с тепловым резервуаром.

Как и в методе функционального интегрирования, при описании динамики неравновесной системы с помощью Келдышевской техники

количество описывающих её полей удваивается по сравнению с равновесной системой. Основной технический трюк метода заключается в том, что вместо обычного интегрирования по временному интервалу $t \in (-\infty, \infty)$ вводится келдышевский контур интегрирования по времени (см. рис. 13), условно состоящий из двух идентичных частей “верхней” и “нижней”. На “верхней” части контура определено поле m^+ , на “нижней” части $-m^-$, интегрирование по времени на “верхней” и “нижней” частях келдышевского контура производится в противоположных направлениях. Оператор H действует на поля m^+ и m^- абсолютно одинаково, в одни и те же моменты времени. Контур интегрирования начинается в момент времени $-\infty$, когда оператор H ещё не действует на систему, и заканчивается в тот же момент времени, $-\infty$, таким образом, статистическая сумма, определяемая как $Z = \langle -\infty | S | -\infty \rangle = \langle -\infty | -\infty \rangle (| -\infty \rangle$ — вектор основного состояния системы в момент времени $-\infty$), всегда будет равна единице, $Z = 1$ [86]. Предполагается, что контур интегрирования по времени может быть замкнут справа в точке t' (рис. 13), соответствующей моменту времени, в который наблюдается неравновесная система, поскольку мы постулируем, что будущее не может влиять на состояние системы в настоящий момент времени.

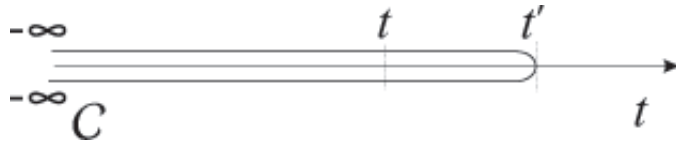


Рис. 13: Контур интегрирования по времени в келдышевской технике.

Важно, что производящий функционал $Z = 1$ в отсутствие внеш-

них полей-источников, имеющих разное значение на верхней и нижней частях Келдышевского контура, так как интегрирование по времени на верхней и нижней частях келдышевского контура производится в противоположных направлениях [86]. Это замечательное свойство позволяет производить усреднение по статистическому ансамблю неравновесной системы.

Произведём келдышевский поворот переменных, введя так называемые “квантовые” и “классические” степени свободы, полуразность и полусумму значений m на верхней и на нижней частях контура соответственно, ($\vec{m} = \{m^{(q)}, m^{(cl)}\}$). Проинтегрировав по степеням свободы, связанным с резервуаром, получим эффективное действие, описывающее диссипативную динамику нашей системы [85, 86]:

$$Z = \int \int D\vec{m} \exp \{iS_{\text{eff}}[m]\},$$

$$S_{\text{eff}} = \int dt d\mathbf{r} \left[\frac{\Gamma}{2} \vec{m}^\tau \begin{pmatrix} 0 & \partial_t \\ -\partial_t & i4T \end{pmatrix} \vec{m} - \right. \quad (25)$$

$$\left. -H \left[m^{(cl)} + m^{(q)} \right] + H \left[m^{(cl)} - m^{(q)} \right] \right],$$

где T – температура термостата-струны. Данная техника позволяет описывать динамику любых, даже сильно неравновесных, систем.

Функции Грина классических и квантовых переменных имеют стандартный матричный вид [85]:

$$G_{ab} = -i \langle m^a(t) m^b(t') \rangle = \begin{pmatrix} G^K & G^R \\ G^A & 0 \end{pmatrix}, \quad (26)$$

где a и b — индексы классических и квантовых компонент, индексы R , A и K , как обычно, обозначают запаздывающую, опережающую

и келдышевскую функции Грина соответственно. Мы рассматриваем классический предел Келдышевской техники и, поэтому, достаточно разложить H до первого порядка по $m^{(q)}$. Это аналогично методу динамического производящего функционала [87, 88, 84, 89]. Седло действия (25) соответствует стандартному уравнению Ланжевена:

$$\frac{\Gamma}{2}\partial_t m = -\frac{\delta H}{\delta m(\mathbf{r}, t)} + \xi(\mathbf{r}, t), \quad (27)$$

$$\langle \xi(\mathbf{r}, t)\xi(\mathbf{r}', t') \rangle = \Gamma T \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t'). \quad (28)$$

Ниже будет рассмотрено применение изложенной техники к исследованию ультраметрической динамики стекольных систем.

2.4 Динамическое решение неупорядоченной мягкой модели спинового стекла методом келдышевского функционала

2.4.1 Вывод уравнения теории связанных мод

В случае, когда поле m является медленно меняющейся функцией, описывающий систему гамильтониан можно записать так: $H[m] = \int dx \{U(m) + a_1|\nabla m|^2 + \dots\}$, где $U(m)$ — потенциальная энергия, а многоточием обозначены остальные (нелокальные) члены по m с высшими градиентами. Для удобства расчетов рассмотрим решеточный вариант данной системы, так что $\mathbf{r}$ пробегает узлы некоторой решетки. Будем считать, что гамильтониан инвариантен относительно преобразования $m \rightarrow -m$. Тогда, данный гамильтониан на решетке выглядит

следующим образом:

$$H[m] = - \sum_{ik} J_{ik} m_i m_k + \sum_i U_i[m_i],$$

где J_{ik} [$J_{i=k} \equiv 0$] некоторая симметричная матрица, описывающая нелокальные члены в гамильтониане [для простоты мы ограничиваемся вторым порядком по m при учете нелокальности]. Локальные члены учтены в потенциальной энергии U .

Будем рассматривать систему вблизи состояния $\langle m \rangle = 0$, где усреднение подразумевает

$$\langle \dots \rangle = \int D\vec{m}(\dots) \exp \{iS_{\text{eff}}[m]\}.$$

Здесь мы учли, что в отсутствие внешних “квантовых” полей $Z = 1$.

Тогда U можно разложить по малым m :

$$U(m) = \mu^2 \frac{m^2}{2} + \frac{um^4}{8}.$$

где μ^2 и u — некоторые модельные параметры. Данная модель часто применяется для описания магнетиков. Например, при $J > 0$ она будет описывать спиновую систему, вблизи перехода парамагнетик-ферромагнетик.

В случае спинового стекла J выбирается случайной знакопеременной величиной. Для определенности, как в модели Шерингтона-Киркпатрика [90], будем считать, что матрица J принадлежит гауссовскому ортогональному ансамблю случайных матриц [91] с $\langle J_{ik} \rangle = 0$ и $\langle J_{ik}^2 \rangle = I_{ik}$. Для усреднения келдышевской статсуммы по ансамблю случайных матриц необязательно вводить долины, как в [90], так как в келдышевской технике $Z \equiv 1$ в отсутствие квантовых полей-источников,

в отличие от статсуммы в статистической механике. Это одно из преимуществ Келдышевской техники по сравнению с методами статистической механики.

После усреднения по беспорядку получим:

$$Z = \int Dm_i \exp \left\{ i \frac{1}{2} \int_{t,t'} m_i^a(t) (G_{ab,ij}^{(0)})_{t,t'}^{-1} m_j^b(t') - \int_{t,t'} I_{ik} (\vec{m}_i^\tau \hat{\sigma}_x \vec{m}_k)_t (\vec{m}_i^\tau \hat{\sigma}_x \vec{m}_k)_{t'} - iu \int_t m_i^{(\text{cl})} m_i^{(\text{q})} (m_i^{(\text{cl})})^2 \right\},$$

где матрица Паули $\hat{\sigma}_x$ действует в Келдышевском пространстве, по повторяющимся индексам здесь и ниже предполагается суммирование.

Затравочная обратная функция Грина имеет вид:

$$(G_{ab,ij}^{(0)})^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & \dots^A \\ \dots^R & \dots^K \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \Gamma \partial_t - 2\mu^2 \\ -\Gamma \partial_t - 2\mu^2 & i4\Gamma T \end{pmatrix} \delta_{ij}.$$

В приближении среднего поля статсумму можно записать в виде:

$$\begin{aligned} Z_{\text{mf}} &= \int Dm_i \exp \left\{ i \frac{1}{2} \int_{t,t'} m_i^a(t) (G_{ab,ij}^{(0)})_{t-t'}^{-1} m_j^b(t') - \right. \\ &\quad \left. 2 \int_{t,t'} I_{ik} \langle m_i^a(t) m_i^c(t') \rangle m_k^b(t) m_k^d(t') \sigma_x^{ab} \sigma_x^{cd} + \dots \right\} = \\ &= \int Dm_i \exp \left\{ i \frac{1}{2} \int_{t,t'} \vec{m}^\tau(t) (G_{ab})_{t-t'}^{-1} \vec{m}(t') \right\}, \quad (29) \end{aligned}$$

где, для упрощения иллюстрации метода, мы оставили только диагональные средние аналогично тому, как это обычно делается в “среднем поле”, см, например, [6]:

$$G_{ab}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & \Gamma \partial_t - 2\mu^2 - \Sigma^A \\ -\Gamma \partial_t - 2\mu^2 - \Sigma^R & i4\Gamma T - \Sigma^K \end{pmatrix}_{t,t'}. \quad (30)$$

Собственно-энергетические части равны, соответственно:

$$\Sigma^R = 4I_0 G^R(t) + i3u G^K(t=0)\delta(t-0) - 18u^2 G^R(t)[G^K(t)]^2, \quad (31)$$

$$\Sigma^A = 4I_0 G^A(t) + i3u G^K(t=0)\delta(t+0) - 18u^2 G^A(t)[G^K(t)]^2, \quad (32)$$

$$\Sigma^K = 4I_0 G^K - 18u^2 [G^K(t)]^3. \quad (33)$$

При выводе использовалось, что $I_0 = \sum_k I_{ik}$,

$$G^R = G_0^R + G_0^R \Sigma^R G_0^R + \dots$$

и

$$G^K = G_0^K + G_0^R \Sigma^R G_0^K + G_0^K \Sigma^A G_0^A + G_0^R \Sigma^K G_0^A + \dots$$

Легко убедиться, что Σ^K , Σ^R и Σ^A связаны флуктуационно-диссипативной теоремой.

Получим теперь уравнения диссипативной динамики из действия (29). Для этого с помощью процедуры Стратановича-Хаббарда [92] избавимся от квадратичного члена типа $\propto (m^{(q)})^2$ в действии (29):

$$\exp \left\{ i \frac{1}{2} \int_{t,t'} m^{(q)}(t) (i4\gamma T - \Sigma^K)_{tt'} m^{(q)}(t') \right\} = \int D\xi \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_{tt'} \xi(t) \left(\frac{1}{\gamma T + \frac{1}{4} \text{Im } \Sigma^K} \right)_{tt'} \xi(t') \right\} \exp \left\{ -i2 \int_t m^{(q)}(t) \xi(t) \right\}$$

Проварьировав эффективное действие по “квантовому” полю $m^{(q)}$, получим следующее уравнение движения, обобщающее уравнение Ланжевена:

$$\frac{\Gamma}{2} \partial_t m(t) = -\mu^2 m(t) - \int dt' \text{Re } \Sigma_{t-t'}^R m(t') + \xi(\mathbf{r}, t),$$

$$\langle \xi(\mathbf{r}, t) \xi(\mathbf{r}', t') \rangle = \left(\gamma T \delta(t - t') + \frac{1}{4} (\text{Im } \Sigma^K)_{\mathbf{r}, |t-t'|} \right) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Σ^K и Σ^R можно найти используя процедуру самосогласования. Следует отметить, что полученное уравнение является частным случаем уравнений теории связанных мод. Таким образом, метод Келдыша — удобный способ обоснования этой теории.

2.4.2 Исследование модели в парамагнитной области

Будем работать в парамагнитной области. Тогда можно считать, что выполняется флуктуационно-диссипативная теорема. В технике Келдыша это означает [86], что

$$G_K(\omega) = \frac{2T}{\omega} \{G_R(\omega) - G_A(\omega)\}. \quad (34)$$

Аналогичные соотношения выполняются для обратных функций Грина и для собственно-энергетических частей, Σ .

Удобно, следуя [6], ввести параметр $g \equiv -TG^{R(A)}(\omega = 0)$, который определяет восприимчивость: $\chi(\omega = 0) = g/T$. Формально это можно проверить следующим образом: ввести в действие магнитное поле источников h с классическими и квантовыми компонентами, что даст добавку в действии вида, $iS_h = \int_t \vec{m}^\tau \hat{\sigma}_x \vec{h}$. Тогда восприимчивость будет равна,

$$\begin{aligned} \chi(t - t') &= \left. \frac{\delta^2 Z}{\delta h^{(\text{cl})}(t) \delta h^{(\text{q})}(t')} \right|_{h=0} = \\ &= i \langle m^{(\text{cl})}(t) m^{(\text{q})}(t') \rangle = -G^{(R)}(t - t'). \end{aligned}$$

Используя (30) находим следующие уравнения на g , которое позволяет вычислить зависимость восприимчивости от температуры:

$$-\frac{g}{T} = G^{R(A)}(\omega = 0) = \frac{1}{-\mu^2 - \Sigma^R(\omega = 0)}. \quad (35)$$

Для того, чтобы это уравнение было замкнутым найдём $\Sigma^R(\omega = 0)$, используя (31):

$$\Sigma^R(\omega = 0) = -4I_0 \frac{g}{T} - 6ug + 24u^2 \frac{g^3}{T}. \quad (36)$$

При выводе (36) использовались функции Грина, найденные в реальном времени:

$$\begin{aligned} G_K(t) &= \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} i2 \operatorname{Im} G_R(\omega) \frac{2T}{\omega} \\ &= \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} i2 \operatorname{Im} \frac{1}{i\frac{\Gamma}{2}\omega - \frac{T}{g}} \frac{2T}{\omega} = 2ig e^{-2|t|T/\Gamma g}, \end{aligned}$$

$$G_R(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \frac{1}{i\frac{\Gamma}{2}\omega - \frac{T}{g}} = -\frac{2}{\gamma} e^{-2tT/\Gamma g} \theta(t),$$

$$\{G_R(t)[G_K(t)]^2\}_{\omega=0} = \int dt G_R(t)[G_K(t)]^2 = \frac{4g^3}{3T}.$$

Точные решения для G^K , G^R и G^A в явном виде найти трудно. Поэтому, при выводе использовалось следующее приближение, справедливое на малых частотах $\omega \ll T/\Gamma g$:

$$G^R(\omega) = \frac{1}{i\frac{\Gamma}{2}\omega - \mu^2 - \Sigma^R(\omega)} \approx \frac{1}{i\frac{\Gamma}{2}\omega - \mu^2 - \Sigma^R(0)}.$$

В нулевом порядке по u и I_0 из (35) следует, что

$$\frac{g}{T} - \mu^2 = 0.$$

Тогда восприимчивость $\chi = \mu^{-2}$, что согласуется с теорией фазовых переходов второго рода [93] для парамагнитной области без беспорядка.

2.5 Функция Грина квази-неэргодической системы многих тел

Для того чтобы описывать кинетические свойства жидкости в области низких температур, близких к температуре стеклования, надо найти временные корреляционные функции. Основной проблемой здесь является определение корреляционной функции квази-неэргодической системы многих тел, поскольку в области переохлаждения жидкость является квази-неэргодической [94]. В этом случае величина кинетического коэффициента зависит от характерного временного масштаба, на котором проводится измерение или вычисление этой величины.

Рассмотрим простейший пример многочастичной системы: система бозе-частиц заполняющих единственный квантовый уровень с собственной энергией ω_0 . Предположим, что эта система квазинеэргодическая. В неэргодической системе траектории её движения заключены в замкнутой области пространства состояний, которое в литературе принято называть “долинами”. Принято полагать, что количество этих долин является бесконечно большим. Мы будем обозначать их греческими буквами: α , β и т.д. Мы предполагаем, что квазинеэргодическая система заключена в долине и не выходит из этой области пространства состояний за определённое конечное “время наблюдения”, τ . Геометрические структурные фрустрации ведут к попаданию системы в одну из долин, однако, при вычислении статистически средних величин необходимо учитывать все возможные конфигурации пространства состояний и, как следствие, возможность нахождения системы в

каждой из долин. В келдышевской технике это можно сделать модифицировав контур интегрирования по времени (см рис. 14).

Поскольку долины возникают в системе вследствие включения взаимодействия между её элементами, естественно полагать, что первоначальное состояние системы единственно,

$$\langle m_\alpha(t = -\infty) | m_{\beta \equiv \alpha}^\dagger(t = -\infty) \rangle \equiv 1.$$

Это позволяет использовать технику Келдыша так же, как и в случае

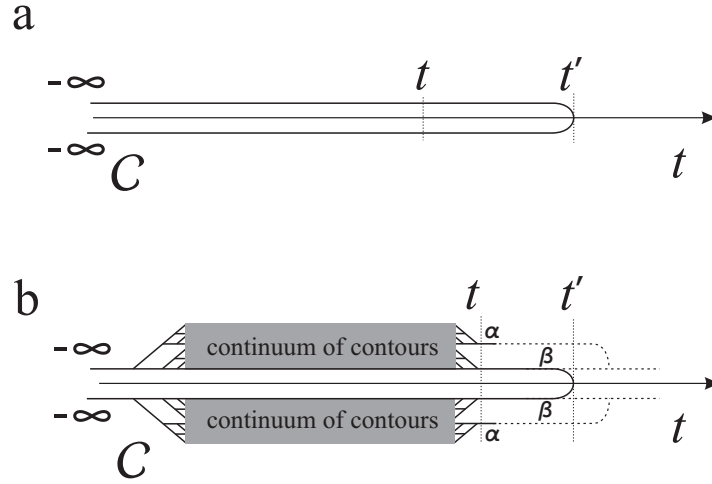


Рис. 14: Схематическое представление контура интегрирования по времени: Для того чтобы учесть бифуркации, приводящие к неэргодичности системы, мы изобразили этот контур в виде дерева Кейли.

теории без нарушения эргодичности.

Динамика квази-неэргодической системы характеризуется наличием ультраметрии времён релаксации [6], которая может быть представлена в следующем виде: Если в некоторый начальный момент времени состояния системы, находятся в различных долинах α и β , и являются взаимно независимыми, тогда корреляция полей параметра порядка m_α и m_β отсутствует. Тем не менее, по истечению времени порядка

времени релаксации $\tau_{\alpha\beta}$, необходимого для того, чтобы долины α и β пришли в равновесие, т.е. состояния, принадлежащие этим долинам, перестали быть независимыми, коррелятор принимает некоторое конечное значение $\langle m_\alpha m_\beta^\dagger \rangle \neq 0$. Время релаксации $\tau_{\alpha\beta}$ определяется расстоянием между долинами α и β в ультраметрическом пространстве, $x_{\alpha\beta}$.

Принимая во внимание ультраметрию пространства времён релаксации функцию Грина свободного поля m можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned}\langle m_+^\alpha(t) m_-^{\dagger\beta}(t') \rangle &= iG_{\alpha\beta}^<(t, t') = \theta(|t - t'| - \tau_{\alpha\beta}) n_{\alpha\beta} e^{-i\omega_0(t-t')}; \\ \langle m_-^\alpha(t) m_+^{\dagger\beta}(t') \rangle &= iG_{\alpha\beta}^>(t, t') = \theta(|t - t'| - \tau_{\alpha\beta}) (n_{\alpha\beta} + 1) e^{-i\omega_0(t-t')}; \\ \langle m_+^\alpha(t) m_+^{\dagger\beta}(t') \rangle &= iG_{\alpha\beta}^T = \theta((t - t') - \tau_{\alpha\beta}) (n_{\alpha\beta} + 1) e^{-i\omega_0(t-t')} + \\ &+ \theta((t' - t) - \tau_{\alpha\beta}) n_{\alpha\beta} e^{-i\omega_0(t-t')}; \\ \langle m_-^\alpha(t) m_-^{\dagger\beta}(t') \rangle &= iG_{\alpha\beta}^{\tilde{T}} = \theta((t - t') - \tau_{\alpha\beta}) (n_{\alpha\beta} + 1) e^{-i\omega_0(t-t')} + \\ &+ \theta((t' - t) - \tau_{\alpha\beta}) n_{\alpha\beta} e^{-i\omega_0(t-t')},\end{aligned}$$

где $n_{\alpha\beta}$ число заполнения Планка, m_+ и m_- — поле m на верхней и нижней частях келдышевского контура, соответственно. Далее удобно произвести келдышевский поворот [85], $(m_+, m_-) \rightarrow (m_{cl}, m_q)$, где $m_{cl} = (m_+ + m_-)/\sqrt{2}$ и $m_q = (m_+ - m_-)/\sqrt{2}$ называются классической и квантовой частями поля $\bar{m} = \{m_{cl}, m_q\}$, соответственно. В результате опережающая, запаздывающая и келдышевская части функции

Грина [86], действующей в пространстве (m_{cl}, m_q) , имеют вид:

$$\begin{aligned}
G_{\alpha\beta}^R(t, t') &= \frac{1}{2} \left[G_{\alpha\beta}^T - G_{\alpha\beta}^{\tilde{T}} - G_{\alpha\beta}^{<} + G_{\alpha\beta}^{>} \right] = \\
&= -i\theta((t - t') - \tau_{\alpha\beta})e^{-i\omega_0(t-t')}, \\
G_{\alpha\beta}^A(t, t') &= \frac{1}{2} \left[G_{\alpha\beta}^T - G_{\alpha\beta}^{\tilde{T}} + G_{\alpha\beta}^{<} - G_{\alpha\beta}^{>} \right] = \\
&= i\theta((t' - t) - \tau_{\alpha\beta})e^{-i\omega_0(t-t')}, \\
G_{\alpha\beta}^K(t, t') &= \frac{1}{2} \left[G_{\alpha\beta}^T + G_{\alpha\beta}^{\tilde{T}} + G_{\alpha\beta}^{<} + G_{\alpha\beta}^{>} \right] = \\
&= -i\theta(|t' - t| - \tau_{\alpha\beta})(1 + 2n_{\alpha\beta})e^{-i\omega_0(t-t')}.
\end{aligned}$$

Можно ввести в теорию эффективную температуру, $T_{\alpha\beta}$, которая характеризует состояние системы, в замкнутой области пространства состояний, объединяющей долины α и β . Таким образом, оператор корреляционной функции квазинергодической многочастичной системы бозонов в импульсно-временном представлении имеет вид:

$$\hat{G}_{\alpha\beta}(t) = \theta(|t| - \tau_{\alpha\beta}) \begin{pmatrix} -i\frac{T_{\alpha\beta}}{\omega_0}e^{-i\omega_0|t|} & -i\theta(t)e^{-i\omega_0t} \\ i\theta(-t)e^{-i\omega_0t} & 0 \end{pmatrix}. \quad (37)$$

Полученное выражение представляет собой произведение функции Грина эргодической системы, $\hat{G}_0$, и тета-функции Хевисайда, $\theta(|t| - \tau_{\alpha\beta})$. Можно видеть, что в нашей модели $\omega_0 = \varepsilon_k/\Gamma = (k^2 + a)/\Gamma$, где Γ — кинетический коэффициент системы. Рассмотрим классический предел. Тогда, предполагая, что множество времён релаксации $\tau_{\alpha\beta}$, $\{\tau_{\alpha\beta}\}$, непрерывно, и $\tau \in \{\tau_{\alpha\beta}\}$, можно переписать корреляционную функцию как

$$\langle \bar{m}\bar{m}^\dagger \rangle_{\tau, t} = \theta(|t| - \tau) \begin{pmatrix} \frac{\Gamma T(\tau)}{\varepsilon_k}e^{-\varepsilon_k|t|/\Gamma} & \theta(t)e^{-\varepsilon_k t/\Gamma} \\ -\theta(-t)e^{\varepsilon_k t/\Gamma} & 0 \end{pmatrix}, \quad (38)$$

где $T(\tau) = T_{\alpha\beta}$ at $\tau = \tau_{\alpha\beta}$.

Полученное выражение будет очень полезным в дальнейшем, поскольку оно применимо как для эргодических, так и для квазиэргодических систем: В случае, когда в системе замороженный беспорядок отсутствует, $J = 0$, выражение (38) описывает корреляционную функцию эргодической системы, поскольку система характеризуется единственным масштабом времени релаксации, $\tau = 0$, и (38) удовлетворяет условию выполнения флуктуационно-диссипативной теореме (84). Квази-нергодическая же система характеризуется спектром времён релаксации, поэтому вблизи T_g , корреляционная функция не удовлетворяет флуктуационно-диссипативной теореме, поскольку его келдышевская часть перенормируется. В однопетлевом приближении при $k \rightarrow 0$ эта перенормировка имеет вид:

$$(\Gamma T(\tau))_R \approx \Gamma T(\tau) - \frac{4\Gamma T(\tau)}{2\pi T_g^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tau \text{sinc}(\omega\tau) e^{i\omega\tau}}{(i\omega + a/\Gamma)(i\omega - a/\Gamma)} d\omega, \quad (39)$$

а опережающая и запаздывающая части остаются неизменными. Такую перенормировку можно интерпретировать как перенормировку температуры, т.е. определение для неравновесной системы некоторой эффективной температуры [95], с которой флуктуационная динамика системы может быть описана как равновесная.

2.6 Теоретическое описание кроссовера жидкость–слабый гель в стеклообразующей системе

Основным кинетическим свойством, исследуемым при изучении стекольных переходов и процессов гелеобразования, является вязкость.

В случае стекольных переходов вязкость расходится в T_g , в случае же гелеобразования резко меняется энергия активации вязкого течения жидкости, при этом часто происходит скачѳк вязкости в сторону увеличения или уменьшения его значения, в зависимости от вещества в котором он наблюдается. По своей природе стекольный переход и переход золь–слабый гель очень близки и в специализированной англоязычной литературе даже именуются одним термином “gelation” (в отечественной литературе переходы типа золь–слабый гель раньше именовали как “студнеобразование”). Температура же, при котором происходит переход от вязких свойств жидкости к вязко-упругим свойствам геля, именуется температурой стеклования, T_g . Значение этой температуры зависит от скорости деформации, с ростом частоты внешнего механического воздействия она возрастает [96].

Для того, чтобы продемонстрировать связь между стеклованием и гелеобразованием, в этом разделе будет описан кроссовер вязкости переохлаждѳнной стеклующейся жидкости при температурах, превышающих температуру стеклования, представляющий собой переход от вязкого к вязко-упругому поведению системы.

Вблизи стекольного перехода релаксационная динамика жидкости определяется кооперативными процессами, характеризующимися наличием спектра времѳн релаксации. Можно предположить, что спектр этот должен подчиняться статистике экстримальных значений и имеет вид степенной функции $\tau^{-\alpha}$, с $0 < \alpha < 1$ [97]. В этом случае релаксация напряжений описывается корреляционной функцией поля m ,

зависящей от времени:

$$G(t) = \langle mm \rangle_t \propto \int_0^{\bar{\tau}} \tau^{-\alpha} e^{-t/\tau} d\tau,$$

где $\bar{\tau}$ — максимальное время релаксации. Приближённое вычисление этого интеграла асимптотическим методом Лапласа приводит к

$$\langle mm \rangle_t \propto \bar{\tau}^{1-\alpha} e^{-t/\bar{\tau}}.$$

Согласно теории линейного отклика [98] аналитически вязкость жидкости может быть представлена с помощью формулы Кубо:

$$\begin{aligned} \eta &\approx \eta_0 + \lim_{k \rightarrow 0} \frac{1}{T} \int_0^{\infty} \langle \pi_{ij}(\mathbf{k}, t) \pi_{ij}(-\mathbf{k}, 0) \rangle_{\mathbf{k}=0} dt \\ &= \eta_0 + \frac{1}{T} \int_0^{\infty} \langle \pi_{ij} \pi_{ij} \rangle_t dt, \end{aligned} \quad (40)$$

где π_{ij} — часть тензора вязких напряжений, связанная с параметром порядка, которую можно представить в виде произведения градиента скорости, v_{ij} , и m :

$$\pi_{ij} = m(t) v_{ij}(t). \quad (41)$$

Принимая во внимание, что градиент скорости статистически не зависит от m можно приближённо считать, что

$$\langle \pi_{ij} \pi_{ij} \rangle_t \approx \langle mm \rangle_t \langle v_{ij} v_{ij} \rangle_t. \quad (42)$$

Будем полагать, что поле скоростей, быстро релаксирует с характерным временем релаксации t_{pl} , тогда $\langle v_{ij} v_{ij} \rangle_t \propto \exp(-t/t_{pl})$.

Обычно, в эксперименте существует временной масштаб, $\hat{t}$, на котором ограничено гидродинамическое движение жидкости. Принимая

это во внимание, а так же учитывая, что $t_{pl} \ll \bar{\tau}$, выражение для вязкости жидкости должно быть регуляризовано и представлено в виде:

$$\eta \approx \eta_0 + \mu \bar{\tau}^{1-\alpha} \int_{\hat{t}}^{\infty} e^{-t/t_{pl}} dt = \eta_0 + \mu \bar{\tau}^{1-\alpha} e^{-\hat{t}/t_{pl}}. \quad (43)$$

где μ — не зависящий от времени параметр, который в случае $\alpha = 0$ имеет физический смысл модуля сдвига. Существование двух характерных времён релаксации ($\bar{\tau}$ и t_{pl}) позволяет дать простую интерпретацию хорошо известному явлению термического гелеобразования: Первое слагаемое в (43) соответствует вязкости “идеальной” жидкости, а второе слагаемое учитывает эффекты, свойственные для сильно коррелированных систем с дальним взаимодействием. В предельном случае $\hat{t} \rightarrow 0$ упругие свойства системы доминируют, и $\eta(\hat{t} \rightarrow 0) \approx \eta_0 + \mu \bar{\tau}^{1-\alpha}$. Можно видеть, что при больших значениях $\hat{t}$ релаксация поля m не влияет на вязкость жидкости. Но, в случае малых значений $\hat{t}$, это влияние резко увеличивается и при $\hat{t} \rightarrow 0$ приводит к полному проявлению упругих свойств системы. В случае конечных временных масштабов, $\hat{t} \approx t_{pl}$, кроссовер от первой зависимости ко второму происходит при конечной температуре. Линия этого кроссовера представлена на рис. 15.

Описанный выше кроссовер вязкости является общим свойством вязких жидкостей, которое известно как слабое гелеобразование, студнеобразование, или термическое гелеобразование. Он имеет ту же природу, что и стекольный переход, поскольку связан с кооперативным движением упруго связанных частиц.

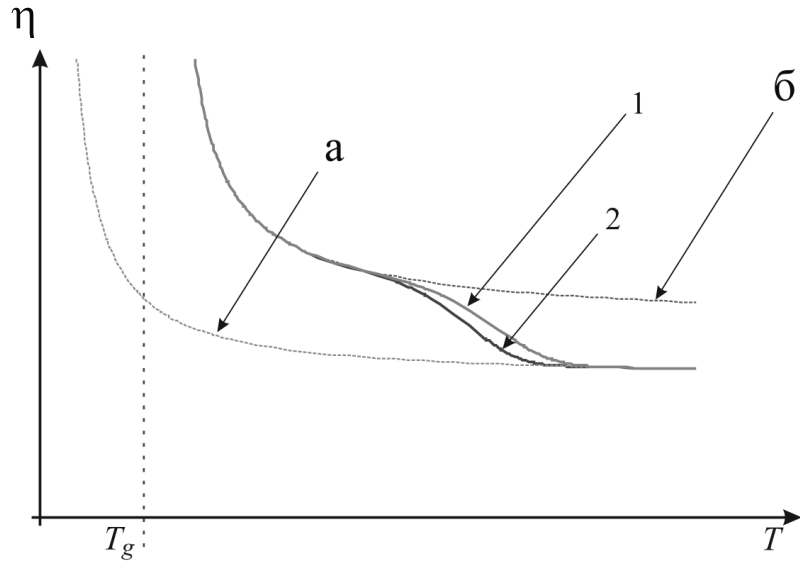


Рис. 15: Качественный вид температурной зависимости вязкости вязко-упругой жидкости вблизи перехода жидкость–стекло. (а) Ньютоновская модель, описывающая термически активируемые процессы, $\eta_0 \sim \exp(\text{const}/T)$, (б) вязкость вязкой жидкости, стремящаяся к ∞ при $T \rightarrow T_g$, (1) и (2) кроссовер от а-режима к б-режиму, соответствующий процессу слабого гелеобразования ($\hat{t}_1 < \hat{t}_2$). Изображённый эффект также называется “термическим гелеобразованием”.

2.7 Выводы к главе 2

1. Предложен способ теоретического описания неравновесной динамики квази-неэргодической конденсированной системы с помощью техники Келдыша.
2. Показано, что для описания кинетики мягкой модели спинового стекла Эдвардса-Андерсона с помощью метода динамического производящего функционала, необходимо учитывать ультраметрию времён релаксации системы посредством введения долин. Впервые предложен метод описания ультраметрии времён релаксации системы в келдышевской технике.

3. Показано, что в процессе перенормировки возникает спектр эффективных температур $T_{\alpha\beta}$, характеризующих состояния, в которых долины α и β находятся в равновесии между собой. Показано, что в мягкой модели спинового стекла Эдвардса-Андерсона флуктуационно-диссипативная теорема выполняется только для одной долины, т.е. при $\alpha = \beta$.
4. Дано теоретическое описание кроссовера жидкость–слабый гель в стеклообразующей системе.

3 Описание перехода спиновая жидкость—стекло в модели Эдвардса—Андерсона с помощью метода неравновесной критической динамики

Несмотря на значительные успехи в описании динамики стеклования, которых удалось добиться к настоящему моменту, в частности в рамках теории связанных мод, весьма привлекательной остаётся идея описания стеклования в рамках флуктуационной теории фазовых переходов. На первый взгляд, с технической точки зрения, такая задача не представляет особой сложности [84]. Однако попытки описания фазовых переходов в системах с беспорядком в рамках скейлингового подхода столкнулись с серьёзными трудностями, связанными с необходимостью выхода за рамки обычных представлений флуктуационной теории фазовых переходов [99].

Часть этих трудностей обусловлена использованием статической флуктуационной теории фазовых переходов и сложностью усреднения по конфигурациям обменных интегралов. В данной главе эта задача решается с помощью метода критической динамики. В рамках метода динамического производящего функционала сделано дополнительное предположение о том, что ультраметрическое пространство долин имеет иерархическое строение и является самоподобным. Ультраметричность предполагает самоподобие системы на различных временных и пространственных масштабах, поэтому в данном случае представляется возможным построить динамическую скейлинговую теорию, в которой, с одной стороны, не нарушаются её основные принципы, а с дру-

гой стороны, учитывается ультраметричность временного пространства системы. С помощью предложенного метода удаётся описать неравновесную динамику модели стекла Эдвардса-Андерсона вблизи стекольного перехода.

3.1 Формулировка модели в рамках метода динамического производящего функционала

Рассмотрим модель Эдвардса–Андерсона в области перехода парамагнетик–спиновое стекло. Положим, что пространство состояний фрустрированной системы разбито на долины, разделённые между собой энергетическими барьерами со сложным рельефом, и опишем состояния, соответствующие каждой долине, функциями $m_\alpha(t, \bar{r})$, где α — номер долины. Будем исходить из стандартной задачи стохастической динамики и предположим, что состояния, соответствующие различным долинам, взаимодействуют между собой. Тогда, согласно теории связанных мод, обобщение задачи на случай системы полей $\{m_\alpha(t, \bar{r})\}$ имеет вид:

$$\partial_t m_\alpha(t, \bar{r}) = - \sum_{\beta} \mathcal{A}_{\alpha\beta} \frac{\delta F\{m\}}{\delta m_\beta(t, \bar{r})} + \xi_\alpha(t, \bar{r}),$$

где ξ_α — стохастическое поле, описывающее взаимодействие системы с тепловым резервуаром,

$$\langle \xi_\alpha(t, \bar{r}) \xi_\beta(t', \bar{r}') \rangle = 2\mathcal{A}_{\alpha\beta} \delta(\bar{r} - \bar{r}') \delta(t - t'),$$

здесь индексы α и β нумеруют моды (долины), $\mathcal{A}_{\alpha\beta}$ — коэффициенты межмодовой (междолинной) связи,

$$F\{m_\alpha(t)\} = \int d^d r \left[\frac{1}{2} (\nabla m_\alpha(t, \bar{r}))^2 + \frac{1}{2} (\mu^2 + \varrho J_\alpha(\bar{r})) m_\alpha^2(t, \bar{r}) + \frac{1}{4} v m_\alpha^4(t, \bar{r}) \right],$$

а $J_\alpha(\bar{r})$ — поле случайных взаимодействий ($\langle J \rangle = 0$). Для удобства перейдём от оператора $\mathcal{A}_{\alpha\beta}$ к обратному оператору $\Gamma_{\alpha\beta} = \mathcal{A}_{\alpha\beta}^{-1}$, тогда

задача принимает следующий вид:

$$\sum_{\beta} \Gamma_{\alpha\beta} \partial_t m_{\beta}(t, \bar{r}) = -\frac{\delta F\{m\}}{\delta m_{\alpha}(t, \bar{r})} + \zeta_{\alpha}(t, \bar{r}),$$

$$\langle \zeta_{\alpha}(t, \bar{r}) \zeta_{\beta}(t', \bar{r}') \rangle = 2\Gamma_{\alpha\beta} \delta(\bar{r} - \bar{r}') \delta(t - t').$$

Воспользуемся функциональным методом для сведения стохастической задачи к квантовополевой модели и запишем полный динамический производящий функционал для функций $m_{\alpha}(t, \bar{r})$:

$$\Phi\{m\} = \prod_{t, \bar{r}, \alpha} \delta \left(\sum_b \Gamma_{\alpha b} \partial_t m_b(t, \bar{r}) + \frac{\delta F\{m\}}{\delta m_{\alpha}(t, \bar{r})} - \zeta_{\alpha}(t, \bar{r}) \right) \times$$

$$\left| \det \left(\Gamma_{\alpha\beta} \delta(\bar{r} - \bar{r}') \partial_t + \frac{\delta^2 F\{m\}}{\delta m_{\alpha}(t, \bar{r}) \delta m_{\beta}(t', \bar{r}')} \right) \right|.$$

Можно показать, что в случае чисто диссипативной задачи стохастическое уравнение имеет только одно решение, поэтому в дальнейшем модуль детерминанта можно опустить [84]. Этот функционал “вырезает” из континуального интеграла по полям $m_{\alpha}(t, \bar{r})$ только такие их конфигурации, которые удовлетворяют исходной стохастической задаче, и представляет собой аналог функции распределения в теории вероятности. Интегрируя по случайному полю ζ получаем:

$$Z = \left\langle \int \left(\prod_{\alpha} Dm_{\alpha} Dm'_{\alpha} \right) \exp [S\{m, m', J\}] \right\rangle_J, \quad (44)$$

где

$$\begin{aligned}
S\{m, m', J\} = \sum_{\alpha\beta} \int dt d^d r \left[\Gamma_{\alpha\beta} m'_\alpha(t, \bar{r}) m'_\beta(t, \bar{r}) - \right. \\
\Gamma_{\alpha\beta} m'_\alpha(t, \bar{r}) \partial_t m_\beta(t, \bar{r}) + m'_\alpha(t, \bar{r}) \nabla^2 m_\alpha(t, \bar{r}) - \\
\mu^2 m'_\alpha(t, \bar{r}) m_\alpha(t, \bar{r}) - \varrho J_\alpha(\bar{r}) m'_\alpha(t, \bar{r}) m_\alpha(t, \bar{r}) - \\
\left. v m'_\alpha(t, \bar{r}) m_\alpha^3(t, \bar{r}) \right]. \quad (45)
\end{aligned}$$

3.2 Коррелятор поля J

Важным шагом к окончательной формулировке нашей модели является учёт ультраметричности пространства долин (и, соответственно, пространства времён релаксации) [6]. Сделаем это следующим образом: Будем рассматривать взаимодействия J в качестве дополнительного статического (или очень медленного) поля, и будем полагать, что в некоторый начальный момент времени, когда состояния в двух различных долинах, α и β , не связаны между собой, усреднение по случайным реализациям поля J производится независимо для каждой долины, поэтому нет корреляции между J_α и J_β . Однако, по истечении некоторого времени $\tau_{\alpha\beta}$, которое необходимо для того чтобы долины пришли к равновесию, их состояния перестают быть независимыми и усреднение по J становятся общим. Таким образом, коррелятор $\langle J_\alpha(t) J_\beta(t') \rangle = 0$ (угловые скобки означают усреднение по всему статистическому ансамблю, включая J), если время меньше некоторого характерного масштаба $\tau_{\alpha\beta}$, и $\langle J_\alpha(t) J_\beta(t') \rangle = 1$ при $|t - t'| > \tau_{\alpha\beta}$. В результате, коррелятор случайных взаимодействий с учётом ультрамет-

ричности пространства долин можно представить в виде ступенчатой функции (рис. 16):

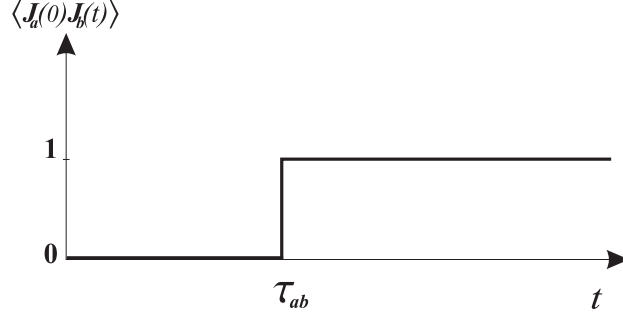


Рис. 16: Графическое представление коррелятора $\langle J_\alpha(t)J_\beta(t') \rangle$.

$$\langle J_\alpha(t, \bar{r})J_\beta(t', \bar{r}') \rangle = \theta(|t - t'| - \tau_{\alpha\beta})\delta(\bar{r} - \bar{r}'). \quad (46)$$

Характерный масштаб времени $\tau_{\alpha\beta}$ определяется расстоянием между долинами α и β в ультраметрическом пространстве, $x_{\alpha\beta}$. Для простоты без ограничения общности можно выбрать эту зависимость в виде: $\tau_{\alpha\beta} \sim e^{\sigma x_{\alpha\beta}}$ [6], где σ — некоторый параметр ультраметрического пространства.

3.3 Формулировка модели с помощью Келдышевского формализма

Представим ту же модель с помощью Келдышевского формализма, учитывая ультраметрическую иерархию времен релаксации на микроскопическом уровне явным образом. Для этого необходимо ввести понятие долин в ультраметрическом пространстве состояний. Долины нужны здесь не для “правильного” усреднения по беспорядку (в келдышевской технике нет этой проблемы, как указывалось выше), как

в термодинамике, а для введения динамического ультраметрического пространства состояний. Тогда модель можно переписать в следующем виде:

$$H_\alpha = -\frac{1}{2} \sum_{ik} J_{\alpha ik} m_{\alpha i} m_{\alpha k} + \frac{1}{2} \sum_i |\nabla m_{\alpha i}|^2 + U(m_{\alpha i}),$$

$$U(m) = \frac{1}{2} \mu^2 m^2 + \frac{1}{4} v m^4, \quad \langle J_{ik} \rangle = 0,$$

$$\langle J_{\alpha ik}(t) J_{\beta ik}(t') \rangle = \delta_{ik} \theta(|t - t'| - \tau_{\alpha\beta}),$$

где α — индекс долины, показывающий в какой долине локализована система, и $\mu^2 \propto (T - T_g)/T_g$.

В келдышевском представлении действие рассматриваемой модели имеет вид:

$$Z = \int D\vec{m} D J \exp[iS] = \int D\vec{m} D J \exp[iS_m + iS_J + iS_{\text{int}}], \quad (47)$$

где $D\vec{m} = \prod_\alpha d\vec{m}_\alpha$, $\vec{m} = \{m^{(\text{cl})}, m^{(\text{q})}\}$ — параметр порядка, в то время как J — случайное внешнее поле, которое, в отличие от m , не является свободным,

$$S_m = \frac{1}{2} \int_t \vec{m}_\alpha(t) G_{\alpha\beta}^{-1}(t - t') \vec{m}_\beta(t'),$$

$$S_J = \frac{1}{2} \int_{t,t'} J_\alpha(t) D_{\alpha\beta}^{-1}(t, t') J_\beta(t'),$$

и

$$S_{\text{int}} = - \int_t \varrho J_\alpha(t) m_\alpha^{\text{cl}} m_\alpha^{\text{q}} - v \int_t m^{\text{cl}} m^{\text{q}} [(m^{\text{cl}})^2 + (m^{\text{q}})^2],$$

где ϱ — эффективный заряд, меняющийся в процессе перенормировки (без перенормировки $\varrho \equiv 1$). Корреляционную функцию $G_{\alpha\beta}$ будет удобнее записать в виде (37):

$$\hat{G}_{\alpha\beta}(t) = \theta(|t| - \tau_{\alpha\beta}) \begin{pmatrix} \frac{2\Gamma T_{\alpha\beta}}{\varepsilon_k} e^{-\varepsilon_k |t|/\Gamma} & \theta(t) e^{-\varepsilon_k t/\Gamma} \\ -\theta(-t) e^{\varepsilon_k t/\Gamma} & 0 \end{pmatrix}, \quad (48)$$

где $\varepsilon_k = k^2 + \mu^2$. Корреляционная функция $D_{\alpha\beta}$ в импульсном представлении имеет вид:

$$D_{\alpha\beta}(\omega) = \left[\pi i \delta(\omega) - i \frac{\sin(\omega \tau_{\alpha\beta})}{\omega} \right].$$

Величина $T_{\alpha\beta}$ имеет смысл эффективной температуры, общей для долин α и β . В этом представлении хорошо видно, что корреляционная функция поля J состоит из двух частей:

$$D_{\alpha\beta}(\omega) = D_{\alpha\beta}^s(\omega) + D_{\alpha\beta}^f(\omega),$$

где

$$D_{\alpha\beta}^f(\omega) = -i \frac{2 \sin(\omega \tau_{\alpha\beta})}{\omega},$$

это “быстрая” часть, и

$$D_{\alpha\beta}^s(\omega) = 2\pi i \delta(\omega) = \lim_{\tau \rightarrow 0} i \frac{2 \sin(\omega \tau)}{\omega},$$

это “медленная” (стационарная) часть функции Грина поля J . В равновесном случае все долины совпадают, поэтому $\tau_{\alpha\beta} = 0$, и в (72) остается только стационарная часть.

Представим корреляционные функции $\langle m_q m_{cl} \rangle$, $\langle m_{cl} m_{cl} \rangle$, и $\langle JJ \rangle$ в виде графов а, b и c соответственно (рис. 17). Если в (47) перейти

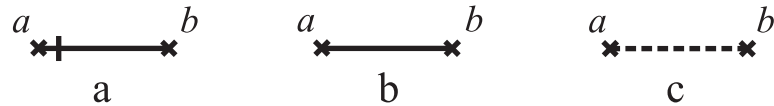


Рис. 17: Диаграммное представление корреляторов входящих в модель полей.

от интегрирования по it интегрированию по t и переобозначить поля и параметры: $m^{(q)} \rightarrow m'$, $m^{(cl) \rightarrow m}$, $\Gamma_{\alpha\beta} \rightarrow \gamma T$ (при $\alpha = \beta$), то

из (44) и (47) можно видеть, что техника динамического производящего функционала и келдышевская техника в классическом пределе представляют модель. Будем полагать, что в каждой долине температура равна общему значению T , и когда долины совпадают, они могут характеризоваться этой температурой, в случае же $\alpha \neq \beta$ использование термина “температура” теряет всякий смысл, поскольку долины не находятся в равновесии.

3.4 Процедура перенормировки

Исследуем систему, описываемую в (44) и (47), вблизи критической температуры T_g с помощью методов критической динамики [84]. Перенормировка будет производиться в парамагнитной области, $T > T_g$. Полученная теория является перенормируемой, поскольку при перенормировке действие сохраняет свой исходный вид. Из структуры пропагатора (48) видно, что процедура перенормировки останавливается на масштабах частот $\gtrsim \omega_{\min} = \mu^2/\Gamma$. Для каждой пары долин определена своя система уравнений ренормализационной группы. Существенной особенностью рассматриваемой модели и одним из наших ключевых результатов является введение эффективных температур $T_{\alpha\beta}$, характеризующих состояния, в которых долины α и β находятся в равновесии между собой. Выражение (48) в общем случае не удовлетворяет ФДТ. Только в случае, когда $\alpha = \beta$, т.е. система характеризуется одной температурой общего теплового резервуара, ФДТ будет выполняться. Если пренебречь недиагональной частью $T_{\alpha\beta}$, то действие окажется неперенормируемым.

Ренормированное эффективное действие имеет следующий вид:

$$S^{(R)}\{m^{cl}, m^q, J\} = \sum_{ab} \int d\omega d^d k \left[Z_1 m_\alpha^q m_\beta^q + Z_2 \omega m_\alpha^q m_\alpha^{cl} - \right. \\ \left. Z_3 k^2 m_\alpha^q m_\alpha^{cl} - Z_4 m_\alpha^q m_\alpha^{cl} - Z_5 J_\alpha m_\alpha^q m_\alpha^{cl} - Z_6 m_\alpha^q m_\alpha^{cl3} - \right. \\ \left. Z_7 i\omega e^{i\omega\tau_{\alpha\beta}} J_\alpha J_\beta \right].$$

где $Z_1 = Z_{\Gamma_{ab}} Z_{m^q}^2$, $Z_2 = Z_{\Gamma_{ab}} Z_{m^q} Z_{m^{cl}}$, $Z_3 = Z_{m^q} Z_{m^{cl}}$, $Z_4 = Z_{\mu^2} Z_{m^q} Z_{m^{cl}}$, $Z_5 = Z_\varrho Z_J Z_{m^q} Z_{m^{cl}}$, $Z_6 = Z_v Z_{m^q} Z_{m^{cl}}^3$, $Z_7 = Z_\chi Z_J^2$ — соответствующие константы перенормировки. Канонические размерности полей и параметров этой модели, определяемые требованием безразмерности действия неперенормированной модели [84], приведены в таблице:

F	k, ∇	ω, ∂_t	Γ_{ab}	m^{cl}	m^q	J	μ^2	ϱ	v
d_F^k	1	0	2	$-1 - \frac{d}{2}$	$-1 - \frac{d}{2}$	$-\frac{d}{2}$	2	$2 - \frac{d}{2}$	$4 - d$
d_F^ω	0	1	-1	-1	0	-1	0	0	0
d_F	1	$z=2$	0	$-3 - \frac{d}{2}$	$-1 - \frac{d}{2}$	$-2 - \frac{d}{2}$	2	$2 - \frac{d}{2}$	$4 - d$

Прежде всего рассмотрим ренормировку вершин μ^2 , ϱ и v : Ренормировка μ^2 выглядит следующим образом (рис. 18):

$$Z_{\mu^2} \delta_{\alpha\beta} = \mu^2 \delta_{\alpha\beta} - \Sigma_1^{\mu^2}{}_{\alpha\beta} - \Sigma_2^{\mu^2}{}_{\alpha\beta},$$

где $\Sigma_1^{\mu^2}{}_{\alpha\beta}$ и $\Sigma_2^{\mu^2}{}_{\alpha\beta}$ — вклады в перенормировку диаграмм а) и б), соответственно. Интегрирование петель в представленных диаграммах производится по внутренним импульсам, k , и частотам, ω , в интервале $\Lambda k_0 < |k| < k_0$ ($\Lambda^z \omega_0 < |\omega| < \omega_0$, z — динамический коэффициент [89]), где k_0 — произвольно выбранная величина импульса, а $\Lambda < 0$ называется параметром регуляризации [99]. Вклад от первой диаграммы представляется следующим образом:

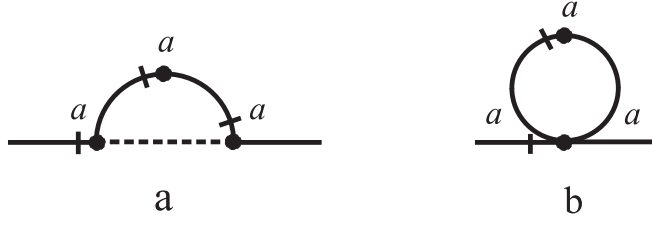


Рис. 18: Диаграммы, вносящие вклад в ренормировку вершины μ^2 (однопетлевое приближение).

$$\Sigma_1^{\mu^2}{}_{\alpha\beta} = \mu^2 \varrho^2 \frac{2\Gamma}{2!} \sum_c \int_{\Lambda^z \omega_0 < |\omega| < \omega_0} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{\Lambda k_0 < |k| < k_0} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\delta_{\alpha\beta}}{(i\omega\Gamma + \varepsilon_k)^2} \cdot \frac{e^{-i\omega\tau_{\alpha\beta}}}{i\omega\Gamma}.$$

После интегрирования по ω , принимая во внимание, что $\tau_{\alpha\alpha} = 0$, приходим к $\Sigma_1^{\mu^2}{}_{\alpha\beta} = 0$. Второй контрчлен имеет вид:

$$\Sigma_2^{\mu^2}{}_{\alpha\beta} = \frac{3 \cdot 2 \cdot 2\pi^3 \mu^2 v \delta_{\alpha\beta}}{(2\pi)^5} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right).$$

Таким образом

$$Z_{\mu^2} = \mu^2 - \mu^2 \frac{12v}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right).$$

Диаграммы, ренормирующие вершину $\varrho m_\alpha^q m_\alpha^{cl} J_\alpha$, имеют вид, представленный на рис. 19. Используя полученные выше результаты неслож-

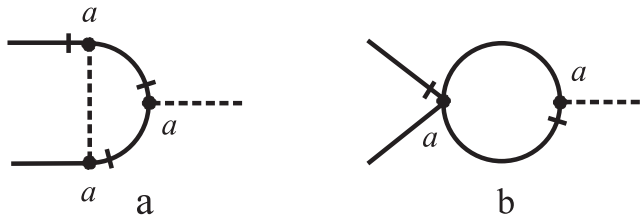


Рис. 19: Диаграммы, вносящие вклад в ренормировку вершины ϱ (однопетлевое приближение).

но показать, что перенормировка этой вершины выглядит следующим

образом:

$$Z_\varrho = \varrho - \varrho \frac{12v}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right).$$

В однопетлевом приближении диаграммы, ренормирующие вершину $vm_\alpha^q m_\alpha^{cl3}$, имеют вид, представленный на рис. 20. ($Z_v = v - \Sigma_1^v -$

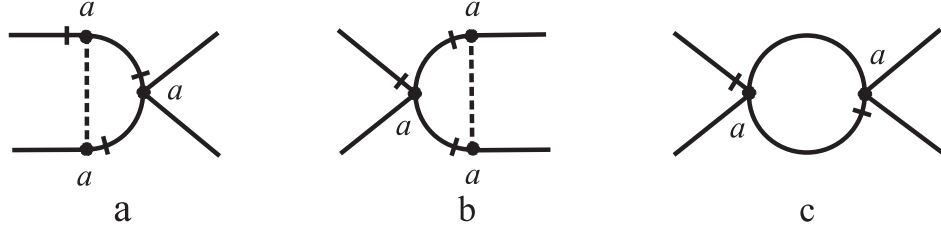


Рис. 20: Диаграммы, вносящие вклад в ренормировку вершины v (однопетлевое приближение).

$\Sigma_2^v - \Sigma_3^v$). Однако, как было показано выше, первая диаграмма даёт нулевой вклад в перенормировку ($\Sigma_1^v = 0$). Вторая диаграмма даёт:

$$\begin{aligned} \Sigma_2^v &= v\varrho^2 \frac{3 \cdot 2}{2!} \int_{\Lambda^z \omega_0 < |\omega| < \omega_0} \frac{d\Gamma\omega}{2\pi} \int_{\Lambda k_0 < |k| < k_0} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{\Gamma^2 \omega^2 + \varepsilon_k^2} \cdot \frac{e^{-i\omega\tau_{\alpha\alpha}}}{i\omega\Gamma} = \\ &= v\varrho^2 \frac{3 \cdot 2}{2!} \int_{\Lambda k_0 < |k| < k_0} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{\varepsilon_k^2} = v\varrho^2 \frac{3}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right). \end{aligned}$$

Вклад третьей диаграммы:

$$\begin{aligned} \Sigma_3^v &= \frac{2 \cdot 3 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 2}{2!(2\pi)^d} v^2 \int_{\Lambda^z \omega_0 < |\omega| < \omega_0} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{\Lambda k_0 < |k| < k_0} \frac{\Gamma d^d k}{(\Gamma^2 \omega^2 + \varepsilon_k^2)(i\omega\Gamma + \varepsilon_k)} = \\ &= v^2 \frac{36}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right). \end{aligned}$$

Таким образом, получаем:

$$Z_v = v - v^2 \frac{9}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right).$$

3.4.1 Перенормировка $\Gamma_{\alpha\beta}$

Наибольший интерес представляет ренормировка Келдышевской части функции Грина, которая делает её недиагональной в пространстве долин. В однопетлевом приближении её ренормировка имеет графический вид, приведённый на рис. 21. Присутствие θ -функции Хевисайда

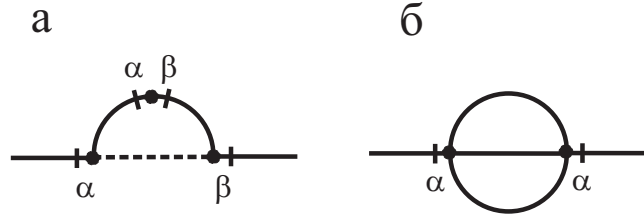


Рис. 21: Графическое представление вкладов в перенормировку вершины $m^{(cl)}m^{(cl)}$: а) $\Sigma_{1\alpha\beta}^\Gamma$ и б) $\Sigma_{2\alpha\beta}^\Gamma$

приводит к тому, на масштабах $t \ll \tau_{\alpha\beta}$ и $t \gg \tau_{\alpha\beta}$ ренормгруппа имеет разный вид: при $t \ll \tau_{\alpha\beta}$ вклад в перенормировку от первой диаграммы (рис. 22 б) отсутствует, поскольку

$$\langle J_\alpha(\mathbf{r}, 0) J_\beta(\mathbf{r}', t) \rangle = 0.$$

Поэтому

$$Z_{\Gamma_{\alpha\beta}} = \Gamma_{\alpha\beta} + \delta_{\alpha\beta} \Gamma_{\alpha\beta} \frac{3v^2}{\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right).$$

При $t \gg \tau_{\alpha\beta}$ в перенормировке участвуют оба вклада (рис. 22 а), причём

$$\langle J_\alpha(\mathbf{r}, 0) J_\beta(\mathbf{r}', t) \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

при любом $t \gg \tau_{\alpha\beta}$. В этом случае перенормировка вершины, пред-

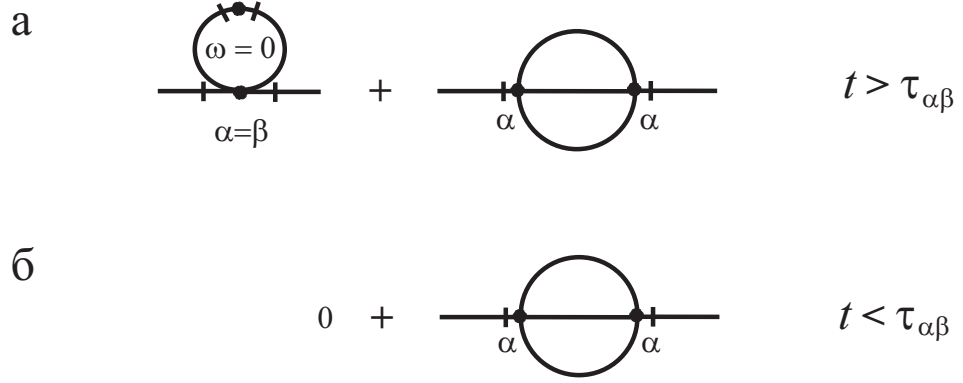


Рис. 22: вклады в перенормировку вершины Γ , на различных временных масштабах можно представить следующим образом: а) $t \gg \tau_{\alpha\beta}$, б) $t \ll \tau_{\alpha\beta}$.

ставленная графически на рис. 22 а, имеет вид:

$$Z_{\Gamma_{\alpha\beta}} = \Gamma_{\alpha\beta} + \Gamma_{\alpha\beta} \frac{\rho^2}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) + \delta_{\alpha\beta} \Gamma_{\alpha\beta} \frac{3v^2}{\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right).$$

Формально различный вид перенормировки на разных масштабах говорит о неавтономности уравнений ренормгруппы при $t \sim \tau_{\alpha\beta}$. Неавтономная ренормгруппа в последнее время довольно часто возникает в физических задачах, см., например, [100, 101, 102, 103]. Отметим, что в двух предельных случаях, $t \ll \tau_{\alpha\beta}$, и $t \gg \tau_{\alpha\beta}$, ренормгрупповые уравнения всё же являются автономными, поэтому будет естественно полагать, что физическое решение является сшивкой этих двух предельных случаев. Как правильно сделать эту сшивку мы покажем ниже, но сначала запишем ренормгруппу в предельных случаях.

3.4.2 Система уравнений ренормгруппы при $t \ll \tau_{\alpha\beta}$

На временных масштабах $t \ll \tau_{\alpha\beta}$, когда долины α и β являются статистически независимыми друг от друга,

$$\langle J_\alpha J_\beta \rangle = 0,$$

и только при $\alpha = \beta$

$$\langle J_\alpha J_\alpha \rangle = 1.$$

Поэтому для каждой долины α можно написать ренормгруппу, которая отличается от ренормгрупп других долин только “температурой” $T_\alpha = T_{\alpha\alpha}$.

Полагая, что $Z_{m^{cl}} = \theta(\Lambda)$, $Z_{m^q} = \theta'(\Lambda)$, $Z_J = \vartheta(\Lambda)$ и проводя масштабное преобразование приходим к следующей ренормгруппе:

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{(R)} = Z_1 \Lambda^{d+z} = \theta'^2(\Lambda) \Lambda^{d+z} \left[\Gamma_{\alpha\beta} + \delta_{\alpha\beta} \Gamma_{\alpha\beta} \frac{3v^2}{\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) \right],$$

$$\bar{\alpha}_{\alpha\beta}^{(R)} = Z_2 \Lambda^{d+2z} = \theta'(\Lambda) \theta(\Lambda) \Lambda^{d+2z} [\bar{\alpha}_{ab} - O(v^2)],$$

$$1 = Z_3 \Lambda^{d+z+2} = \theta'(\Lambda) \theta(\Lambda) \Lambda^{d+z+2},$$

$$\mu^{2(R)} = Z_4 \Lambda^{d+z} = \theta'(\Lambda) \theta(\Lambda) \Lambda^{d+z} \left[\mu^2 - \mu^2 \frac{12v}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) \right],$$

$$\varrho^{(R)} = Z_5 \Lambda^{2d+2z} = \theta'(\Lambda) \theta(\Lambda) \vartheta(\Lambda) \Lambda^{2d+2z} \left[\varrho - \varrho \frac{12v}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) \right],$$

$$v^{(R)} = Z_6 \Lambda^{3d+3z} = \theta'(\Lambda) \theta^3(\Lambda) \Lambda^{3d+3z} \left[v + v \rho^2 \frac{3}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) - v^2 \frac{36}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) \right],$$

$$\chi^{(R)} = Z_7 \Lambda^{d+2z} = \vartheta^2(\Lambda) \Lambda^{d+2z} \chi.$$

Учитывая канонические размерности полей и вводя новые обозначе-

ния: $\xi = \ln(1/\Lambda)$, $\varepsilon = 4 - d$, перепишем систему в виде:

$$\begin{aligned}\Gamma_{\alpha\beta}^{(R)} &= \Gamma_{\alpha\beta} + \delta_{\alpha\beta} \Gamma_{\alpha\beta} \frac{3v^2}{\pi^2} \xi, \\ \mu^{2(R)} &= e^{2\xi} \left[\mu^2 - \mu^2 \frac{12v}{8\pi^2} \xi \right], \\ \varrho^{(R)} &= e^{\varepsilon\xi/2} \left[\varrho - \varrho \frac{12v}{8\pi^2} \xi \right], \\ v^{(R)} &= e^{\varepsilon\xi} \left[v + v \rho^2 \frac{3}{8\pi^2} \xi - v^2 \frac{36}{8\pi^2} \xi \right].\end{aligned}$$

Разложим экспоненты в степенной ряд малому параметру ξ и оставим в только линейные по ξ слагаемые, за тем, имея в виду непрерывность ренормгруппового преобразования, опишем эволюцию параметров эффективного действия в виде дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}\frac{d \ln(\Gamma_{\alpha\beta})}{d\xi} &= \delta_{\alpha\beta} \frac{3v^2}{\pi^2}, \\ \frac{d \ln(\mu^2)}{d\xi} &= 2 - \frac{12v}{8\pi^2}, \\ \frac{d \ln(\varrho)}{d\xi} &= \frac{\varepsilon}{2} - \frac{12v}{8\pi^2}, \\ \frac{d \ln(v)}{d\xi} &= \varepsilon + \rho^2 \frac{3}{8\pi^2} - v \frac{36}{8\pi^2}.\end{aligned}$$

где $\xi = \ln(1/\Lambda)$, $\varepsilon = 4 - d$, и Λ — параметр обрезания по импульсам. Можно также считать, исходя из (69), что $\Lambda^2 \sim \Omega/\omega_{\min}$, где $\Omega \gg 1/\tau_{\alpha\beta}$ — верхняя частота. Выразим ξ через частоты: $\xi = 2 \ln(\Omega\tau_{\alpha\beta})$. Тогда данная система уравнений справедлива в области $\xi \gtrsim 1$. Неавтономность общих уравнений не влияет на условие существования неподвижной точки ренормализационной группы, и, кроме того, это условие не зависит от предельного случая и может быть представлено в

виде:

$$\frac{d \ln(v)}{d\xi} = 0, \quad \frac{d \ln(\varrho)}{d\xi} = 0,$$

из которого следует, что $\varrho^* = \sqrt{4\pi^2\varepsilon/3}$, $v^* = \pi^2\varepsilon/3$. Поскольку вблизи перехода парамагнетик–стекло можно положить $\mu^2 \sim \kappa \frac{T - T_g}{T_g}$, то

$$\mu \propto \left(\frac{T - T_g}{\kappa^{-1}T_g} \right)^{1/2} = e^\xi.$$

В результате, характерное время релаксации долин α и β ($\alpha \neq \beta$) имеет вид

$$\bar{\tau} \propto \Gamma T_{\alpha\beta} \sim \exp \left(\left[\frac{v^2 3}{8\pi^2} \right] \xi \right). \quad (49)$$

Здесь мы воспользовались тем, что аналогично случаю броуновского движения [104], эффективная “вязкость” пропорциональна $\Gamma T_{\alpha\beta}$ и, в свою очередь, также пропорциональна времени релаксации, см. например, [80]. Обратим внимание, что перенормировка $T_{\alpha\beta}$ ($\bar{\tau}$) оказывается независимой от индексов долин в рассматриваемой области времен $t \ll \tau_{\alpha\beta}$, так как долины в этом случае независимы. Ниже рассматривается противоположный случай, $t \gg \tau_{\alpha\beta}$, где перенормировка $T_{\alpha\beta}$ существенно зависит от индексов долин.

3.4.3 Система уравнений ренормгруппы при $t \gg \tau_{\alpha\beta}$

Рассмотрим (произвольные) долины α и β . На временных масштабах $t \gg \tau_{\alpha\beta}$ соответствующих случаю, когда долины α и β приходят в равновесие между собой,

$$\langle J_\alpha J_\beta \rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}').$$

В этом случае ренормгрупповое уравнение имеет вид:

$$\begin{aligned}\frac{d \ln(\Gamma T_{\alpha\beta})}{d\xi} &= \frac{\varrho^2}{8\pi^2} + \frac{3v^2}{\pi^2}, \\ \frac{d \ln(\mu^2)}{d\xi} &= 2 - \frac{12v}{8\pi^2}, \\ \frac{d \ln(\varrho)}{d\xi} &= \frac{\varepsilon}{2} - \frac{12v}{8\pi^2}, \\ \frac{d \ln(v)}{d\xi} &= \varepsilon + \varrho^2 \frac{3}{8\pi^2} - v \frac{36}{8\pi^2},\end{aligned}$$

где $\ln(\omega_{\min}\tau_{\alpha\beta}) \lesssim \xi \lesssim 1$. Используя условие существования неподвижной точки приходим к

$$\bar{\tau} = \Gamma T_{\alpha\beta} \sim \exp\left(\left[\frac{\varrho^2}{8\pi^2} + \frac{3v^2}{\pi^2}\right]\xi\right). \quad (50)$$

3.4.4 Сшивка решений

Для того, чтобы сшить полученные решения (49) и (50) нужно исследовать перенормировку в области $t \sim \tau_{\alpha\beta}$ и получить сшивающую функцию, $S(\xi)$, аналогично тому, как это было сделано в [100, 101, 102]:

$$\frac{d \ln(\Gamma T_{\alpha\beta})}{d\xi} = \frac{\varrho^2}{8\pi^8} S(\xi) + \frac{3v^2}{\pi^2}, \quad (51)$$

где $\xi \sim 1$. Сшивающая функция, принимающая значение 1 в случае больших временных масштабов, $\xi \rightarrow \infty$, и 0 в случае малых временных масштабов $\xi \rightarrow 0$, имеет вид:

$$S(\xi) = 1 - \Lambda^z = 1 - \exp(-z\xi),$$

где $z \approx 2$ – динамический индекс [84, 89]. В результате

$$\bar{\tau} \propto \exp \left(\left(\frac{\varrho^2}{8\pi^2} + \frac{3v^2}{\pi^2} \right) \xi \right) \cdot \exp \left(\frac{\varrho^2}{8\pi^2 z} e^{-z\xi} \right) \sim \\ \left(\frac{T - T_g}{T_g} \right)^{\left(\frac{\varepsilon}{6} + \frac{\pi^2 \varepsilon^2}{3} \right)} \cdot \exp \left(\frac{\varepsilon}{6z} \left(\frac{T_g}{T - T_g} \right)^{z/2} \right),$$

где $\varepsilon = 4 - d$ для d -мерной системы. Полученная зависимость времени релаксации от температуры представляет собой частный случай соотношения Фогеля-Фулчера-Таммана.

Отметим, что во многих работах высказывалась идея о том, что критические явления в системах с беспорядком могут быть описаны в предположении о существовании бесконечной непрерывной иерархии корреляционных длин и критических индексов (см. например [99, 105]). В нашем случае вид ренормировки (51) можно интерпретировать как наличие такой иерархии критических индексов.

Характерным признаком стекольного перехода является нарушение условия выполнения флуктуационно-диссипативной теоремы. Это условие можно представить в виде равенства [86]:

$$G^K(\omega) = \frac{T}{i\omega} \{ G^R(\omega) - G^A(\omega) \}. \quad (52)$$

Из (48) и (52) следует, что в рассматриваемой системе условие справедливости флуктуационно-диссипативной теоремы выполняется только в том случае, когда $T_{\alpha\beta} \equiv T$ для всех долин. Это возможно, когда существует только одна единственная долина [6]. Поскольку полученные выше результаты справедливы при условии существования иерархического спектра времён релаксации системы, то величины $T_{\alpha\beta}$ зависят от расстояния между долинами α и β , вследствие чего эти результаты

справедливы только при нарушении флуктуационно-диссипативной теоремы (при невыполнении равенства (52)).

3.5 Недостатки предложенного подхода.

Полученный в данной главе результат указывает на принципиальную возможность применения стандартных методов критической динамики к описанию стеклования. Однако, изложенный подход имеет свои недостатки. Прежде всего они связаны с искусственным введением иерархии времён релаксации, в результате чего в системе существует два времени релаксации: Γ , соответствующее релаксации в подсистеме поля m , и τ , соответствующее подсистеме поля J , причём последнее вводится в модель искусственно. В действительности эти времена должны быть связаны между собой, поскольку релаксация поля m определяет релаксацию поля J . Форма этой зависимости определяется непосредственно физической моделью, но в нашем случае она не учитывается. Как следствие, в рассмотренной модели q не зависит от температуры, что, по-видимому, не совсем правильно. Поэтому можно говорить, что полученное соотношение Фогеля-Фулчера-Таммана для нашей модели справедливо в случае слабой температурной зависимости q и $\tau_{\alpha\beta}$.

Кроме того, рассмотренная в этой главе модель имеет существенный недостаток, заключающийся в том, что спин является плохим параметром порядка, поскольку при масштабных преобразованиях в неупорядоченной системе величина суммарного спина в ограниченном корреляционном радиусом объёме стремиться к 0. Поэтому её сле-

дует рассматривать не как модель какой-либо реальной физической системы, а как абстрактную модель, демонстрирующую возможности метода описания динамики неэргодической системы вблизи критической точки. В следующей главе будет рассмотрен способ задания физической модели стеклующейся системы, в которой этот недостаток удаётся исключить.

3.6 Выводы к главе 3

1. Предложен новый метод теоретического описания динамики квази-неэргодических систем с помощью функциональных методов неравновесной динамики и априорного задания ступенчатой временной корреляционной функции случайного взаимодействия, задающей временную неоднородность системы.
2. С помощью метода теоретического описания динамики квази-неэргодических систем описана кинетика модели типа мягкого спинового стекла Эдвардса-Андерсона вблизи критической точки. Показано, что в процессе перенормировки возникает спектр эффективных температур, $T_{\alpha\beta}$, характеризующих состояния, в которых долины α и β находятся в равновесии между собой.
3. Показано, что для двух произвольных долин, α и β , флуктуационно-диссипативная теорема выполняется при условии, что время наблюдения системы значительно превосходит время наступления равновесия между данными долинами, $t \gg \tau_{\alpha\beta}$.

4 Описание неупорядоченной конденсированной системы с помощью теории дефектных состояний ориентационного порядка

Изложенная в предыдущей главе техника теоретического описания замораживания квази-неэргодической системы имеет существенный недостаток, заключающийся в том, что обоснованность применения к рассмотренной неупорядоченной системе скейлинговой гипотезы можно поставить под сомнение. Это связано с неудачным выбором параметра порядка в виде вектора локальной “намагниченности”, который не только не может быть использован для описания молекулярных и топологических стеклующихся систем, но и плох для описания спиновых систем, поскольку при масштабном преобразовании неупорядоченной системы спинов стремиться к 0. Он может рассматриваться лишь как некоторый формальный параметр не имеющий конкретного физического смысла.

Основной целью четвёртой главы является определение параметра порядка неупорядоченной системы, пригодного для использования в предложенной в предыдущей главе скейлинговой технике. Для этого используется идея Ривьера, заключающаяся в том, чтобы описывать неупорядоченные спиновые и топологически неупорядоченные системы с помощью топологических дефектов — дисклинаций. В этом случае в качестве параметра порядка можно рассматривать локальный топологический момент дисклинационной подсистемы, который остаётся хорошо определённым при масштабных преобразованиях.

4.1 Введение

В последние десятилетия в результате постепенного развития теоретических методов, но более всего, благодаря успехам экспериментальных и компьютерных методов исследования достигнут значительный прогресс в области описания жидкого состояния вещества. Сегодня стало ясно, что жидкость обладает более сложными физическими свойствами чем считалось в начале прошлого века. В ряде случаев можно говорить о существовании у вещества, в зависимости от его природы, нескольких жидких состояний. Общими свойствами этих состояний является текучесть и отсутствие дальнего трансляционного порядка. Однако другие свойства, такие как ближний порядок, вязкость, электросопротивление, модуль сдвига и т.д. могут существенно отличаться.

Отсутствие трансляционной периодичности в жидкостях не сопровождается случайным расположением атомов. В отличие от газов в жидкостях существуют достаточно сильные связи между атомами (или молекулами). Поэтому у большинства жидкостей при относительно низких температурах обнаруживается наличие ближнего и среднего упорядочения атомов. Этот порядок определяется длинами и направлениями валентных связей, валентными углами, размерами атомных и ионных радиусов и т.п. Первая теория жидкого состояния, основанная на представлении о ближнем и среднем порядке, была предложена Френкелем [106]. В современной литературе такое упорядочение также называется локальным, либо ориентационным порядком, а такое состояние жидкости — френкелевской фазой, плотной фазой и т.п.

Несмотря на сильные межатомные и межмолекулярные связи жидкости обладают высокой текучестью. Это свойство обусловлено неоднородностью микроскопической структуры, бесконечным числом возможных структурных конфигураций и возможностью, вследствие сильных тепловых флуктуаций, разрывов существующих и образования новых межатомных связей. Благодаря этому возможны перескоки молекул из одной потенциальной ямы в соседнюю незанятую яму. Таким образом, движение жидкости значительно ближе к пластическому движению в твёрдых веществах, нежели к движению газа. Это обуславливает существование реологических (т.е. вязкоупругих) свойств жидкости. Проявления этих свойств жидкости наблюдаются в зависимостях вязкости от температуры, временного масштаба эксперимента и т.п.

4.2 Модель

В основе используемой в данной работе модели переохлаждённой жидкости лежит дисклинационная модель аморфной структуры, предложенная Д. Нельсоном. Основы этого подхода были заложены в работах Франка, который сделал предположение, что большое переохлаждение жидкости может достигаться вследствие наличия в её структуре локального икосаэдрического атомного упорядочения. В обосновании этого предположения, указывалось на то, что для 13-ти атомной упаковки Ленард-Джонсовских атомов икосаэдр имеет значительно более низкую энергию чем ГЦК-упаковка. С тех пор было продемонстрировано, что структура переохлаждённых жидкостей и стёкол имеет существенный политетраэдрический характер [107], снача-

ла благодаря успеху модели плотной случайной упаковки твердых сфер [108, 109], а позже, благодаря успехам в компьютерном моделировании [111]. В рамках *политетраэдрической* модели структура жидкости представляется как результат сплошного замощения всего пространства тетраэдрами, в вершинах которых расположены атомы. 13-ти атомный икосаэдрический кластер является примером конечной политетраэдрической структуры, поскольку он скомпонован из двадцати прилегающих друг к другу тетраэдров.

Правильный тетраэдр представляет собой наиболее плотную локальную упаковку сфер. Однако, оказывается, что им невозможно замостить трёхмерное пространство. Математически строго было показано [112], что это возможно только в том случае, если пространство не является Евклидовым, а представляет собой четырёхмерную гиперсферу. Д. Нельсон показал, что для трансформации регулярной политетраэдрической упаковки искривлённого пространства в евклидово пространство необходимо ввести в структуру дефекты — дисклинационные линии [113, 114]. Таким образом, линейные дефекты являются неотъемлемым элементом политетраэдрической упаковки, и в силу своей топологической устойчивости могут рассматриваться как основные структурные элементы аморфных структур.

Модель, которая рассматривается в этой главе, является более общей. Она предполагает, что при высоких температурах реализуется квазигазовое изотропное состояние конденсированного вещества, которое характеризуется отсутствием каких либо выделенных типов ближнего упорядочения атомов и, как следствие, обладает $SO(3)$ -симмет-

рией. При понижении температуры или увеличении давления происходит *первичное упорядочение* системы, при котором формируется ближний порядок, локально симметричный относительно преобразований точечных групп симметрии. Можно предполагать, что эти симметрии определяются межатомным взаимодействием и в большинстве случаев не относятся к федоровским группам, поэтому основное состояние таких локально упорядоченных систем является некристаллическим (отсутствует дальний трансляционный порядок) и вырожденным вследствие наличия большого количества “дефектов”. Из-за хорошей подвижности дефектов такое состояние сохраняет текучесть и представляет собой жидкое состояние, которое в литературе называют *плохой жидкостью*, *плотной жидкостью* и т.п. При изменении внешних параметров в некоторых жидкостях возможны переходы, сопровождающиеся изменением типа ближнего ориентационного порядка, по своей природе аналогичные полиморфным переходам в кристаллах. Теоретическое описание таких переходов возможно с помощью существующих методов описания фазовых переходов. При дальнейшем охлаждении системы возможны два сценария: замерзание системы в неравновесном неупорядоченном состоянии благодаря потере подвижности дефектов (аморфизация или переход жидкость–стекло); либо её кристаллизация, когда, в силу термодинамических законов, ближний порядок приобретает симметрию федоровской группы.

Заметим, что вышеизложенная модель предполагает возможность двух видов перехода жидкость–жидкость: 1. переход изотропная жидкость–плотная жидкость, связанный с возникновением локального упоря-

дочения; 2. мартенситоподобный переход плотная жидкость-плотная жидкость, связанный с изменением основного типа локального упорядочения. Кроме того, модель не запрещает мартенситоподобных переходов и в аморфной фазе, предположение о возможности которых высказывалось ещё в работах Лихачёва [115].

4.3 Континуальная теория дефектов

Для математического описания системы дисклинаций можно воспользоваться континуальной теорией дефектов. Континуальная теория дефектов является методом описания неупорядоченных молекулярных систем, базирующимся на математическом аппарате физики калибровочных полей. Этот подход предполагает фундаментальную роль дефектов и примесей в формировании свойств неупорядоченных молекулярных систем. Он основан на том, что точечные и линейные дефекты, а так же химический состав вещества, в совокупности могут делать неупорядоченную структуру энергетически более предпочтительной по сравнению с кристаллической. Основы теории были заложены в 80-е годы прошлого века в работах В. А. Лихачёва и его научной школы [115], а так же в работах А. Кадича и Д. Эдилена [116], Д. Нельсона [117] и др.

В работах, выполненных под руководством В. А. Лихачева, были описаны основные положения и элементы дисклинационной теории аморфных материалов, в которой дисклинации являлись важнейшими структурными элементами, обеспечивающими как отсутствие дальнего трансляционного порядка, так и высокую устойчивость против кри-

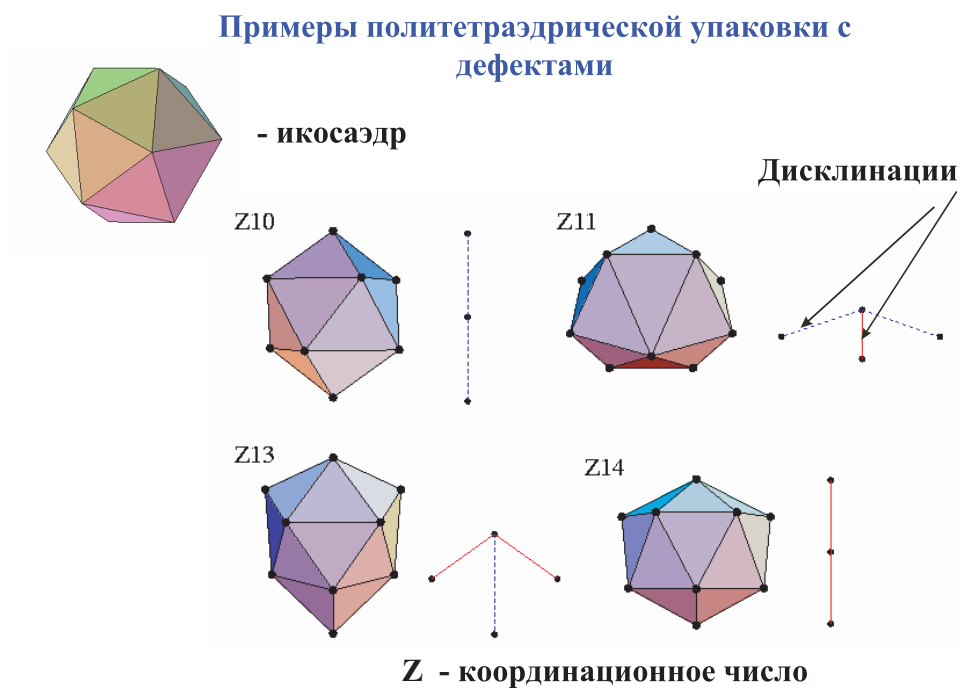


Рис. 23: Примеры политетраэдрических упаковок. Предполагается, что икосаэдр является локальной бездефектной упаковкой тетраэдров, четыре других приведённых упаковки содержат дисклинации.

сталлизации. В более фундаментальной формулировке аморфное состояние рассматривалось как кристаллическая структура с дальним порядком в римановом пространстве, в противоположность обычному кристаллу, вложенному в евклидово пространство.

В калибровочной теории дефектов, предложенной А. Кадичем и Д. Эделеном, континуальная теория дефектов рассматривается в обобщённой трактовке калибровочных полей Янга–Миллса. Такой подход позволил авторам вывести лагранжиан для полей, описывающих дефекты сплошной локально $SO(3)$ -симметричной среды, а так же записать полную систему уравнений, одновременно представляющую как эволюцию напряжений в среде, так и динамику дефектов. Геометриче-

ская теория дефектов активно развивается и в России (см., например, [118], [119] и др.

4.3.1 Основные положения континуальной теории дефектов

Основываясь на упомянутых выше теоретических подходах, сформулируем основные положения континуальной теории дефектов: Относительное смещение, du_j , двух близких элементов среды представляется тензором дисторсии, $\beta_{ij} = \nabla_i u_j$:

$$du_i = \beta_{ij} dx_j.$$

Симметричная часть вектора дисторсии, $e_{ij} = (\beta_{ij} + \beta_{ji})/2$, является тензором деформации, а антисимметричная, $\omega_{ij} = (\beta_{ij} - \beta_{ji})/2$, — тензором поворота,

$$\beta_{ij} = e_{ij} + \omega_{ij}.$$

Вместо тензора поворота, ω_{ij} , иногда удобно использовать псевдовектор поворота, ω_i :

$$\omega_i = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \omega_{jk} = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \beta_{jk} = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \nabla_j u_k, \quad (\omega_{jk} = \varepsilon_{jkl} \omega_l)$$

[115]. Относительный поворот, $d\omega_i$, двух элементов среды выражается соотношением: $d\omega_i = \Lambda_{ij} dx_j$, где $\Lambda_{ij} = \nabla_i \omega_j$.

Будем полагать, что при деформировании среды в ней не образуются разрывы поля смещения. Математически это условие может быть выражено как равенство 0 ротора поля дисторсии, β_{ij} :

$$\varepsilon_{ijk} \nabla_j \beta_{kl} = 0, \quad \text{или} \quad \begin{cases} \varepsilon_{ijk} \nabla_j e_{kl} + \delta_{il} \Lambda_{jj} - \Lambda_{il} = 0, \\ \varepsilon_{ijk} \nabla_j \Lambda_{kl} = 0, \\ \Lambda_{ii} = 0. \end{cases}$$

Данное условие называется **условием совместности**.

Среда, в которую введены несовместные пластические деформации (дефекты), является внутренне напряжённой, так как напряжения будут существовать в ней и при отсутствии внешнего воздействия. Упругая энергия такой системы не будет определяться как функция от e_{ij} и Λ_{ij} , поскольку деформация и изгиб–кручение, помимо упругой, содержит ещё и пластическую часть:

$$\begin{aligned} e_{ij} &= e_{ij}^e + \varphi_{ij} \quad (\varphi_{ij} \equiv e_{ij}^p), \\ \Lambda_{ij} &= \Lambda_{ij}^e + A_{ij} \quad (A_{ij} \equiv \Lambda_{ij}^p). \end{aligned}$$

При этом, для пар $(e_{ij}^e, \Lambda_{ij}^e)$ и (φ_{ij}, A_{ij}) условие совместности не выполняется, но его можно переписать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ijk} \nabla_j e_{kl}^e + \delta_{il} \Lambda_{jj}^e - \Lambda_{il}^e &= \alpha_{il}, \\ \varepsilon_{ijk} \nabla_j \Lambda_{kl}^e &= \theta_{il}, \end{aligned}$$

введя тензоры α_{ij} и θ_{ij} , которые определяются как

$$\begin{aligned} \alpha_{il} &= -\varepsilon_{ijk} \nabla_j \varphi_{kl} + A_{il}, \\ \theta_{il} &= -\varepsilon_{ijk} \nabla_j A_{kl}, \end{aligned}$$

и называются, соответственно, тензорами плотностей дислокаций и дисклинаций. Далее будет показано, что они имеют соответствующий физический смысл. Переопределим дисторсию, выделив в ней упругую и пластическую составляющие:

$$\beta_{ij} = (e_{ij}^e + \Lambda_{ij}^e) + \varepsilon_{ilk} A_{kj} u_l + \varphi_{ij} \quad \rightarrow \quad B_{ij} = \beta_{ij}^e + \varepsilon_{ilk} A_{kj} u_l + \varphi_{ij}.$$

В калибровочной теории Кадича и Эдилена выделению в дисторсии части, соответствующей пластической деформации, соответствует

процедура “минимальной” замены. Кратко изложим, что она и себя представляет: A и φ рассматриваются как поля, компенсирующие нарушение однородности действия основной группы теории упругости $G_0 = SO(3)_0 \supset T(3)_0$, которые вводятся как калибровочные поля в ковариантной производной

$$B_a^i = \partial_a u^i + \gamma_{\alpha j}^i u^j A_a^\alpha + \varphi_a^i.$$

где $\gamma_{\alpha j}^i$ — генерирующая матрица полупростой группы поворотов $SO(3)$. $A_{ij} = \chi_{ij}^p$ — тензор пластической деформации (пластическая деформация). Диагональные компоненты тензора A представляют собой крутящую деформацию, а недиагональные — изгибную [115].

Важными величинами теории являются плотности дисклинаций и дислокаций: Плотность дисклинаций представляется как

$$\theta_{kj} = -\varepsilon_{kli} \nabla_l A_{ij} \quad (\theta = -\nabla \wedge A), \quad (53)$$

а плотность дислокаций может быть выражена как

$$\alpha_{kj} = -\varepsilon_{kli} \nabla_l e_{ij}^p - \delta_{kj} A_{ll} + A_{kj} = -\varepsilon_{kli} (\nabla_l e_{ij}^p + \varepsilon_{ijm} A_{lm}). \quad (54)$$

Ещё одной важной величиной является вектор Франка, который представляет собой псевдовектор:

$$\Omega_i = \oint_{\Gamma} A_{ij} dl_j = \oint_{\Gamma} \nabla_j \omega_i dl_j = \oint_{\Gamma} d\omega_i,$$

равный по модулю углу поворота искривлённого пространства при обходе вокруг дисклинации по замкнутому контуру Γ . Вектор Франка также можно представить как поток тензора плотности дисклинаций

через контур Γ :

$$\begin{aligned}\Omega_i &= \int_{\Gamma} A_i^j dx_j = \int_{\Gamma} \theta_{ij} dS_j \\ &\left(\Omega_i = \oint_{\Gamma} A_{i\mu} dx^\mu = \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} (\partial_\mu A_\nu^i - \partial_\nu A_\mu^i) dx^\mu \wedge dx^\nu = \right. \\ &\quad \left. \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} (\partial_\mu A_\nu^i - \partial_\nu A_\mu^i) dx^\mu \wedge dx^\nu = \right. \\ &\quad \left. \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} \varepsilon_k^{\mu\nu} \partial_\mu A_\nu^i dS^k = \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} \theta_k^i dS^k \right).\end{aligned}$$

Взяв дивергенцию от (53) и (54) получаем условия непрерывности (неразрывности):

$$\nabla_k \theta_{kj} = 0$$

— невозможность обрыва дисклинации внутри тела,

$$\nabla_k \alpha_{kj} + \varepsilon_{pkj} \theta_{pk} = 0$$

— внутри тела дислокации могут обрываться только на дисклинациях.

4.4 Лагранжиан системы дисклинаций

Для того, чтобы записать лагранжиан системы дисклинаций воспользуемся стандартной теорией упругости. Наиболее простой лагранжиан, описывающий систему с упругими деформациями, имеет вид:

$$L_0 = \frac{1}{2} \rho_0 \partial_4 \chi_i \partial_4 \chi_i - \frac{1}{8} [\lambda u_{\alpha\alpha} u_{\beta\beta} + 2\lambda u_{\alpha\beta} u_{\alpha\beta}],$$

где $\chi_i(\bar{r}, t)$ — поле упругих деформаций, λ и λ — постоянные Ламе, ρ_0 — массовая плотность вещества (которая для удобства считается

постоянной), а u_{ij} — компоненты относительной деформации:

$$u_{ab} = C_{ab} - \delta_{ab} = \partial_a \chi^i \partial_b \chi^i - \delta_{ab},$$

(греческие буквы $\alpha, \beta, \dots$ используются для обозначения индексов из набора пространственных компонент $\{\alpha\} = \{1, 2, 3\}$, а латинские буквы $a, b, \dots$ для полного набора индексов, включающего в себя и временную компоненту X^4 $\{a\} = \{1, 2, 3, 4\}$).

Согласно калибровочной теории дислокаций и дисклинаций [116], пластическую деформацию структуры вещества можно рассматривать как нарушение однородности действия группы вращений и трансляций $SO(3) \triangleright T(3)$. Для учёта нарушений однородности вводятся компенсирующие поля (A_a^α и φ_b^i) и производится переход от обычных производных к ковариантным

$$\partial_a \chi^i \rightarrow B_a^i = \partial_a \chi^i + \gamma_{\alpha j}^i A_a^\alpha \chi^j + \varphi_a^i,$$

где $\gamma_{\alpha j}^i$ — три порождающие матрицы полупростой группы $SO(3)$. После чего лагранжиан L_0 заменяется новым лагранжианом

$$L = L_0 + s_1 L_1 + s_2 L_2,$$

где s_1 и s_2 — свободные параметры теории, а первое слагаемое

$$L_0 = \frac{1}{2} \rho_0 B_4^i B_4^i - \frac{1}{8} [\lambda E_{\alpha\alpha} E_{\beta\beta} + 2\lambda E_{\alpha\beta} E_{\alpha\beta}]$$

$$(E_{\alpha\beta} = B_\alpha^i B_\beta^i - \delta_{\alpha\beta})$$

описывает упругие свойства материала, второе

$$s_1 L_1 = -\frac{1}{2} s_1 D_{ab}^i k^{ac} k^{bd} D_{cd}^i$$

описывает дислокации, в нём используются следующие обозначения:

$$D_{ab}^i = \partial_a \varphi_b^i - \partial_b \varphi_a^i + \gamma_{\alpha j}^i \left(A_a^\alpha \varphi_b^j - A_b^\alpha \varphi_a^j + F_{ab}^\alpha \chi^j \right),$$

$$F_{ab}^\alpha = \partial_a A_b^\alpha - \partial_b A_a^\alpha + C_{\beta\gamma}^\alpha A_a^\beta A_b^\gamma,$$

где γ_α — порождающие матрицы, а $C_{\beta\gamma}^\alpha$ — в общем случае структурные константы полупростой группы $SO(3)$, представляющие собой компоненты тензора Леви-Чивиты, $C_{\beta\gamma}^\alpha = \varepsilon_{\beta\gamma}^\alpha$. Третье слагаемое

$$s_2 L_2 = -\frac{1}{2} s_2 C_{\alpha\beta} F_{ab}^\alpha g^{ac} g^{bd} F_{cd}^\beta \quad (55)$$

$$(g^{\alpha\beta} = -\delta^{\alpha\beta}, \quad g^{44} = 1/\zeta, \quad g^{ab} = 0 \text{ при } a \neq b)$$

описывает дисклинации. Поля A_a^α и φ_a^i описывают соответственно дисклинации и дислокации.

Исследование подобных систем является сложной самостоятельной проблемой теории поля, поэтому для решения конкретных задач её приходится так или иначе упрощать. Считается, что при описании аморфных материалов важнейшими структурными элементами являются дисклинации, поскольку обладают наибольшей плотностью энергии $s_2 \gg s_1$, и их наличие определяет два фундаментальных свойства стекла: отсутствие дальнего порядка и устойчивость против кристаллизации. Естественно ожидать, что в жидком состоянии дисклинации также являются основными структурными элементами, поэтому далее мы ограничиваем наше внимание только случаем, когда нарушается однородность подгруппы вращений. Другими словами, мы пренебрегаем вкладом в действие поля φ_a^i и ограничиваемся рассмотрением теории с чисто дисклинационным лагранжианом

$$L = L_0 - s_2 L_2.$$

4.5 Нарушение симметрии

Калибровочная теория дефектов является общей теорией, в том смысле, что в ней рассматривается самый общий случай идеализированной изотропной среды, локально симметричной относительно группы вращений в трёхмерном пространстве, $SO(3)$. Такая теория является неабелевой, что весьма усложняет её использование. Однако этот случай реализуется при сравнительно высоких температурах. При понижении температуры, согласно общим законам термодинамики, топологические моменты стремятся к упорядочению, в результате чего $SO(3)$ -симметрия спонтанно нарушается, поскольку выбор одного из возможных вырожденных основных состояний (одной из осей симметрии), реализующегося в системе, нарушает симметрию. Так, например, в нематиках можно выбрать основное состояние, минимизирующее потенциальную энергию, в котором все директоры сонаправлены. В этом случае происходит понижение локальной симметрии $SO(3) \rightarrow SO(2)$. В молекулярных системах с ближним порядком, в зависимости от условий, основным состоянием может являться, например, кристаллическое состояние (при описании дефектов в кристаллах), либо упаковка с симметрией, не принадлежащей фёдоровским группам, например, политетраэдрическая, упаковка.

Известно, что отсутствие трансляционной периодичности в жидкостях обычно не сопровождается случайным расположением атомов. У большинства жидкостей при относительно низких температурах обнаруживается наличие ближнего и среднего упорядочения атомов. Этот

порядок определяться длинами и направлениями валентных связей, валентными углами, размерами атомных и ионных радиусов и т.п. В современной литературе такое упорядочение называется локальным либо ориентационным порядком, а первая теория жидкого состояния, основанная на представлении об ориентационном порядке, была предложена Френкелем [106]. В последнее время появились новые экспериментальные факты, подтверждающие эту концепцию, а так же теоретические работы, посвящённые попыткам описать переходы жидкость—жидкость используя известные методы описания фазовых переходов [121].

Рассмотрим переход от газоподобной фазы к френкелевской фазе. Появление в системе параметра порядка $P(r)$ с некоторым пространством изменения M^n приводит к тому, что симметрия основного состояния не совпадает с симметрией гамильтониана, т.е. сопровождается спонтанным нарушением $SO(3)$ симметрии газоподобной фазы. При этом гамильтониан системы остаётся $SO(3)$ –симметричным, но эта симметрия становится скрытой [122].

В случае нематика имеет место $SO(3) \rightarrow SO(2)$ -нарушение симметрии. В этом случае теория становится абелевой, что приводит к значительному упрощению её анализа. Нелинейная по A_{ij} часть тензора кривизны связности (тензор Риччи) пропадает:

$$F_{ab}^{\alpha} = \partial_a A_b^{\alpha} - \partial_b A_a^{\alpha} + C_{\beta\gamma}^{\alpha} A_a^{\beta} A_b^{\gamma} \quad \rightarrow \quad F_{ab}^{\alpha} = \partial_a A_b^{\alpha} - \partial_b A_a^{\alpha}.$$

Это значительно упрощает дальнейший анализ системы

$$\theta_k^j = -\frac{1}{2}\varepsilon_{kli}F_{li}^j \quad \longleftrightarrow \quad F_{ab}^{\alpha} = -\varepsilon_{abi}\theta_i^{\alpha}$$

Поскольку особенности в виде топологических дефектов возникают в системах со спонтанно нарушенной симметрией можно утверждать, что поля линейных топологических дефектов в трёхмерных системах всегда будут абелевыми. Для того, чтобы убедиться в этом рассмотрим тензор калибровочного потенциала A_a^α линейной дисклинации Γ , который является суперпозицией потенциалов каждого участка dl этой дисклинации $A_a^\alpha(l)$:

$$A_a^\alpha = \int_{\Gamma} A_a^\alpha(l) dl.$$

Можно проверить, что

$$C_{\beta\gamma}^\alpha A_a^\beta A_b^\gamma = C_{\beta\gamma}^\alpha \left(\int_{\Gamma} A_a^\beta(l) dl \right) \left(\int_{\Gamma} A_b^\gamma(l) dl \right) = C_{\beta\gamma}^\alpha \int_{\Gamma} A_a^\beta(l) A_b^\gamma(l) dl. \quad (56)$$

В этом выражении не равны нулю только слагаемые с $\gamma \neq \beta$, а монопольное решение ($\partial_4 A_a^\beta = 0$) для A_a^β в общем виде представляется как

$$A_a^\beta = \varepsilon_{ai}^\beta \frac{r^i}{r} a(r), \quad A_4^\beta = \frac{r^\beta}{r} h(r),$$

где $h(r)$ и $a(r)$ — произвольные функции модуля вектора $\mathbf{r}$. Выражение (56) не равно 0 при условии, что $a \neq \beta$ и $\gamma \neq b$. Поскольку пространство трёхмерное, то отсюда следует, что не равными нулю могут быть только слагаемые с $a = b$. Отсюда

$$\begin{aligned} C_{\beta\gamma}^\alpha A_a^\beta(l) A_b^\gamma(l) &= C_{\beta\gamma}^\alpha A_a^\beta(l) A_a^\gamma(l) = C_{\beta\gamma}^\alpha \varepsilon_{ai}^\beta \frac{r^i}{r} a(r) \varepsilon_{aj}^\gamma \frac{r^j}{r} a(r) = \\ &= C_{\beta\gamma}^\alpha (\delta^{\beta\gamma} \delta_{ij} - \delta_j^\beta \delta_i^\gamma) \frac{a^2(r)}{r^2} r_i r_j = -C_{\beta\gamma}^\alpha \frac{a^2(r)}{r^2} r^\beta r^\gamma = 0. \end{aligned}$$

Кроме того

$$\begin{aligned}
C_{\beta\gamma}^{\alpha} A_4^{\beta}(l) A_4^{\gamma}(l) &= C_{\beta\gamma}^{\alpha} \frac{r^{\beta} r^{\gamma}}{r^2} h^2(r) = 0, \\
C_{\beta\gamma}^{\alpha} A_4^{\beta}(l) A_a^{\gamma}(l) + C_{\beta\gamma}^{\alpha} A_a^{\beta}(l) A_4^{\gamma}(l) &= \\
C_{\beta\gamma}^{\alpha} \frac{r^{\beta}}{r} h(r) \varepsilon_{aj}^{\gamma} \frac{r^j}{r} a(r) + C_{\beta\gamma}^{\alpha} \varepsilon_{aj}^{\beta} \frac{r^j}{r} a(r) \frac{r^{\gamma}}{r} h(r) &= \\
\left((\delta_a^{\alpha} \delta_{\beta j} - \delta_j^{\alpha} \delta_{\beta a}) \frac{r^{\beta} r^j}{r^2} + (\delta_{a\gamma} \delta_j^{\alpha} - \delta_a^{\alpha} \delta_{\gamma j}) \frac{r^{\gamma} r^j}{r^2} \right) h(r) a(r) &= \\
\left(\delta_a^{\alpha} - \frac{r^{\alpha} r_a}{r^2} + \frac{r^{\alpha} r_a}{r^2} - \delta_a^{\alpha} \right) h(r) a(r) &= 0.
\end{aligned}$$

Таким образом, (56) становится равным нулю при $a \subset (1, 2, 3)$. Это даёт основание утверждать, что задача является абелевой, поскольку

$$F_{ab}^{\alpha} = \int_{\Gamma} [\partial_a A_b^{\alpha}(l) - \partial_b A_a^{\alpha}(l)] dl.$$

Резюмируя, можно сделать заключение, что существование в конденсированной системе линейных дефектов говорит о том, что создаваемые ими поля — абелевы.

Теперь можно привести аргументы в пользу более сильного утверждения: Создаваемое в конденсированной системе дисклинационное калибровочное поле является абелевым. Причиной этого является наличие у конденсированных систем, находящихся как в твёрдом, так и в жидком состоянии, ближнего и среднего локального порядка расположения атомов. Симметрия именно этого локального упорядочения, а не $SO(3)$, является симметрией основного состояния системы. Так, например, в политетраэдрической модели аморфного вещества со сферически симметричным потенциалом взаимодействия между атомами,

группой локальной симметрии основного состояния является группа симметрии икосаэдра, Y [117]. В случаях с более сложными взаимодействиями, по-видимому, возможны самые разнообразные точечные группы симметрии.

Элементами структуры, нарушающими симметрию вращения основного состояния, являются топологические особенности — дисклинации. Из топологии известно, что условием возникновения в системе топологически устойчивой точечной или линейной дисклинации является существование нетривиального отображения, соответственно, сферы, S^2 , или окружности, S^1 , в пространство параметра порядка этой системы, M : $\pi_2(M) \neq 1$ или $\pi_1(M) \neq 1$. Пространства состояний являются орбитами группы симметрии параметра порядка. Например, у непрерывной группы симметрии $SO(3)$ поля Янга-Миллса орбитой является сфера, поэтому в системе с такой симметрией параметра порядка возможны только точечные дисклинации¹.

Возвращаясь к обсуждению политетраэдрической системы, заметим, что группа симметрии основного состояния икосаэдра, Y , имеет на группе симметрии изотропного 3-d пространства три орбиты, соответствующие дискретным поворотам относительно трёх *осей симметрии*. Именно эти три дискретные группы, а не группа $SO(3)$, являются

¹Областью определения пространства параметра порядка, в случае точечной особенности, является 2-сфера (сфера): $R^3 \setminus x_0 \sim S^2$ (из R^3 удаляется точка x_0). Отображение сферы S^2 в пространство параметра порядка S^2 есть группа $\pi_2(S^2) = Z \neq 1$, откуда следует, что точечные дефекты будут топологически устойчивыми. Областью определения пространства параметра порядка, в случае линейной особенности, является 1-сфера (окружность): $R^3 \setminus R \sim S^1$ (из R^3 удаляется линия R). Отображение окружности S^1 в пространство параметра порядка S^2 есть группа $\pi_1(S^2) = 1$, откуда следует, что линейные особенности не будут топологически устойчивыми.

калибровочными группами системы. Пространства соответствующих им основных состояний лежат на окружностях, S^1 , являющихся орбитами группы $SO(2)$ ². Таким образом, данные калибровочные поля являются абелевыми.

4.6 Поле линейной дисклинации (квазистационарное приближение)

Как было показано выше, группа преобразований, соответствующая калибровочному полю линейной дисклинации, будет уже не $SO(3)$, а $SO(2)$, поэтому калибровочная теория является абелевой. Это значительно упрощает дальнейшее описание системы (в работе [119] этот факт использовался применительно к случаю бесконечных прямолинейных дефектов). Чтобы найти поле линейной дисклинации произвольной формы воспользуемся анзацем, предложенным в работе [120]. Введём тензорные поля G_k^α и P_k^α , определяемые следующим образом:

$$G_k^\alpha \equiv F_{k4}^\alpha = \partial_k A_4^\alpha,$$

$$P_k^\alpha \equiv \frac{1}{2} \varepsilon_{klm} F_{lm}^\alpha = \frac{1}{2} \varepsilon_{klm} [\partial_l A_m^\alpha - \partial_m A_l^\alpha],$$

тогда функционал энергии “свободного” дисклинационного поля (55) можно переписать в виде:

$$L_2 = \frac{1}{4} \int (d^3x) F_{ij}^\alpha F_{ij}^\alpha = \frac{1}{2} \int (d^3x) [(P_k^\alpha - G_k^\alpha)(P_k^\alpha - G_k^\alpha)] + \int (d^3x) P_k^\alpha G_k^\alpha.$$

²Областью определения пространства параметра порядка в случае линейной особенности является 1-сфера (окружность): $R^3 \setminus R \sim S^1$ (из R^3 удаляется линия R). Отображение окружности S^1 в пространство параметра порядка S^1 есть группа $\pi_1(S^1) = \mathbb{Z} \neq 1$, откуда следует, что линейные особенности будут топологически устойчивыми.

Монопольные решения уравнения движения будут минимизировать энергию, т.е. они будут обнулять первое слагаемое в правой части последнего выражения [120] (будут являться решения уравнения автодуальности), т.е.

$$G_k^\alpha = P_k^\alpha.$$

Будем искать эти решения в виде

$$A_4^\alpha = x_\alpha h(r), \quad A_k^\alpha = \varepsilon_{\alpha k j} x_j f(r),$$

тогда

$$\delta_{k\alpha} h(r) + x_\alpha \partial_k h(r) = x_k \partial_\alpha f(r) - 2\delta_{k\alpha} f(r) - \delta_{k\alpha} x_l \partial_l f(r),$$

приравнивая коэффициенты при $\delta_{k\alpha}$ и 1, приходим к системе уравнений:

$$\begin{cases} x_\alpha \partial_k h(r) = x_k \partial_\alpha f(r), \\ h(r) = -2f(r) - x_l \partial_l f(r), \end{cases}$$

которую можно преобразовать в

$$\begin{cases} h(r) = f(r) + 3C_1, \\ 3f(r) + 3C_1 = -x_l \partial_l f(r), \end{cases}$$

откуда

$$f(r) = h(r) - 3C_1 = \frac{C}{r^3} - C_1,$$

где C и C_1 — константы. Таким образом, потенциал калибровочного поля, создаваемого клиновой дисклинацией единичной длины, dl_α , имеет вид

$$A_4^\alpha = x_\alpha \left(\frac{C}{r^3} + 2C_1 \right) dl_\alpha, \quad A_k^\alpha = \varepsilon_{\alpha k j} x_j \left(\frac{C}{r^3} + C_1 \right) dl_\alpha.$$

Заметим, что здесь нет свёртки по индексу α , а константа $C_1 = 0$ из условия $A_k^\alpha(\infty) = 0$.

Теперь можно определить поле бесконечной прямолинейной клиновидной дисклинации, направленной вдоль оси i_α . Для этого введём вектор R_j , перпендикулярный оси i_α , который определяет положение точки относительно дисклинации, тогда выражение для поля бесконечной прямолинейной дисклинации, направленной вдоль оси z , можно записать в виде:

$$A_i^z = C \varepsilon_{zij} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x_j}{r^3} dl_z = C \varepsilon_{\alpha ij} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{R_j}{(R^2 + l_z^2)^{3/2}} dl_z = 2C \varepsilon_{zij} \frac{R_j}{R^2}.$$

Из условия $\Omega = 2\pi\nu = \oint A_i^z dl_i$, где Ω — вектор Франка, а ν — индекс Франка, определяем значение константы: $C = \nu/2$, и приходим к результату, совпадающему с выражением для поля бесконечной прямолинейной дисклинации, полученным в работе [119].

Поле от элемента круговой дисклинационной петли радиуса a будет иметь вид

$$A_i^\alpha = \frac{\nu}{2} \varepsilon_{\alpha ij} \frac{x_j}{r^3} dl_\alpha = \frac{\nu a}{2} n_i \frac{1}{r^3} dl_\alpha,$$

где n_i — единичный вектор нормали к плоскости петли.

4.7 Топологический момент

В рассматриваемой дисклинационной модели неупорядоченного конденсированного вещества особая роль отводится *топологическому дипольному моменту*. Причины этого становятся понятными при рассмотрении произвольной сети линейных топологических дефектов. Как

сеть дисклинаций, так и сеть дислокаций могут иметь сложные случайные конфигурации. Задача теоретического описания таких систем очень сложна. Однако, эту задачу можно свести к более знакомому виду. Для этого воспользуемся известной аналогией между теоретическим описанием линейных дефектов и электрических токов в электродинамике. Из электрофизики известно, что энергия взаимодействия сложной сети токов может быть представлена как энергия взаимодействия системы локальных магнитных моментов, создаваемых этими токами в элементарных ячейках пространства, на которые можно условно разделить объём всей системы (ниже это будет объяснено). По аналогии, для вычисления энергии взаимодействия системы линейных дефектов можно представить её как энергию взаимодействия системы локальных топологических моментов [123]. Взаимодействие между такими моментами имеет вид взаимодействия между дисклинационными и (или) дислокационными петлями, так как петля — простейшая конфигурация дефекта, обладающая топологическим моментом.

Так же как и в электродинамике, тензорный потенциал произвольной системы замкнутых линейных дефектов (которые являются аналогами токов в электродинамике), заключённых в произвольном объёме V , имеет вид:

$$A_a^i = e^i \frac{\nu}{2} \varepsilon_{ak}^i \int \frac{x^k}{x^3} l_i dV, \quad (57)$$

где x — расстояние от элемента дисклинации $l_i dV$ до точки наблюдения, e^i — единичный вектор, направленный вдоль $l_i dV$.

Если выбрать внутри рассматриваемой системы дисклинаций произвольную точку, центр “токов”, и обозначить через $\vec{R}$ вектор от этой

точки до точки наблюдения, а через $\vec{r}$ вектор от этой точки до элемента дисклинации ($\vec{R} = \vec{x} + \vec{r}$), то, при условии $r \ll x$, в разложении выражения (57),

$$A_a^i = e^i \frac{\nu}{2} \varepsilon_{ak}^i \frac{R^k}{R^3} \int l_i dV + e^i \frac{\nu}{2} \varepsilon_{ak}^i \int \left(\delta_s^k + 3 \frac{R^k R_s}{R^2} \right) \frac{r^s}{R^3} l_i dV + \dots,$$

можно ограничиться двумя первыми членами:

$$A_a^i = e^i \frac{\nu}{2} \varepsilon_{ak}^i \frac{R^k}{R^3} \int l_i dV + e^i \frac{\nu}{2} \varepsilon_{ak}^i \int \frac{r^k}{R^3} l_i dV + e^i \frac{3\nu}{2} \varepsilon_{ak}^i \int \frac{R^k R_s r^s}{R^5} l_i dV + \dots \quad (58)$$

Отношение двух последних слагаемых к первому по порядку величины равно l/x , где l — поперечный размер объёма V . Поэтому на расстояниях $x > l$, на которых справедлива эта формула, последние два слагаемых малы по сравнению с первым, и приближённо можно считать, что

$$A_a^i = e^i \frac{\nu}{2} \varepsilon_{ak}^i \frac{R^k}{R^3} \int l_i dV.$$

Однако, в случае произвольной системы замкнутых топологических дефектов, заключённых в объёме V , т.е. в том случае, когда через поверхность S , ограничивающую этот объём, никаких токов не протекает,

$$\int l_i dV = 0,$$

а потенциал определяется вторым и третьим слагаемыми формулы (58). Таким образом

$$A_a^i = e^i \nu \varepsilon_{ak}^i \int \frac{r^k}{R^3} l_i dV + e^i \frac{3\nu}{2} \varepsilon_{ak}^i \frac{R^k}{R^5} \int R_s r^s l_i dV + \dots$$

Воспользовавшись соотношением $\mathbf{a}(\mathbf{bc}) = \frac{1}{2}[[\mathbf{ca}]\mathbf{b}] + \frac{1}{2}\mathbf{a}(\mathbf{bc}) + \mathbf{c}(\mathbf{ab})$ можно представить это выражение в виде:

$$\begin{aligned} A_a^i = e^i e_s \pi a^2 \nu \varepsilon_{ak}^i \varepsilon_i^{ks} \frac{1}{R^3} + e^i \frac{3\nu}{2} \varepsilon_{ak}^i \frac{R^k}{R^5} \int \frac{1}{2} ([[\mathbf{rl}]\mathbf{R}]_i + l_i(\mathbf{rR}) + \\ r_i(\mathbf{lR})) dV + \dots = e^i e_s \pi a^2 \nu (\delta_a^i \delta_i^s - \delta_i^s \delta_a^i) \frac{1}{R^3} - \\ e^i \frac{3\pi a^2 \nu}{2} \varepsilon_{ak}^i \frac{R^k}{R^5} [\mathbf{eR}]_i + e^i \frac{3\nu}{4} \varepsilon_{ak}^i \frac{R^k}{R^5} \int (l_i(\mathbf{rR}) + r_i(\mathbf{lR})) dV + \dots \end{aligned}$$

В нём второе слагаемое равно нулю. Последнее слагаемое тоже становится равным нулю по той же причине, что и первое в (58). Таким образом, приходим к

$$A_a^i = \pi a^2 \nu (\delta_a^i - 3e^i e_a) \frac{1}{R^3} + \dots \approx \frac{Q_a^i}{R^3},$$

где $Q_a^i = \pi a^2 \nu (\delta_a^i - 3e^i e_a)$ — топологический момент.

Причина того, что потенциал калибровочного поля системы зарядов зависит от топологического момента, в самоэкранировке топологических зарядов, в результате которой свободные подсистемы дисклинаций и дислокаций трансформируются таким образом, чтобы быть топологически нейтральными, т.е. чтобы значение локальной суммы топологических зарядов стремились к нулю. В этом случае энергия системы минимизируется, так как объёмная плотность энергии прямолинейных дисклинаций и дислокации (топологических зарядов), которые имеют вид $\sim 1/r$ и $\sim 1/r^3$, соответственно, спадают значительно медленнее чем плотности энергии топологических моментов ($1/r^3$ и $1/r^5$).

Таким образом, основным параметром, характеризующим систему дисклинаций, является её топологический момент, Q_a^i . А тензорный

потенциал замкнутой системы дисклинаций на больших расстояниях равен

$$A_a^i = \frac{Q_a^i}{R^3},$$

где R — расстояние точки наблюдения от системы токов, характериземой этим моментом.

4.8 Взаимодействие между топологическими моментами

Поле напряжений вокруг дисклинации имеет вид:

$$\sigma_{ai} = \frac{1}{2} (\partial_c \chi_i + \varepsilon_{aik} A_c^\alpha \chi_k) (\lambda' \delta_{bc} E_{ll} + 2\lambda E_{ac}), \quad (59)$$

где $E_{ab} = B_{ia} B_{ib} - \delta_{ab}$ — тензор деформации, $B_{ai} = \partial_a \chi_i + \varepsilon_{aij} \chi_j A_a^\alpha$ — тензор дисторсии, λ' и λ — коэффициенты Ламе (модуль упругости и модуль сдвига соответственно). Будем рассматривать малоугловые дисклинации, с индексом Франка $\nu \sim 0.2$, характерные для аморфной структуры, в этом случае рассматриваемая нами модель может быть линеаризована

$$\chi^i = \delta_{ia} x_a + \varepsilon u_{1i} + \varepsilon^2 u_{2i} + \dots, \quad (60)$$

$$A_a^\alpha = \varepsilon A_{1a}^\alpha + \varepsilon^2 A_{2a}^\alpha + \dots,$$

где ε ($\varepsilon \sim \nu$) — малый параметр, $u_i = \varepsilon u_{1i} + \varepsilon^2 u_{2i} + \dots$ — вектор смещения. После подстановки (60) в (59), ограничиваясь первым порядком малости и оставляя только недиагональные элементы тензора деформации, получаем

$$\sigma_{ai} = \lambda E_{ai} = \lambda (B_{aj} B_{ji} - \delta_{ai}) = \lambda [\varepsilon_{\alpha al} x_l A_i^\alpha + \varepsilon_{\alpha il} x_l A_a^\alpha + \partial_i u_a + \partial_a u_i].$$

Это выражение позволяет записать энергию взаимодействия топологических дефектов.

4.8.1 Взаимодействие между дисклинационными топологическими моментами

Основная идея нашего подхода впервые была предложена в работах Н. Ривьера [124]. Согласно его теории стеклование можно рассматривать как фазовый переход в системе топологических линейных дефектов. В этой теории не существует принципиальной разницы между спиновыми и структурно-неупорядоченными системами. Как в первом, так и во втором случае задача описания системы сводится к описанию системы взаимодействующих дисклинаций. Мы хотим воспользоваться этой аналогией, и максимально приблизить описание структурно-неупорядоченной системы к спиновой модели. Это необходимо для того чтобы применить к описанию нашей модели результаты, полученные в теории спин-стекольных систем.

Воспользуемся приближением, хорошо известным в классической электродинамике [123], и поставим в соответствие системе линейных дисклинаций, заключённых в некоторой локальной области пространства, их общий топологический момент (аналог магнитного момента системы токов). Таким образом, как было показано выше, полная энергия упругого взаимодействия между всеми элементами дисклинационной сети может быть представлена как энергия взаимодействия системы локальных топологических моментов. Поскольку простейшим структурным элементом, обладающим топологическим моментом, яв-

ляется дисклинационная петля, для упрощения модели представим дисклинационную сеть в виде системы случайно расположенных и случайно ориентированных дисклинационных петель. Энергия упругого взаимодействия между двумя круговыми дисклинационными петлями Γ и Γ' радиуса a , расположение которых относительно друг от друга задаётся вектором $\bar{r}$, имеет вид

$$F = \frac{\lambda}{2} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} x_l A_i^\alpha \varepsilon_{\gamma\alpha\beta} x'_j A_i'^\gamma = n_i n'_i \frac{\lambda(a\nu)^2}{8} \oint_{\Gamma} \oint_{\Gamma'} \left(\int \frac{x_l x'_l}{|x|^3 |x'|^3} dV \right) dl_j dl'_j,$$

где $\bar{x} = \bar{x}' + \bar{r}$. Проинтегрировав по объёму получаем:

$$F = n_i n'_i \frac{\pi^2 \lambda(a\nu)^2}{4} \oint_{\Gamma} \oint_{\Gamma'} \frac{1}{r} dl_j dl'_j. \quad (61)$$

Заметим, что это выражение совпадает с выражением для энергии взаимодействия петель с током только при условии $\bar{n} \parallel \bar{n}'$. Таким образом свободная энергия системы дисклинационных петель (61), может быть представлена в следующем виде:

$$F \approx \pi^4 a^6 \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \nu_\alpha \nu_\beta n_i(\vec{r}_\alpha) n_l(\vec{r}_\alpha) J_{ijkl}(\vec{r}_{\alpha\beta}) n_j(\vec{r}_\beta) n_k(\vec{r}_\beta), \quad (62)$$

с межспиновым взаимодействием

$$J_{lkij}(\vec{r}_{\alpha\beta}) \approx \lambda \frac{\delta_{ij}}{2|\vec{r}_{\alpha\beta}|^3} \left(\delta^{lk} - 3 \frac{r_{\alpha\beta}^l r_{\alpha\beta}^k}{r_{ij}^2} \right).$$

Полученная модель симметрична относительно преобразования $\bar{n} \rightarrow -\bar{n}$, поэтому нам будет удобно рассматривать в качестве параметра порядка известный из теории нематиков [125] тензор

$$Q_{il}(\vec{r}_\alpha) = \pi^2 a^3 \nu_\alpha [3n_i(\vec{r}_\alpha) n_l(\vec{r}_\alpha) - \delta_{il}],$$

который является топологическим моментом соответствующей системы дисклинаций. С помощью топологического момента можно переписать (62) в виде

$$F = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} Q_{il}(\vec{r}_\alpha) J_{ijkl}(\vec{r}_{\alpha\beta}) Q_{jk}(\vec{r}_\beta).$$

Таким образом, полученную модель можно интерпретировать как модель нематика, в которой взаимодействие между директорами имеет вид диполь-дипольного взаимодействия. Это обстоятельство является принципиально важным. Дело в том, что область значений параметра порядка в полученной модели есть $\mathbb{RP}^2$, а из топологии известно, что в такой системе могут существовать всё те же топологически устойчивые линейные дефекты — дисклинации. Действительно, в случае линейной особенности (дефекта) из координатного пространства $\mathbb{R}^3$ удаляется линия $\mathbb{R}$, таким образом, наличие линейной особенности приводит к отображению окружности: $\mathbb{R}^3 \setminus \mathbb{R}^1 \sim S^1$. Линейная особенность будет устойчивой, так как распределение поля параметра порядка с особенностью невозможно непрерывной деформацией (гомотопией) перевести в однородное множество гомотопических классов отображения окружности S^1 в пространство $\mathbb{RP}^2$: $[S^1, \mathbb{RP}^2] = \pi_1(\mathbb{RP}^2) = \pi_1(S^1) = \mathbb{Z} \neq 1$ ($\mathbb{Z}$ — множество целых чисел).

Это свойство топологического момента позволяет предположить, что дисклинационную систему можно описать как самоподобную иерархию топологических моментов, определённых на различных масштабах. Можно показать, что поле, создаваемое вихрем топологических моментов, действительно подобно исходному полю линейной дискли-

нации: суммарное поле, создаваемое топологическими моментами, расположенными на замкнутом контуре вокруг вихря, будет

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \oint \frac{Q_{ij}}{R^3} dl = 2\varepsilon_{ilk} \int \partial_l \frac{r_k r_j}{r^2 R^3} dS = 2\varepsilon_{ijk} \int \frac{r_k}{r^2 R^3} dS = \\ &= 2\pi\varepsilon_{ijk} \frac{r_k}{R^3}. \end{aligned}$$

После интегрирования по r от 0 до R получаем:

$$A_{ij} \simeq 4\pi\varepsilon_{ijk} \frac{R_k}{R^3}.$$

В результате, мы опять приходим к системе дисклинаций, описываемой той же моделью, только с более крупным масштабом. Это неудивительно, поскольку поля дефектов являются топологическими полями и определяются топологическими свойствами системы независимо от масштаба. Такая иерархия топологических вихрей должна определять скейлинговые свойства системы.

4.9 Параметр порядка

Для использования скейлинговой гипотезы при описании перехода жидкость–стекло необходимо определить *параметр порядка*. На первый взгляд эта задача представляется нетривиальной и даже невыполнимой, поскольку сразу трудно понять, о каком порядке в жидкости можно говорить. Однако, всё не так безнадежно.

Параметр порядка в статистической физике характеризует локальное состояние части системы, и определяется симметрией расположения ближайших атомов, локальной плотностью и т.п. Ошибочно полагать, что появление у каждого элемента системы общего параметра

порядка при фазовом переходе тождественно появлению трансляционной симметрии. Появление трансляционной симметрии является лишь частным случаем, имеющим место, когда симметрия локального порядка, к которому переходит система, совместима с трансляционной симметрией. В общем случае симметрия локальной упаковки может оказаться топологически несовместимой с трансляционной симметрией, тогда возникновение дальних корреляций параметра порядка происходит без возникновения трансляционной симметрии. Симметрия системы в этом случае нарушена, следствием чего является возникновение дисклинаций. Именно такой физический смысл параметра порядка обычно предполагается при описании переходов жидкость–жидкость. Такая параметризация является наиболее подходящей для описания плотных и переохлаждённых жидкостей.

Одной из идей, заложенных в теоретическое описание стеклования, является скейлинговая гипотеза, аналогичная таковой в теории фазовых переходов второго рода. Для того чтобы скейлинговая гипотеза имела смысл необходимо, чтобы вид свободной энергии модели, описываемой этим параметром порядка, не менялся при изменении пространственного и временного масштабов, т.е. чтобы топология параметра порядка не зависела от масштаба. В случае описания кристаллизации или перехода парамагнетик–ферромагнетик проблем с изменением топологии модели не возникает. Однако при описании стеклования в спиновых системах обычно используемый параметр порядка Здвардса–Андерсона, не является масштабно-инвариантным. При описании стеклования в молекулярных системах в качестве параметра по-

рядка используется плотность, имеющая тот же недостаток. Поэтому, представляется вполне разумным рассмотреть в качестве параметра порядка локальный топологический момент системы дисклинаций, который, как было показано выше, лишён этого недостатка.

4.10 Описание стеклования в дисклинационных системах

Взаимодействие между дисклинациями является дальнodelствующим, а системы с дальнodelствующим взаимодействием могут быть переведены в стекольное состояние [49]. Для того, чтобы описать стеклование в системе дисклинаций необходимо сделать логический скачок: Известно, что системы с дальнodelствующим взаимодействием являются фрустрированными [49]. Поскольку в рассматриваемой модели взаимодействие между топологическими моментами является дальнodelствующим и знакопеременным, то можно ожидать, что она будет фрустрированной. Наиболее простым способом ввести в модель фрустрации является добавление случайного знакопеременного поля³. Тогда вблизи фазового перехода, T_g , действие системы можно представить в виде

$$F = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} Q_{il}(\vec{r}_\alpha) J_{ijkl}(\vec{r}_{\alpha\beta}) Q_{jk}(\vec{r}_\beta) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} Q_{il}(\vec{r}_\alpha) (-\nabla^2 + \mu^2) Q_{il}(\vec{r}_\alpha) + \\ + \frac{\gamma}{3} \sum_{\alpha} Q_{il}(\vec{r}_\alpha) Q_{lj}(\vec{r}_\alpha) Q_{ji}(\vec{r}_\alpha) + \frac{v}{4} \sum_{\alpha} Q_{il}(\vec{r}_\alpha) Q_{lj}(\vec{r}_\alpha) Q_{jk}(\vec{r}_\alpha) Q_{ki}(\vec{r}_\alpha), \quad (63)$$

где $\mu^2 = \kappa(T - T_g)/T_g$, а по повторяющимся индексам производится суммирование. Обычный подход к описанию фрустрированной систе-

³ Другой способ введения фрустраций, без логических скачков, предложен в пятой главе.

мы предполагаем, что пространство состояний такой системы разбито на долины, разделённые между собой энергетическими барьерами со сложным рельефом. Опишем состояния, соответствующие каждой долине, функциями $Q_{ij}^a(\vec{r}, t)$, где a — номер долины, после чего будем исходить из стандартной задачи стохастической динамики и предположим, что состояния, соответствующие различным долинам, связаны между собой. Тогда, согласно теории взаимодействующих мод, обобщение задачи на случай системы полей $\{Q_{ij}^a(\vec{r}, t)\}$ имеет вид:

$$\sum_b \Gamma_{ab} \partial_t Q_{ij}^b(t, \vec{r}) = -\frac{\delta F\{Q\}}{\delta Q_{ij}^a(t, \vec{r})} + \zeta_{ij}^a(t, \vec{r}), \quad (64)$$

$$\langle \zeta_{ij}^a(t, \vec{r}) \zeta_{ij}^b(t', \vec{r}') \rangle = 2\Gamma_{ab} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'). \quad (65)$$

Здесь индексы a и b нумеруют долины. Функционал $S\{Q\}$ содержит случайное поле J , посредством которого моделируется замороженный беспорядок, обусловленный наличием дисклинационных дефектов:

$$\begin{aligned} F\{Q\} = & \frac{1}{2} \int d\vec{r} d\vec{r}' dt dt' Q_{il}^a(\vec{r}, t) ((\nabla^2 - \mu^2) \delta_{ij} \delta_{lk} \delta(\vec{r} - \vec{r}')) \times \\ & \times \delta(t - t') Q_{jk}^a(\vec{r}', t') + \frac{\rho}{2} \int d\vec{r} dt Q_{ij}^a(\vec{r}, t) J^a(\vec{r}, t) Q_{ij}^a(\vec{r}, t) + \\ & + \frac{\gamma}{3} \int d\vec{r} dt Q_{il}^a(\vec{r}, t) Q_{lj}^a(\vec{r}, t) Q_{ji}^a(\vec{r}, t) + \\ & + \frac{v}{4} \int d\vec{r} dt Q_{il}^a(\vec{r}, t) Q_{lj}^a(\vec{r}, t) Q_{jk}^a(\vec{r}, t) Q_{ki}^a(\vec{r}, t), \quad (66) \end{aligned}$$

В импульсном пространстве

$$\begin{aligned} F\{Q\} = & \frac{1}{2} \int d\vec{k} d\omega Q_{il}^a(\vec{k}, \omega) \left(\lambda \delta_{ij} \left(\delta_{lk} - \frac{k_l k_k}{k^2} \right) + \right. \\ & \left. (k^2 + \mu^2) \delta_{ij} \delta_{lk} \right) Q_{jk}^a(\vec{k}, \omega) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\rho}{2} \int d\vec{k}_1 d\omega_1 d\vec{k}_2 d\omega_2 Q_{ij}^a(\vec{k}_1, \omega_1) J^a(\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \omega_1 + \omega_2) Q_{ij}^a(\vec{k}_2, \omega_2) \\
& + \frac{\gamma}{3} \int d\vec{k}_1 d\omega_1 d\vec{k}_2 d\omega_2 Q_{il}^a(\vec{k}_1, \omega_1) Q_{lj}^a(\vec{k}_2, \omega_2) Q_{ji}^a(\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \omega_1 + \omega_2) \\
& + \frac{v}{4} \int d\vec{k}_1 d\omega_1 d\vec{k}_2 d\omega_2 d\vec{k}_3 d\omega_3 Q_{il}^a(\vec{k}_1, \omega_1) Q_{lj}^a(\vec{k}_2, \omega_2) Q_{jk}^a(\vec{k}_3, \omega_3) \times \\
& \times Q_{ki}^a(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3, \omega_1 + \omega_2 + \omega_3),
\end{aligned}$$

Воспользуемся методом сведения стохастической задачи к квантово-полевой модели и запишем статистическую сумму модели в виде

$$Z = \left\langle \int \left(\prod_{a,i,j} DQ_{ij}^a D\bar{Q}_{ij}^a \right) \exp [S_{\{Q, \bar{Q}, J\}}] \right\rangle_J,$$

$$\begin{aligned}
S_{\{Q, \bar{Q}, I\}} = & \int d\vec{k} d\omega \bar{Q}_{il}^a(\vec{k}, \omega) 2\Gamma_{ab} \bar{Q}_{il}^b(\vec{k}, \omega) \\
& - \int d\vec{k} d\omega \bar{Q}_{il}^a(\vec{k}, \omega) \left[\left(-\lambda \frac{k_l k_k}{k^2} + (k^2 + \mu^2 + \lambda) \delta_{lk} \right) \delta_{ij} \delta_{ab} + \right. \\
& \quad \left. i\Gamma_{ab} \delta_{ij} \delta_{lk} \omega \right] Q_{jk}^b(\vec{k}, \omega) \\
& - \rho \int d\vec{k}_1 d\omega_1 d\vec{k}_2 d\omega_2 \bar{Q}_{ij}^a(\vec{k}_1, \omega_1) J^a(\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \omega_1 + \omega_2) Q_{ij}^a(\vec{k}_2, \omega_2) \\
& - \gamma \int d\vec{k}_1 d\omega_1 d\vec{k}_2 d\omega_2 \bar{Q}_{il}^a(\vec{k}_1, \omega_1) Q_{lj}^a(\vec{k}_2, \omega_2) Q_{ji}^a(\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \omega_1 + \omega_2) \\
& - v \int d\vec{k}_1 d\omega_1 d\vec{k}_2 d\omega_2 d\vec{k}_3 d\omega_3 \bar{Q}_{il}^a(\vec{k}_1, \omega_1) Q_{lj}^a(\vec{k}_2, \omega_2) Q_{jk}^a(\vec{k}_3, \omega_3) \times \\
& \quad \times Q_{ki}^a(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3, \omega_1 + \omega_2 + \omega_3).
\end{aligned}$$

Как и в главе 3 представим коррелятор случайных взаимодействий в виде θ -функции Хевисайда:

$$\langle J^a(t, \vec{r}) J^b(t', \vec{r}') \rangle = \theta(|t - t'| - \tau_{ab}) \delta(\vec{r} - \vec{r}').$$

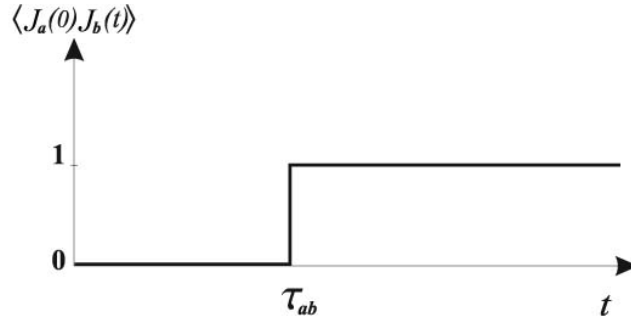


Рис. 24: Графическое представление коррелятора $\langle J^a(t)J^b(t') \rangle$.

Время релаксации τ_{ab} зависит от расстояния между долинами a и b в ультраметрическом пространстве x_{ab} : $\tau_{ab} = \tau_0 e^{x_{ab}}$.

“Затравочные” корреляционные функции полей, присутствующих в нашей модели, в симметричной форме имеют следующий вид (при $\Gamma_{aa} = \Gamma$):

$$\begin{aligned} \langle \bar{Q}_{ij}^a Q_{lk}^b \rangle &= \delta_{ab} \frac{(\varepsilon_k + i\Gamma\omega)\delta_{jk}\delta_{il} + \lambda \frac{k_j k_k}{k^2} \delta_{il}}{(\varepsilon_k + i\Gamma\omega)(\lambda + \varepsilon_k + i\Gamma\omega)}, \\ \langle Q_{ij}^a Q_{lk}^b \rangle &= 2\Gamma_{ab} \frac{4(\varepsilon_k^2 + \Gamma^2\omega^2)\delta_{jk}\delta_{il} + \delta_{jk}\lambda \frac{k_i k_l}{k^2}(\lambda + 2\varepsilon_k) + \lambda^2 \frac{k_i k_j k_l k_k}{k^4}}{(\varepsilon_k^2 + \Gamma^2\omega^2)((\lambda + \varepsilon_k)^2 + \Gamma^2\omega^2)}, \\ \langle J^a J^b \rangle &= \frac{e^{-i\omega\tau_{ab}}}{i\omega}, \end{aligned}$$

где $\varepsilon_k = k^2 + \mu^2$. Представим эти корреляционные функции в виде графов а, б и в, соответственно (рис. 25).

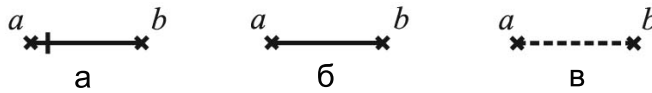


Рис. 25: Диаграммное представление корреляторов входящих в модель полей.

Предположим, что вблизи перехода жидкость–стекло будет справедлива скейлинговая гипотеза. В этом случае самоподобие системы

при её масштабных преобразованиях будет несколько отличаться от такового в случае перехода второго рода в магнетиках. Такой фазовый переход можно представить следующим образом: сначала возникает корреляция топологических моментов (директоров), характеризующаяся некоторой корреляционными длиной r_{cor} и временем t_{cor} . Она приводит к “замораживанию” топологически устойчивых дисклинаций в поле директоров, что приводит к возникновению следующего уровня топологических моментов, соответствующих новому масштабу. Дальнейшее увеличение r_{cor} и t_{cor} приводит к “замораживанию” топологически устойчивых дисклинаций уже в поле новых директоров и так далее.

Сформулированная модель является мультипликативно ренормируемой, а ренормированное эффективное действие имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
S^{(R)}\{Q, \bar{Q}, J\} = \sum_{ab} \int d\omega d^d k \left[Z_1 \bar{Q}_{ij}^a \bar{Q}_{ij}^b - Z_2 \omega \bar{Q}_{ij}^a Q_{ij}^a - \right. \\
\left. - Z_3 k^2 \bar{Q}_{ij}^a Q_{ij}^a - Z_4 \bar{Q}_{ij}^a Q_{ij}^a - Z_5 \delta_{jk} \frac{k_i k_l}{k^2} \bar{Q}_{ij}^a Q_{lk}^a - Z_9 i \omega e^{i \omega \tau_{ab}} J^a J^b \right] - \\
- \int d\omega d^d k d\omega' d^d k' \left[Z_6 J^a(\vec{k}) \bar{Q}_{ij}^a(\vec{k}') Q_{ij}^a(\vec{k} + \vec{k}') + \right. \\
\left. + Z_7 \bar{Q}_{il}^a(\vec{k}) Q_{lj}^a(\vec{k}') Q_{ji}^a(\vec{k} + \vec{k}') \right] - \\
\int d\omega d^d k d\omega' d^d k' d\omega'' d^d k'' Z_8 \bar{Q}_{il}^a(\vec{k}) Q_{ln}^a(\vec{k}') Q_{nj}^a(\vec{k}'') Q_{ji}^a(\vec{k} + \vec{k}' + \vec{k}''), \quad (67)
\end{aligned}$$

где $Z_1 = Z_{\Gamma_{ab}} Z_{\bar{Q}}^2$, $Z_2 = Z_{\Gamma_{ab}} Z_{\bar{Q}} Z_Q$, $Z_3 = Z_{\bar{Q}} Z_Q$, $Z_4 = Z_{\mu^2} Z_{\bar{Q}} Z_Q$, $Z_5 = Z_{\lambda} Z_{\bar{Q}} Z_Q$, $Z_6 = Z_{\varrho} Z_J Z_{\bar{Q}} Z_Q$, $Z_7 = Z_{\gamma} Z_{\bar{Q}} Z_Q^2$, $Z_8 = Z_{\nu} Z_{\bar{Q}} Z_Q^3$, $Z_9 = Z_{\chi} Z_J^2$ —

соответствующие константы перенормировки. Канонические размерности полей и параметров этой модели, вычисленные из условия безразмерности действия (67), приведены в таблице:

F	k, ∇	ω, ∂_t	Γ	Q	$\bar{Q}$	J
d_F^k	1	0	2	$-(1 + d/2)$	$-(1 + d/2)$	$-d/2$
d_F^ω	0	1	-1	-1	0	-1
d_F	1	$z=2$	0	$-(3 + d/2)$	$-(1 + d/2)$	$-(2 + d/2)$

F	μ^2, λ	ϱ	γ	v
d_F^k	2	$2 - d/2$	$3 - d/2$	$4 - d$
d_F^ω	0	0	0	0
d_F	2	$2 - d/2$	$3 - d/2$	$4 - d$

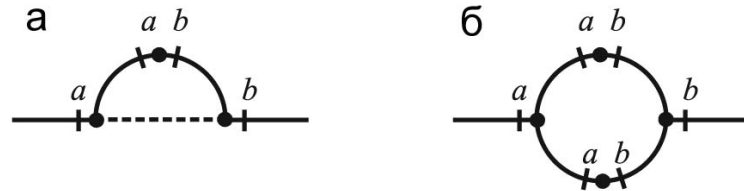


Рис. 26: Диаграммы, вносящие вклад в ренормировку вершины $\bar{\alpha}_{ab}$ (однопетлевое приближение).

Процедура ренормировки, в которой мы ограничимся однопетлевым приближением, имеет принципиально важное значение. Особенно важна ренормировка параметра Γ_{ab} , которая выглядит следующим образом (рис. 26а): При $t \gg \tau_{ab}$ корреляционная функция полей J равна 1, поэтому вклад в перенормировку от первой диаграммы имеет сле-

дующий вид:

$$\begin{aligned}
Z_{\Gamma_{ab}} \delta_{il} \delta_{jk} &= \Gamma_{ab} \delta_{il} \delta_{jk} - \varrho^2 \frac{2\Gamma_{ab}}{2!} \int_{\Lambda k_0 < |k| < k_0} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \times \\
&\times \frac{4\varepsilon_k^2 \delta_{il} \delta_{jk} + \lambda \frac{k_i k_l}{k^2} \delta_{jk} (\lambda + 2\varepsilon_k) + \lambda^2 \frac{k_i k_j k_l k_k}{k^4}}{\varepsilon_k^2 (\varepsilon_k + \lambda)^2} \approx \\
&\approx \Gamma_{ab} \delta_{il} \delta_{jk} - 2\varrho^2 \Gamma_{ab} \delta_{il} \delta_{jk} \int_{\Lambda k_0 < |k| < k_0} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{\varepsilon_k^2} = \\
&= \Gamma_{ab} \delta_{il} \delta_{jk} \left[1 - \frac{\varrho^2}{4\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) \right], \quad (68)
\end{aligned}$$

где было принято во внимание, что $\varepsilon_k \ll \lambda$ при $k \rightarrow 0$.

При $t \ll \tau_{ab}$ корреляционная функция полей J равна 0, поэтому вклад в перенормировку от этой диаграммы отсутствует. Аналогично тому, как это было сделано в предыдущей главе, проведём процедуру сшивки двух предельных решений, в результате получаем:

$$Z_{\Gamma_{ab}} = \Gamma_{ab} \left[1 - \frac{\varrho^2}{4\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) (1 - \Lambda^z) \right]. \quad (69)$$

Из последнего выражения видно, что учёт временной ультраметрии при интегрировании по ω приводит к нетривиальной зависимости ре-нормировки Γ_{ab} от параметра обрезания Λ , поэтому именно этот параметр содержит наиболее очевидные особенности, обусловленные наличием иерархии времён релаксации системы и влияющие на её динамические свойства.

Вторая диаграмма, изображённая на рис. 26, является двухпетлевой, она даёт вклад порядка u^2 и не зависит от временного масштаба,

поэтому её вклад будет несущественен.

Ренормировка μ^2 выглядит следующим образом (рис. 27):

$$Z_{\mu^2}\delta_{ab} = \mu^2\delta_{ab} - \Sigma_{1ab} - \Sigma_{2ab} - \Sigma_{3ab},$$

где Σ_{1ab} , Σ_{2ab} и Σ_{3ab} — вклады в перенормировку диаграмм а), b) и с) соответственно. Вклад от первой диаграммы представляется следующим образом:

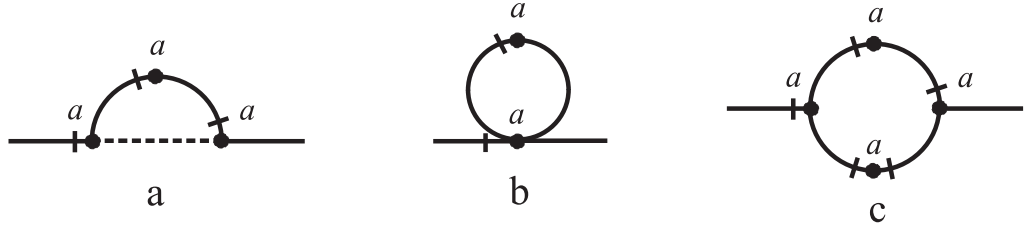


Рис. 27: Диаграммы, вносящие вклад в ренормировку вершины μ^2 (однопетлевое приближение).

$$\begin{aligned} \Sigma_{1ab} = & \varrho^2 \frac{2\mu^2\delta_{ab}}{2!} \int_{\Lambda^z\omega_0 < |\omega| < \omega_0} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{\Lambda k_0 < |k| < k_0} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{e^{-i\omega\tau_{ab}}}{i\omega} \times \\ & \times \frac{4(\varepsilon_k^2 + \Gamma^2\omega^2)\delta_{il}\delta_{jk} + \lambda \frac{k_i k_l}{k^2} \delta_{jk} (\lambda + 2(\varepsilon_k + i\Gamma\omega)) + \lambda^2 \frac{k_i k_j k_l k_k}{k^4}}{(\Gamma\omega - i\varepsilon_k)^2 (\Gamma\omega - i(\varepsilon_k + \lambda))^2}. \end{aligned}$$

После интегрирования по ω , принимая во внимание, что $\tau_{aa} = 0$, находим $\Sigma_{1ab} = 0$. Второй контрчлен имеет вид:

$$\Sigma_{2ab} = \mu^2 v \delta_{ab} \frac{24}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right).$$

Третий контрчлен $\sim \gamma^2 \sim \varepsilon^2$, и мы им пренебрегаем. Таким образом

$$Z_{\mu^2} \simeq \mu^2 - \mu^2 v \frac{24}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) + O(\varepsilon^2).$$

Диаграммы, ренормирующие вершину $\varrho \bar{Q}_a Q_a J_a$ в однопетлевом приближении, имеют вид, представленный на рис. 28. Используя полу-

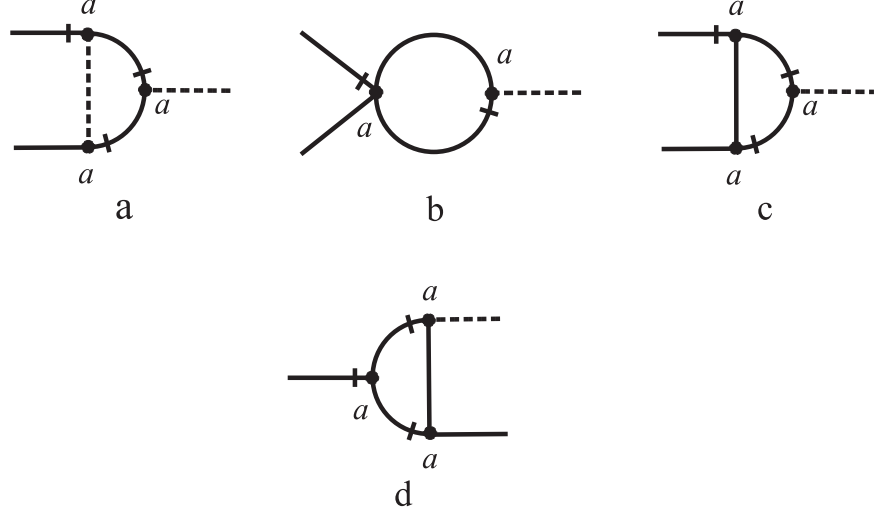


Рис. 28: Диаграммы, вносящие вклад в ренормировку вершины ϱ (однопетлевое приближение).

ченные выше результаты и пренебрегая малым вкладом ($\sim \varepsilon^2$) двух последних диаграмм несложно показать, что перенормировка этой вершины выглядит следующим образом:

$$Z_\varrho = \varrho - \varrho v \frac{24}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) + O(\varepsilon^2).$$

В однопетлевом приближении диаграммы, ренормирующие вершину $\gamma \bar{Q}_a Q_a^2$, имеют вид, представленный на рис. 29 ($Z_\gamma = \gamma - \Upsilon_1 - \Upsilon_2 - \Upsilon_3 - \Upsilon_4 - \Upsilon_5 - \Upsilon_6$). Однако, как было показано выше, первая диаграмма (a) даёт нулевой вклад в перенормировку ($\Upsilon_1 = 0$), а вкладами диаграмм f и e мы пренебрегаем, поскольку они $\sim \varepsilon^3$. Вторая диаграмма (b) даёт вклад:

$$\begin{aligned} \Upsilon_2 = & \gamma \varrho^2 \delta_{ab} \frac{2}{2!} \int_{\Lambda^z \omega_0 < |\omega| < \omega_0} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{\Lambda k_0 < |k| < k_0} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \times \\ & \times \frac{4(\varepsilon_k^2 + \Gamma^2 \omega^2) \delta_{il} \delta_{jk} + \lambda \frac{k_i k_l}{k^2} \delta_{jk} (\lambda + 2\varepsilon_k) + \lambda^2 \frac{k_i k_j k_l k_k}{k^4}}{(\Gamma^2 \omega^2 + \varepsilon_k^2)(\Gamma^2 \omega^2 + (\varepsilon_k + \lambda)^2)} \cdot \frac{e^{-i\omega \tau_{ab}}}{i\omega} = \end{aligned}$$

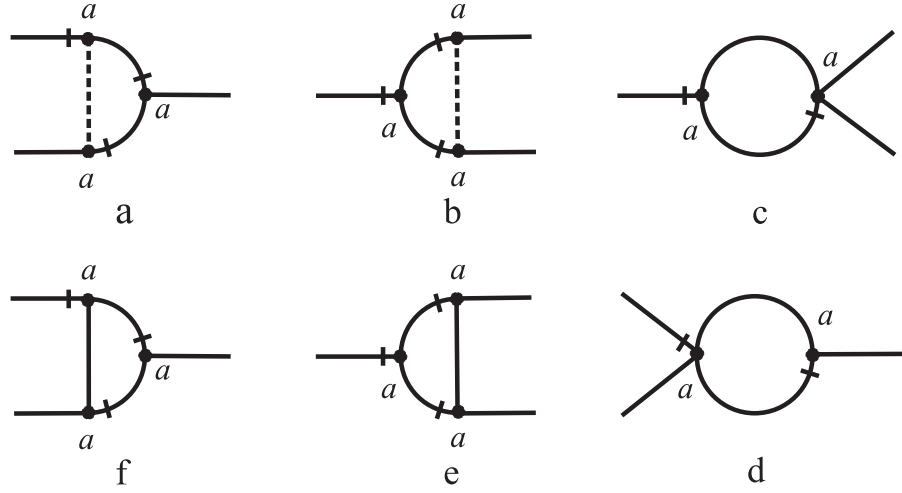


Рис. 29: Диаграммы, вносящие вклад в ренормировку вершины γ (однопетлевое приближение).

$$= -\gamma \varrho^2 \delta_{ab} \frac{2}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right).$$

Вклад диаграмм с и d:

$$\Upsilon_3 + \Upsilon_4 = \gamma v \frac{(6 + 12) \cdot 4}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right).$$

Таким образом, получаем:

$$Z_\gamma = \gamma + \gamma \varrho^2 \frac{2}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) - \gamma v \frac{72}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) + O(\varepsilon^3).$$

В однопетлевом приближении диаграммы, ренормирующие вершину $v\bar{Q}_a Q_a^3$, имеют вид, представленный на рис. 30 ($Z_v = v - U_1 - U_2 - U_3 - U_4 - U_5$). Однако, как было показано выше, первая диаграмма (a) даёт нулевой вклад в перенормировку ($U_1 = 0$). Вторая диаграмма (b) даёт вклад:

$$U_2 = -v \varrho^2 \delta_{ab} \frac{6}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right).$$

Вклад третьей диаграммы (c):

$$U_3 = v^2 \frac{18 \cdot 4}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right).$$

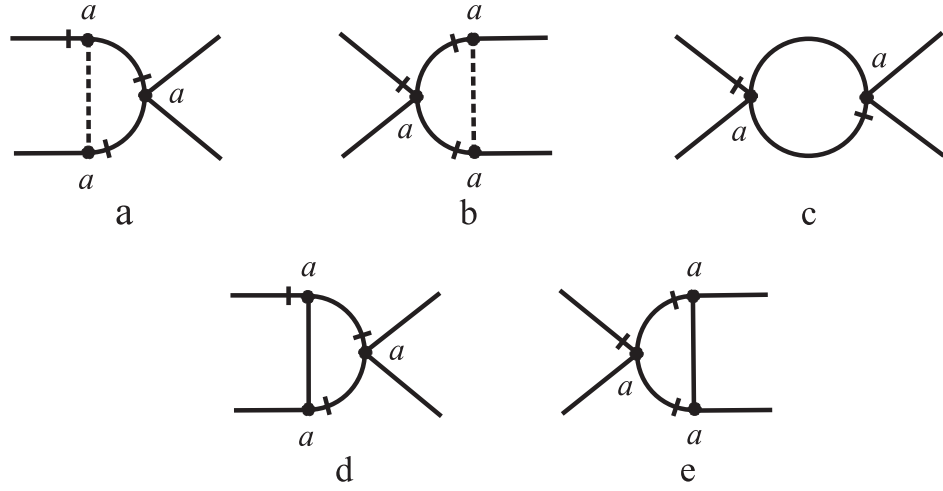


Рис. 30: Диаграммы, вносящие вклад в ренормировку вершины v (однопетлевое приближение).

Вкладами диаграмм d и e мы пренебрегаем, поскольку они $\sim \varepsilon^3$, таким образом, получаем:

$$Z_v = v + v\varrho^2 \frac{6}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) - v^2 \frac{72}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) + O(\varepsilon^3).$$

Полагая, что $Z_Q = \theta(\Lambda)$, $Z_{\bar{Q}} = \theta'(\Lambda)$, $Z_J = \vartheta(\Lambda)$ и проводя масштабное преобразование приходим к следующей ренормализационной группе:

$$\Gamma_{ab}^{(R)} = Z_1 \Lambda^{d+z} = \theta'^2(\Lambda) \Lambda^{d+z} \Gamma_{ab} \delta_{il} \delta_{jk} \left[1 - \frac{\varrho^2}{4\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) (1 - \Lambda^z) \right],$$

$$\Gamma_{ab}^{(R)} = Z_2 \Lambda^{d+2z} = \theta'(\Lambda) \theta(\Lambda) \Lambda^{d+2z} [\Gamma_{ab} - O(v^2)],$$

$$1 = Z_3 \Lambda^{d+z+2} = \theta'(\Lambda) \theta(\Lambda) \Lambda^{d+z+2},$$

$$\mu^{2(R)} = Z_4 \Lambda^{d+z} = \theta'(\Lambda) \theta(\Lambda) \Lambda^{d+z} \left[\mu^2 - \mu^2 v \frac{24}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) \right],$$

$$\begin{aligned}
\varrho^{(R)} &= Z_6 \Lambda^{2d+2z} = \theta'(\Lambda) \theta(\Lambda) \vartheta(\Lambda) \Lambda^{2d+2z} \left[\varrho - \varrho v \frac{24}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) \right], \\
\gamma^{(R)} &= Z_7 \Lambda^{2d+2z} = \theta'(\Lambda) \theta^2(\Lambda) \Lambda^{2d+2z} \left[\gamma + \gamma \varrho^2 \frac{2}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) - \right. \\
&\quad \left. \gamma v \frac{72}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) + O(\varepsilon^3) \right], \\
v^{(R)} &= Z_8 \Lambda^{3d+3z} = \theta'(\Lambda) \theta^3(\Lambda) \Lambda^{3d+3z} \left[v + v \varrho^2 \frac{6}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) - \right. \\
&\quad \left. v^2 \frac{72}{8\pi^2} \ln \left(\frac{1}{\Lambda} \right) + O(\varepsilon^3) \right], \\
\chi^{(R)} &= Z_9 \Lambda^{d+2z} = \vartheta^2(\Lambda) \Lambda^{d+2z} \chi.
\end{aligned}$$

Учитывая канонические размерности полей и вводя новые обозначения: $\xi = \ln(1/\Lambda)$, $\varepsilon = 4 - d$, перепишем систему в виде:

$$\begin{aligned}
\Gamma_{ab}^{(R)} &\simeq \Gamma_{ab} - \Gamma_{ab} \frac{\varrho^2}{4\pi^2} \xi (1 - e^{-z\xi}), \\
\mu^{2(R)} &\simeq e^{2\xi} \left[\mu^2 - \mu^2 v \frac{24}{8\pi^2} \xi \right], \\
\varrho^{(R)} &\simeq e^{\varepsilon\xi/2} \left[\varrho - \varrho v \frac{24}{8\pi^2} \xi \right], \\
\gamma^{(R)} &\simeq e^{2\xi} \left[\gamma + \gamma \varrho^2 \frac{2}{8\pi^2} \xi - \gamma v \frac{72}{8\pi^2} \xi \right], \\
v^{(R)} &\simeq e^{\varepsilon\xi} \left[v + v \varrho^2 \frac{6}{8\pi^2} \xi - v^2 \frac{72}{8\pi^2} \xi \right].
\end{aligned}$$

Раскладывая экспоненты в ряд оставим в равенствах только линейные по ξ слагаемые, за тем, имея в виду непрерывность ренормгруппового преобразования, опишем эволюцию параметров эффективного

действия в виде дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}\frac{d \ln(\Gamma_{ab})}{d\xi} &\simeq \frac{\varrho^2}{4\pi^2}(1 - e^{-z\xi}), \\ \frac{d \ln(\mu^2)}{d\xi} &\simeq 2 - v \frac{24}{8\pi^2}, \\ \frac{d \ln(\varrho)}{d\xi} &\simeq \frac{\varepsilon}{2} - v \frac{24}{8\pi^2}, \\ \frac{d \ln(\gamma)}{d\xi} &\simeq 2 + \varrho^2 \frac{2}{8\pi^2} - v \frac{72}{8\pi^2}, \\ \frac{d \ln(v)}{d\xi} &\simeq \varepsilon + \varrho^2 \frac{6}{8\pi^2} - v \frac{72}{8\pi^2}.\end{aligned}$$

Условие на фиксированную точку задаётся системой: $\frac{d \ln(\varrho)}{d\xi} = 0$, $\frac{d \ln(v)}{d\xi} = 0$, из которой находим $v^* = \pi^2 \varepsilon / 6$, $\varrho^* = \sqrt{2\pi^2 \varepsilon / 3}$. Откуда

$$\begin{aligned}\mu &\simeq \left(\frac{T - T_c}{\kappa^{-1} T_c} \right)^{1/2} = e^\xi, \\ \Gamma_{ab} &\simeq \exp \left(\frac{\varrho^2}{4\pi^2} \xi \right) \cdot \exp \left(\frac{\varrho^2}{4\pi^2 z} e^{-z\xi} \right) = \\ &= \left(\frac{T - T_c}{\kappa^{-1} T_c} \right)^{\frac{\varepsilon}{6}} \cdot \exp \left(\frac{\varepsilon}{6z\kappa} \left(\frac{T_c}{T - T_c} \right)^{z/2} \right).\end{aligned}$$

В непрерывном пределе, $\Gamma_{ab} \rightarrow \Gamma(x)$, мы можем представить временную эволюцию системы в виде:

$$S(t) = \int dx \Delta'(x) \exp \left(-\frac{t}{\Gamma(x)} \right),$$

где $\Delta'(x) \sim j^{-x}$ — плотность распределения пар долин по расстоянию x между этими долинами в ультраметрическом пространстве. Поэтому выражение для наблюдаемого времени релаксации трёхмерной системы принимает вид:

$$t_{rel} \sim \left(\frac{T - T_c}{\kappa^{-1} T_c} \right)^{\frac{q\varepsilon}{6}} \cdot \exp \left(\frac{\varepsilon q}{6z} \left(\frac{\kappa^{-1} T_c}{T - T_c} \right)^{z/2} \right),$$

где $q \sim e^{\sigma/\ln j}$ — величина, определяемая параметрами ультраметрического пространства. Таким образом, при $(T - T_c)/T_c \ll 1$ мы приходим к форме закона Фогеля-Фулчера-Таммана.

Полученный результат ожидаем, поскольку хорошо известно, что микроскопические детали модели, такие, например, как диполь-дипольный характер взаимодействия, не должны влиять на критическое поведение модели. Однако, в рассмотренной модели именно диполь-дипольный характер взаимодействия имеет принципиальное значение, поскольку: во-первых, он делает теоретическую модель масштабно-инвариантной и позволяет тем самым использовать скейлинговую гипотезу; во-вторых, он является причиной фрустрации системы, ведущей к ультраметричности пространства состояний, и таким образом определяет критическую динамику системы.

4.11 Выводы к главе 4

1. Показано, что пластические поля, создаваемые дисклинационными дефектами в локально упорядоченной конденсированной системе, являются абелевыми вследствие нарушения $SO(3)$ -симметрии при возникновении в системе локального ориентационного порядка. Получены выражения для тензорных потенциалов линейных дисклинаций и выражения для энергий взаимодействия дисклинационных петель. Показано, что взаимодействие дисклинационных петель является дальнодействующим.
2. Предложено использовать топологический момент дисклинацион-

ной петли в качестве параметра порядка системы дисклинаций, претерпевающей переход второго рода. С помощью предложенного параметра порядка и метода теоретического описания критической динамики квази-неэргодических систем описана кинетика замерзания системы дисклинаций вблизи этого перехода. Показано, что вблизи критической точки температурная зависимость времени релаксации системы подчиняется закону Фогеля-Фулчера-Таммана.

5 Калибровочная теория стекольного перехода во фрустрированной 3D модели Гейзенберга

Развитая в предыдущих главах техника описания замерзания неэргодических систем строилась на предположении о масштабно-временной неоднородности системы и существовании иерархии времён релаксации, которая искусственно вводилась в модель с помощью наложения дополнительного ограничивающего условия на корреляционную функцию поля случайных связей. Можно предположить, что для самосогласованного вывода этой корреляционной функции в рамках самой теории необходимо исследовать влияние на динамику системы сил дальнедействующего взаимодействия, являющихся причиной фрустрации системы.

В данной главе показана возможность учёта этих дальнедействующих сил с помощью введения в теорию калибровочного поля. Развитая ранее техника применяется для исследования калибровочной модели фрустрированного гейзенберговского магнетика. Благодаря использованию калибровочной модели масштабно-временная неоднородность возникает в теории естественным образом во время процедуры перенормировки.

5.1 Введение

Формулировка универсальной теории стекольных переходов долгое время остаётся одной из наиболее интригующих, но ещё нерешённых проблем физики конденсированного состояния [126, 127, 128]. Большое число систем, в которых происходит это явление независимо от их природы, позволяет заключить, что это явление не зависит от микроскопических деталей, а определяется симметрийнными свойствами, так же как и в случае фазовых переходов второго рода. Тем не менее, хорошо известно что стекольные переходы не сопровождаются расходимостью корреляционного радиуса параметра порядка и линейной восприимчивости, χ_L , типичными для критических явлений. Это не позволяет отнести стекольный переход к классу фазовых переходов. В подтверждение того, что стеклование всё же является критическим явлением необходимо отметить, что при стекольном переходе происходит характерное замедление релаксационных процессов на микроскопическом уровне, при этом наблюдается расходимость нелинейной восприимчивости, χ_N . Кроме того, результаты последних компьютерных исследований позволяют нам полагать, что стекольный переход всё же представляет собой критическое явление, в котором размер временно упорядоченных областей среднего кристаллического порядка могут рассматриваться вместо статического корреляционного радиуса [128]. Эти расходимости являются характерными для критического явления, однако причина этой критичности до сих пор остаётся невыясненной.

Теоретический подход к описанию стекольного перехода, предло-

женный ниже, основан на хорошо известных методах описания критических явлений и нелинейной динамики, и развивает идей предложенные ранее в ряде работ: [129, 130, 131, 124, 117, 49]. Согласно этой теории стекольный переход связан с формированием локального порядка, так же как и фазовый переход второго рода. Предполагается, что ключевой характеристикой, различающей эти явления, является присутствие в стеклообразующих системах индуцируемых беспорядком фрустраций. Фрустрации могут быть индуцированы как замороженным беспорядком, связанным, например, со случайным знаком взаимодействия в случае со спин-стекольным переходом, так и топологическими свойствами системы, как, например, геометрические фрустрации в [49]. Фрустрации искривляют пространство системы [124], делают его гетерогенным и приводят к его пластической деформации. Ниже фрустрации буду описываться как топологические дефекты (дисклинации), которые являются источниками соответствующих калибровочных полей [130, 131, 124, 117, 49, 116]. Размер флуктуаций параметра порядка в неупорядоченной фазе возрастает при приближении к точке фазового перехода, T_c . Однако, система содержит фрустрации, для поглощения которых флуктуациями необходима дополнительная энергия. Поэтому, потенциальная энергия системы растёт с ростом размера флуктуации, пока этот размер меньше некоторого характерного масштаба, $L_{fluct} \ll L_{frust}$. Поскольку флуктуации не могут расти больше чем L_{frust} , при приближении к этому размеру происходит их критическое замедление. Ниже будет показано, что такое критическое поведение связано с уменьшением (исчезновением) эффектив-

ной массы калибровочного поля, которое происходит при температуре $T_g > T_c$. В результате система замерзает в состоянии с неупорядоченной структурой. Таким образом, стекольный переход сопровождается критическим замедлением роста флуктуаций присутствующими в системе фрустрациями, что согласуется с представлениями теории ограниченных фрустрациями флуктуаций [49] и коррелирует с другими работами [124, 132].

5.2 Формулировка калибровочной модели

Для детального рассмотрения выберем трёхмерную модель Гейзенберга, параметром порядка которой, $\mathbf{s}$, является вектор с непрерывной $SO(3)$ группой симметрии. Исходная модель без фрустраций описывает фазовый переход парамагнетик–ферромагнетик. Статическое действие этой модели имеет вид

$$S = \int \left[\frac{1}{2} (\partial_i \mathbf{s})^2 + U(\mathbf{s}) \right] d\mathbf{r}, \quad (70)$$

где $U(\mathbf{s}) = \mu^2 \mathbf{s}^2 + v \mathbf{s}^4$. Следует заметить, что при $\mu^2 > 0$ этот Лагранжиан инвариантен относительно $SO(3)$ -калибровочных преобразований и $\langle \mathbf{s} \rangle = 0$. Однако, при $\mu^2 < 0$ симметрия нарушается, поскольку система может “выбрать” только одно состояние из всех возможных состояний с минимумом энергии $U(\mathbf{s})$, расположенным на сфере $|\mathbf{s}| = i\mu/\sqrt{2v}$. Фиксируя точку на сфере мы фиксируем вакуум, в результате система больше не симметрична относительно $SO(3)$ преобразований, однако остаётся инвариантной относительно преобразований $SO(2)$ группы вращений вокруг выбранного направления.

Внесённый в систему беспорядок приводит к фрустрации спиновой структуры. Фрустрации могут быть представлены с помощью дисклинаций, проходящих через плоскости фрустрации [124], которые можно ввести в модель с помощью источников калибровочного поля A_μ^a , J_a^μ [124, 116]:

$$S = \int \left[\frac{1}{2} (D_i \mathbf{s})^2 + U(\mathbf{s}) + \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a + J_\mu^a A_\mu^a \right] d\mathbf{r}, \quad (71)$$

где

$$D_i s^a = \partial_i s^a + g \varepsilon^{abc} A_i^b s^c, \quad (72)$$

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g \varepsilon^{abc} A_\mu^b A_\nu^c. \quad (73)$$

Раскладывая параметр порядка, $\mathbf{s}$, около выделенного вакуумного состояния, например $\langle \mathbf{s} \rangle_0 = (0, 0, i\mu/\sqrt{2v})$, по малому отклонению $\phi = s - i\mu/\sqrt{2v}$, и используя калибровочные преобразования можно переписать (71) в виде действия, содержащего два массивных векторных бозона, A_μ^κ ($\kappa = \{1, 2\}$), с массой $M_0 = ig\mu/\sqrt{2v}$, один безмассовый векторный бозон, A_μ^3 , и скалярное поле, ϕ :

$$S = \int \left[\frac{1}{2} (\partial_\mu \phi)^2 + 2\mu^2 \phi^2 + \frac{g^2 \mu^2}{4v} A_\mu^\kappa A_\mu^\kappa + \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a + v\phi^4 + \frac{g^2}{2} \phi^2 A_\mu^a A_\mu^a + J_\mu^a A_\mu^a \right] d\mathbf{r}. \quad (74)$$

Способ введения фрустрирующего систему беспорядка очень важен и играет ключевую роль. В [131], например, калибровочное поле является свободным, и замороженный беспорядок в системе отсутствует. В [130] и [124] беспорядок ассоциируется непосредственно с замороженным калибровочным полем, и поле A_μ^a заморожено в произвольной конфигурации, описываемой некоторой функцией распределения $P(A_\mu^a)$.

Эти конфигурации описывают неоднородность структуры в общем, но не отражают непосредственно существование фрустраций. Таким образом, все приведённые подходы не учитывают должным образом влияние фрустраций. Однако, именно фрустрации, являющиеся источниками калибровочного поля, определяют стекольные свойства системы. Поэтому, в отличие от [130, 124], будем полагать, что не калибровочное поле A , а случайное поле его источников, J , вносит фрустрирующий беспорядок в систему.

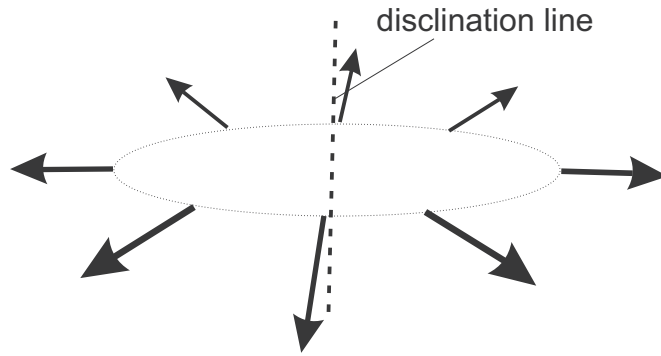


Рис. 31: Фрустрация делает спины неколлинеарными. В непрерывную модель фрустрацию можно ввести с помощью топологического дефекта – дисклинации, искривляющего пространство так, что локальная равновесная конфигурация спинов содержит полный поворот их направления при обходе по замкнутому контуру вокруг этой дисклинации. Наличие в системе таких дефектов вырождает её основное коллинеарное состояние.

Присутствие внешних источников в функции Лагранжа нарушает калибровочную симметрию. J_μ^a — случайное поле, поскольку мы рассматриваем систему со случайными фрустрациями. Для простоты, предположим, что $\langle \mathbf{J}\mathbf{J} \rangle_k = I_0$, где I_0 — интенсивность беспорядка. Следует отметить, что в этом случае фрустраций не заморожены, и поле источников является свободным. Усреднение по $\mathbf{J}$ приводит к допол-

нительному вкладу в “массу” поля A_μ^a , который имеет следующий вид:

$$M^2 = -I_0 + M_0^2 = -I_0 + \mu^2 g^2 / 4v. \quad (75)$$

Таким образом, присутствие в системе случайных фрустраций приводит к перенормировке массы калибровочного поля.

В свою очередь перенормировка массы калибровочного поля влияет на критическое поведение системы, поскольку теперь сингулярность $M^2 = 0$ сдвигается по температуре в область выше температуры перехода парамагнетик-ферромагнетик, T_c . Если положить, что $\mu^2 = \alpha(T - T_c)$, где α — константа, тогда мы имеем критическую расходимость времени релаксации при $T_g = T_c + 4I_0 v / \alpha g^2$ ($M^2 = \alpha g^2 (T - T_g) / 4v$) в парамагнитной фазе, что соответствует критическому замедлению флуктуаций фрустрациями. Таким образом фрустрации ограничивают рост корреляционной длины параметра порядка, и система замерзает в разупорядоченном состоянии, что согласуется с описанием стекольного перехода в ТОФФ.

5.3 Исследование неравновесной динамики модели

Исследуем динамику рассматриваемой системы и её восприимчивость вблизи T_g . Для этого сначала опишем неравновесную динамику системы вблизи критической точки. Используя функциональную технику описания неравновесной динамики [86] можно представить статистическую сумму системы в виде:

$$Z = \int \exp(-S^*) D\vec{\phi} D\vec{A}_\mu^a, \quad (76)$$

где

$$\begin{aligned}
S^* = \frac{1}{2} \int & \left[\vec{\phi}(t, \mathbf{r}) \hat{G}^{-1}(t - t', \mathbf{r} - \mathbf{r}') \vec{\phi}(t', \mathbf{r}') \right. \\
& + \vec{A}_\mu^a(t, \mathbf{r}) \hat{\Delta}_{\mu\nu}^{-1}(t - t', \mathbf{r} - \mathbf{r}') \vec{A}_\nu^a(t', \mathbf{r}') \Big] d\mathbf{r} d\mathbf{r}' dt dt' \\
& + \int \left[g \varepsilon^{abc} (\partial_\mu \bar{A}_\nu^a) A_\mu^b A_\nu^c + g \varepsilon^{abc} (\partial_\mu A_\nu^a) \bar{A}_\mu^b A_\nu^c \right. \\
& + g \varepsilon^{abc} (\partial_\mu A_\nu^a) A_\mu^b \bar{A}_\nu^c + g^2 \varepsilon^{abc} \varepsilon^{aij} \bar{A}_\mu^b A_\nu^c A_\mu^i A_\nu^j \\
& \left. + g^2 \bar{A}_\mu^a A_\mu^a \phi^2 + g^2 (A_\mu^a)^2 \bar{\phi} \phi + v 4 \bar{\phi} \phi^3 \right] d\mathbf{r} dt, \quad (77)
\end{aligned}$$

$\vec{\phi} = \{\bar{\phi}, \phi\}$, и $\vec{A}_\mu^a = \{\bar{A}_\mu^a, A_\mu^a\}$ — векторы, компоненты которых именуются, соответственно, “квантовой” и “классической” [86].

Отметим, что в отличие от теории Янга-Миллса в данном случае нет необходимости введения дополнительных духовых полей, поскольку калибровочная симметрия нарушена и калибровочное поле является массивным. Все функции Грина теории хорошо определены по той же причине. Компоненты матрицы функции Грина скалярного поля параметра порядка имеют вид:

$$G^{R(A)}(k, \omega) = \frac{1}{k^2 + \mu^2 \pm i\Gamma_\phi \omega}, \quad (78)$$

$$G^K(k, \omega) = \frac{2\Gamma_\phi}{(k^2 + \mu^2)^2 + \Gamma_\phi^2 \omega^2}, \quad (79)$$

где Γ_ϕ — кинетический коэффициент, соответствующий параметру порядка. Компоненты функции Грина массивного калибровочного поля имеют вид:

$$\Delta_{\mu\nu}^{R(A)}(k, \omega) = \frac{\delta_{\mu\nu}}{k^2 + M^2 \pm i\Gamma_A \omega}, \quad (80)$$

$$\Delta_{\mu\nu}^K(k, \omega) = \frac{2\Gamma_A \delta_{\mu\nu}}{(k^2 + M^2)^2 + \Gamma_A^2 \omega^2}, \quad (81)$$

где Γ_A кинетический коэффициент, соответствующий калибровочному полю. Их графическое представление приведено на Рис. 32

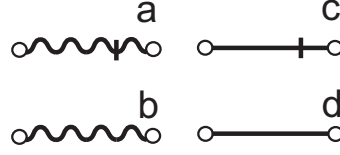


Рис. 32: а) — запаздывающая часть функции Грина поля $A_{\mu\nu}$, $\Delta_{\mu\nu}^R$; б) — келдышевская часть этой функции Грина, $\Delta_{\mu\nu}^K$; в) — запаздывающая часть функции Грина скалярного поля ϕ , G^R ; г) — келдышевская часть этой функции, G^K .

5.4 Ренормализационная группа

Диаграммы с нечётной степенью импульса в петле обращаются в 0 при интегрировании по импульсу.

Ниже мы выберем единицы измерения таким образом, чтобы $k_B T_g = 1$. Канонические размерности полей и параметров модели определяются из условия безразмерности действия в (76), они приведены в таблице

F	k	ω	ϕ	$\bar{\phi}$	A	$\bar{A}$
$d_k[F]$	1	0	$-1 - \frac{d_k}{2}$	$-1 - \frac{d_k}{2}$	$-1 - \frac{d_k}{2}$	$-1 - \frac{d_k}{2}$
$d_\omega[F]$	0	1	-1	0	-1	0
$d[F]$	1	$z = 2$	$-3 - \frac{d_k}{2}$	$-1 - \frac{d_k}{2}$	$-3 - \frac{d_k}{2}$	$-1 - \frac{d_k}{2}$

F	g	v	Γ_A	Γ_ϕ	μ^2	M^2
$d_k[F]$	0	0	$d_k - 2$	$d_k - 2$	$d_k - 2$	$d_k - 2$
$d_\omega[F]$	0	0	-1	-1	0	0
$d[F]$	0	0	$d_k - 4$	$d_k - 4$	$d_k - 2$	$d_k - 2$

Константы перенормировки членов эффективного действия имеют следующий вид: $Z_1 = Z_{\bar{\phi}} Z_\phi$, $Z_2 = Z_{\Gamma_\phi} Z_{\bar{\phi}} Z_\phi$, $Z_3 = Z_{\bar{A}} Z_A$, $Z_4 = Z_{\Gamma_A} Z_{\bar{A}} Z_A$,

$Z_5 = Z_g Z_{\bar{A}} Z_A^2$, $Z_6 = Z_g^2 Z_{\bar{A}} Z_A^3$, $Z_7 = Z_g^2 Z_{\bar{A}} Z_A Z_\phi^2$, $Z_8 = Z_g^2 Z_A^2 Z_{\bar{\phi}} Z_\phi$, $Z_9 = Z_v Z_{\bar{\phi}} Z_\phi^3$. Поэтому перенормировка параметров модели представляется следующим образом:

$$\begin{aligned}
\mu^{2(R)} &= Z_1 \lambda^{d+z} = \lambda^{d+2-3-d/2-1-d/2} Z_{\mu^2} = \lambda^{-2} Z_{\mu^2}, \\
\Gamma_\phi^{(R)} &= Z_2 \lambda^{d+z} = \lambda^{d+2-2(1+d/2)} Z_{\Gamma_\phi} = Z_{\Gamma_\phi}, \\
M^{2(R)} &= Z_3 \lambda^{d+z} = \lambda^{d+2-3-d/2-1-d/2} Z_{M^2} = \lambda^{-2} Z_{M^2}, \\
\Gamma_A^{(R)} &= Z_4 \lambda^{d+z} = \lambda^{d+2-2(1+d/2)} Z_{\Gamma_A} = \lambda^\varepsilon Z_{\Gamma_A}, \\
g^{(R)} &= Z_5 \lambda^{2d+2z+1} = \lambda^{2d+5-2(3+d/2)-(1+d/2)} Z_g = \lambda^{-\varepsilon/2} Z_g, \\
g^{2(R)} &= Z_6 \lambda^{3d+3z} = \lambda^{3d+6-3(3+d/2)-(1+d/2)} Z_g^2 = \lambda^{-\varepsilon} Z_{g^2}, \\
g^{2(R)} &= Z_7 \lambda^{3d+3z} = \lambda^{3d+6-3(3+d/2)-(1+d/2)} Z_g^2 = \lambda^{-\varepsilon} Z_{g^2}, \\
g^{2(R)} &= Z_8 \lambda^{3d+3z} = \lambda^{3d+6-3(3+d/2)-(1+d/2)} Z_g^2 = \lambda^{-\varepsilon} Z_{g^2}, \\
v^{(R)} &= Z_9 \lambda^{3d+3z} = \lambda^{3d+6-3(3+d/2)-(1+d/2)} Z_v = \lambda^{-\varepsilon} Z_v.
\end{aligned}$$

Вблизи $M^2 = 0$ ($T \gtrsim T_g$) калибровочное поле становится “безмассовым”, при этом скалярное поле остаётся массивным с $\mu^2 = 4I_0 v / g^2$. Поэтому, вклад в перенормировку дают только петли пропагаторов калибровочного поля. Согласно теореме о разделении массивного поля [133] фейнмановские диаграммы, содержащие пропагаторы поля, масса которого значительно превышает внешний импульс, обратно пропорциональны степени этой массы и дают конечный вклад в перенормировку. На рис. 33 приведены некоторые графы, дающие логарифмически расходящийся вклад в перенормируемую теорию. Несложно проверить, что вблизи T_g рассматриваемая теория будет перенормируемой, поскольку логарифмически расходящиеся поправки входят только в перенормировку существующих членов Лагранжиана.

Рассмотрим в качестве примера некоторые детали перенормировки

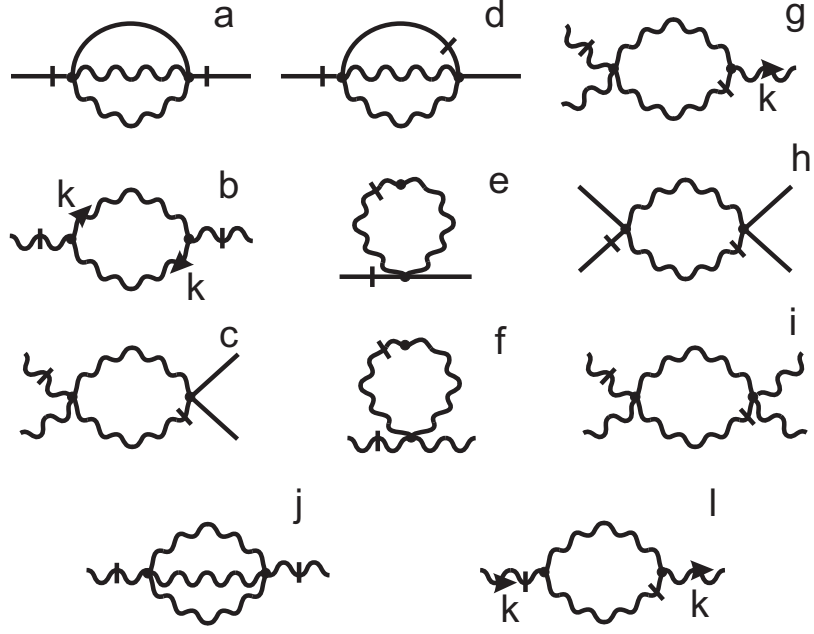


Рис. 33: Однопетлевые вклады в перенормировку членов лагранжиана.

параметра M^2 . Ограничимся для этого однопетлевым приближением, которого оказывается вполне достаточно для демонстрации процедуры ренормировки параметров. В этом случае константа перенормировки параметра M^2 имеет вид:

$$\begin{aligned}
Z_{M^2} \delta_{\mu\nu} &\simeq M^2 \delta_{\mu\nu} \\
&- \frac{6M^2 g^2}{(2\pi)^{d_k+1}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{\Lambda k_0}^{k_0} \Delta_{\mu}^R(k, \omega) \Delta_{\lambda\nu}^K(k, \omega) d\mathbf{k} d\omega \\
&\simeq M^2 \delta_{\mu\nu} - \frac{12M^2 g^2}{(2\pi)^{d_k+1}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{\Lambda k_0}^{k_0} \frac{d_k \pi^{d_k/2}}{\Gamma(1 + d_k/2)} \frac{\delta_{\mu\nu} k^{d_k-1}}{(k^4 + \omega^2)(k^2 + i\omega)} dk d\omega = \\
&= M^2 \delta_{\mu\nu} - \frac{3M^2 g^2}{(2\pi)^{d_k}} \frac{\delta_{\mu\nu} d_k \pi^{d_k/2}}{\Gamma(1 + d_k/2)} \int_{\Lambda k_0}^{k_0} \frac{k^{d_k-1}}{k^4} dk.
\end{aligned}$$

Можно видеть, что интеграл в этом выражении приводит к логариф-

мически расходящемуся вкладу в перенормировку M^2 при критической размерности $d_k = 4$. В этом случае выражение для перенормированного значения величины M^2 имеет вид:

$$M^{2(R)} = e^{2\xi} Z_{M^2} \simeq e^{2\xi} \left[M^2 - 3 \frac{M^2 g^2}{8\pi^2} \xi \right],$$

где $\xi = \ln(1/\Lambda)$ — логарифмически расходящийся множитель. Аналогично можно вычислить и другие члены перенормированного действия:

$$\begin{aligned} \mu^{2(R)} &= e^{2\xi} Z_{\mu^2} \simeq e^{2\xi} \left[\mu^2 - \frac{M^2 g^2}{8\pi^2} \xi \right], \\ \Gamma_A^{(R)} &= e^{-\varepsilon\xi} Z_{\Gamma_A} \simeq e^{-\varepsilon\xi} \left[\Gamma_A + 3 \frac{\Gamma_A g^4}{4\pi^2} \xi + \frac{\Gamma_A g^2}{8\pi^2} \xi \right], \\ g^{(R)} &= e^{\varepsilon\xi/2} Z_g \simeq e^{\varepsilon\xi/2} \left[g - \frac{g^4}{8\pi^2} \xi \right], \\ g^{2(R)} &= e^{\varepsilon\xi} Z_{g^2} \simeq e^{\varepsilon\xi} \left[g^2 - \frac{g^4}{4\pi^2} \xi \right], \\ v^{(R)} &= e^{\varepsilon\xi} Z_v \simeq e^{\varepsilon\xi} \left[v - \frac{g^4}{8\pi^2} \xi \right], \end{aligned}$$

где $\varepsilon = 4 - d_k$.

Раскладывая уравнения ренормгруппы по малому параметру $\xi = \ln(1/\lambda)$, в первом порядке по ξ получаем:

$$\begin{aligned} \mu^{2(R)} &= e^{2\xi} Z_{\mu^2} = \mu^2 + 2\xi - \frac{M^2 g^2}{8\pi^2} \xi, \\ M^{2(R)} &= e^{2\xi} Z_{M^2} = M^2 + 2\xi - 3 \frac{M^2 g^2}{8\pi^2} \xi, \\ \Gamma_A^{(R)} &= e^{-\varepsilon\xi} Z_{\Gamma_A} = \Gamma_A - \varepsilon\xi + 3 \frac{\Gamma_A g^4}{4\pi^2} \xi + \frac{\Gamma_A g^2}{8\pi^2} \xi, \\ g^{(R)} &= e^{\varepsilon\xi/2} Z_g = g + \varepsilon\xi/2 - \frac{g^3}{8\pi^2} \xi, \end{aligned}$$

$$g^{2(R)} = e^{\varepsilon\xi} Z_{g^2} = g^2 + \varepsilon\xi - \frac{g^4}{4\pi^2}\xi,$$

$$v^{(R)} = e^{\varepsilon\xi} Z_v = v + \varepsilon\xi - \frac{g^4}{8\pi^2}\xi.$$

Взаимодействие флуктуаций параметра порядка с калибровочным полем играет ключевую роль в рассматриваемой теории (см. рис. 34).

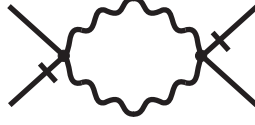


Рис. 34: Однопетлевая диаграмма, дающая нетривиальный вклад в перенормировку.

Рассмотрим вклад в перенормировку вершины Γ_ϕ диаграммы (a), которая представлена на рис. 33. Этот вклад интересен тем, что вершина Γ_ϕ пропорциональна времени релаксации параметра порядка, и определяет кинетику стекольного перехода: Петля лёгкого поля, A_μ^a , которая представлена на рис. 34, вносит логарифмически расходящийся вклад $\sim \ln(1/\Lambda)\delta(\omega)$, где Λ — параметр регуляризации (обрезание импульса). Эта диаграмма определяет расходящийся вклад диаграммы a (рис. 33), в котором петля массивного поля приводит только к умножению на множитель $4I_0v/g^2$:

$$\begin{aligned} \Sigma &\approx \frac{8g^2 I_0 v 4 \ln(1/\Lambda)}{8\pi^2} \int_0^{t_o} e^{-4I_0 v |t|/\Gamma_\phi g^2} dt = \\ &= \Gamma_\phi \frac{8g^4 \ln(1/\Lambda)}{8\pi^2} (1 - e^{-4I_0 v |t_o|/\Gamma_\phi g^2}), \quad (82) \end{aligned}$$

где t_o — время наблюдения за системой. Можно видеть, что для $I_0 \rightarrow 0$, или для малых времён наблюдения, $\Gamma_\phi g^2/4I_0 v \gg t_o$, этот вклад становится пренебрежимо малым, и теория становится неперенормируе-

мой. Это связано с симметрийнными свойствами модели Янга-Миллса. В этом случае флуктуационно-диссипативная теорема (ФДТ) нарушена, поскольку в возможен свободный обмен энергии между модами поля параметра порядка и безмассового калибровочного поля (голдстоуновской моды). Тем не менее, трудности остаются и в случае присутствия замороженного беспорядка: эта вершина становится нелокальной по времени, что нарушает корректность ренормгруппы. Для решения этой проблемы разделим временное пространство системы на две области: когда $t_o \ll \Gamma_\phi g^2/4I_0v$ этот вклад пренебрежимо мал; но при $t_o \gg \Gamma_\phi g^2/4I_0v$ эта диаграмма вносит логарифмически расходящийся вклад в перенормировку Γ_ϕ . Таким образом в однопетлевом приближении ренормализационная группа имеет вид (полагали, что интеграл равен $\frac{1}{8\pi^2} \ln(1/\Lambda)$):

$$\begin{cases} \frac{\partial \ln(\Gamma_\phi)}{\partial \xi} = g^4/\pi^2 & \text{при } t_o \gg \Gamma_\phi g^2/4I_0v, \\ \frac{\partial \ln(\Gamma_\phi)}{\partial \xi} = 0 & \text{при } t_o \ll \Gamma_\phi g^2/4I_0v, \end{cases}$$

$$\frac{\partial \ln(\Gamma_A)}{\partial \xi} = 3g^4/4\pi^2 + g^2/8\pi^2,$$

$$\frac{\partial \ln(M^2)}{\partial \xi} = 2 - 3g^2/8\pi^2,$$

$$\frac{\partial \ln(\mu^2)}{\partial \xi} = 2 - \frac{M^2 g^2}{8\mu^2 \pi^2} \approx 2,$$

$$\frac{\partial \ln(g^2)}{\partial \xi} = \varepsilon - g^2/4\pi^2,$$

$$\frac{\partial \ln v}{\partial \xi} = \varepsilon - g^4/8v\pi^2.$$

где $\xi = \ln(1/\Lambda)$, $\varepsilon = 4 - d$. Из условия существования неподвижной

точки, $\frac{\partial \ln g^2}{\partial \xi} = 0$, $\frac{\partial \ln v}{\partial \xi} = 0$, мы получаем $g^2 = 4\pi^2\varepsilon$, $v = g^2/2$. Фактически, такой вид ренормализационной группы учитывает нарушение ФДТ на малых временных масштабах, и представляется естественным для квазиэргодических систем.

Общее, не зависящее от масштаба, решение данной ренормгруппы можно представить в виде сшивки двух решений, соответствующих предельным случаям. Для этого определим сшивающую эти решения функцию, $\Phi(\xi)$, аналогично тому, как это сделано в [101, 134]:

$$\frac{\partial \ln(\Gamma_\phi)}{\partial \xi} = g^4 \Phi(\xi) / \pi^2,$$

где $\xi \sim 1$. Сшивающая функция, которая даёт 1 на больших временных масштабах, $\xi \gg 1$, и 0 — на малых, $\xi \ll 1$, может быть выбрана в виде:

$$\Phi(\xi) = 1 - \Lambda^z = 1 - \exp(-z\xi),$$

где $z \approx 2$ — динамический индекс [84, 89]. В результате получаем

$$\tau_{rel} = \Gamma_\phi \propto \exp\left(\frac{2vg^2T_g}{\alpha\pi^2(T - T_g)}\right). \quad (83)$$

Таким образом, при T_g происходит критическое замедление всех релаксационных процессов, удовлетворяющее соотношению Фогеля-Фулчера-Таммана.

5.5 Нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ)

Важным признаком стекольного перехода является потеря эргодичности системы в точке перехода, что приводит к нарушению условий выполнения флуктуационно-диссипативной теоремы. Зависимость полу-

ченной выше ренормализационной группы от масштаба времени приводит к нарушению ФДТ на малых временных масштабах: В случае $t_o \ll \Gamma_\phi g^2/4I_0v$ келдышевская часть пропагатора становится несущественной в критической области, $G^K \rightarrow 0$, что нарушает соотношение

$$G^K(\omega) = \frac{T}{i\omega} \{G^R(\omega) - G^A(\omega)\}, \quad (84)$$

соответствующее в технике Келдыша флуктуационно–диссипативной теореме [86]. На временах, превышающих $t_o = \Gamma_\phi g^2/4I_0v$, система становится фактически равновесной, и ФДТ выполняется для всех $t > t_o$. Таким образом $\Gamma_\phi g^2/4I_0v$ — характерный масштаб временной однородности системы.

Поскольку ренормгруппа подразумевает динамическое самоподобие системы при преобразовании масштабов, эта временная неоднородность существует на всех масштабах, и иерархия времён t_o представляет собой ультраметрический набор. Это ведёт к нарушению эргодичности в пространстве состояний, которое происходит при T_g : При температурах, близких к T_g геометрия области фазового пространства, доступного для системы в данный момент времени, становится всё более и более сложной, в результате система замедляется и не может достичь равновесного состояния за конечное (наблюдаемое) время. Однако, она не остаётся постоянно запертой в конечной области, в которой она находится в локальном равновесии.

Такой сценарий нарушения эргодичности соответствует сценарию слабого нарушения эргодичности (“weak ergodicity breaking”) [135], в котором фазовое пространство стеклующейся системы состоит из ло-

вушек (“traps”), разделённых конечными барьерами, и описываемых широкой функцией распределения по временам жизни.

5.6 Оценка линейного и нелинейного вклада в восприимчивость

Из (78) следует, что восприимчивость, $\chi_L = \partial\langle\phi\rangle/\partial h \sim \mu^{-2} = g^2/4I_0v$ (h — внешний источник поля ϕ), конечна при T_g . Корреляционная длина, $r_{cor} \sim \sqrt{g^2/4I_0v}$, также конечна. В то же время, существует нелинейный вклад в восприимчивость,

$\chi_N = \partial^3\langle\phi\rangle/\partial h^3$ [4], который вблизи T_g расходится: Несложно проверить, что нелинейная часть восприимчивости (см рис. 35) содержит расходящиеся вклады. Простейший среди них соответствует диаграмме h на рис. 33, он пропорционален $(e^\xi)^{-3!/(2+3\varepsilon/8)}$. Таким образом, в однопетлевом приближении, можно записать следующую оценку: $\chi_N \propto (T - T_g)^{-\gamma}$ для $T \rightarrow T_g^+$, где $2.5 \lesssim \gamma < 3$, что хорошо согласуется с экспериментальными данными [4]. Отсюда можно заключить, что система замерзает в состоянии с неупорядоченной структурой поля параметра порядка, и T_g представляет собой *температуру стеклования*.

$$\chi_N = \dots + 3! \text{ (diagram with wavy loop) } + \dots$$

Рис. 35: Графическое представление нелинейной восприимчивости, $\chi_N = \langle\phi\bar{\phi}\bar{\phi}\bar{\phi}\rangle_{k=0}$ (в импульсном представлении все внешние импульсы $k = 0$)

Реальные эксперименты по исследованию восприимчивости спиновых стёкол проводятся в периодическом возбуждающем поле, характере

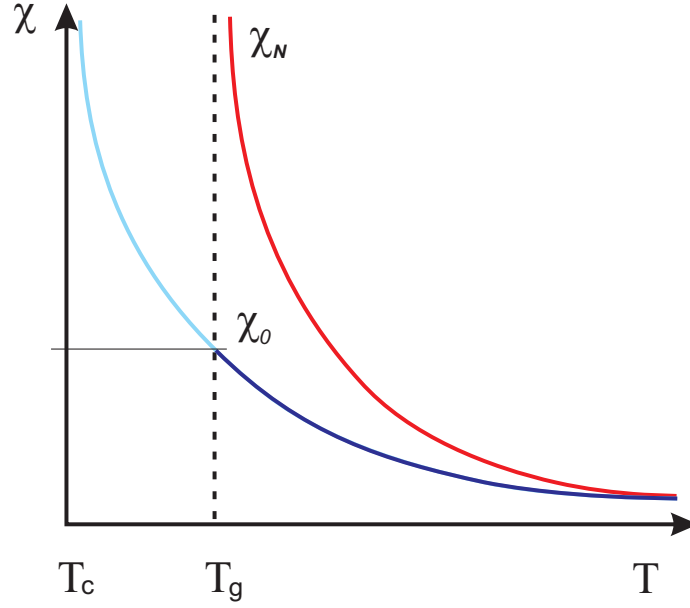


Рис. 36: Температурные зависимости нелинейного, $\chi_N \propto 1/(T - T_g)^\gamma$, и линейного, $\chi_L \propto 1/(T - T_c)$, вкладов в восприимчивость. Ход кривых в области $T < T_g$ не описывается рассматриваемой теорией

ризующимся некоторой частотой $\hat{\omega}$. В первой главе уже упоминалось, что в спиновых стёклах при высоких частотах возбуждающего поля, порядка сотен герц, восприимчивость довольно сильно зависит от частоты. Действительная часть восприимчивости ($\sim 5\%$) зависит от логарифма частоты (см. (1)). В нашем случае такое поведение восприимчивости можно объяснить зависящим от частоты внешнего поля сдвигом наблюдаемой на эксперименте температуры перехода $T_f(\hat{\omega}) < T_g$. Максимум восприимчивости фиксируется в случае, когда частота внешнего поля совпадает с величиной, обратной времени релаксации системы, $\hat{\omega} = 1/\tau_{rel}$. Используя (83) можно определить температуру, при которой будет достигнут этот максимум:

$$T_f(\hat{\omega}) = T_g - \frac{1}{\ln \hat{\omega} \tau_0} = T_c + 4I_0 v / \alpha g^2 - \frac{1}{\ln \hat{\omega} \tau_0},$$

где τ_0 — характерное время по величине равное обратному значению коэффициента диффузии. Отсюда, поскольку, согласно предлагаемой теории, температурная зависимость восприимчивости описывается выражением $\chi_L \propto (T - T_c)^{-1}$, соответствующая функция максимальной величины восприимчивости от частоты возмущающего поля будет

$$\chi_L(\hat{\omega}) \propto \frac{1}{T_f(\hat{\omega}) - T_c} = \frac{1}{4I_0 v / \alpha g^2 - 1 / \ln \hat{\omega} \tau_0} = \frac{-\ln \hat{\omega} \tau_0}{1 - (4I_0 v / \alpha g^2) \ln \hat{\omega} \tau_0}.$$

Из этого выражения следует, что на частотах, $\hat{\omega} \approx 0$, восприимчивость слабо зависит от частоты возбуждающего поля и $\chi(\hat{\omega}) \approx \chi_0$, однако на высоких частотах, $\hat{\omega} \sim 1/\tau_0$, зависимость восприимчивости от частоты становится заметной $\Delta\chi(\hat{\omega}) \propto -\ln \hat{\omega}$, что хорошо согласуется с экспериментом (1).

В заключение ещё раз отметим, что массовая щель калибровочного поля появляется в рассматриваемом случае не из-за спонтанного нарушения калибровочной симметрии, а индуцируется случайными источниками калибровочного поля, связанными с топологическими фрустрациями. Когда масса калибровочного поля становится малой, размер флуктуаций калибровочного поля становится соизмеримым с масштабом неоднородностей, вызванных фрустрациями. Появляется дополнительный вклад в энергию системы, пропорциональный количеству попадающих в упорядоченную область фрустраций. Это ограничивает рост флуктуации поля намагниченности, которые не могут расти больше некоторого характерного масштаба, что ведёт к критическому замедлению. Благодаря этому замедлению замораживается неупорядоченная структура поля параметра порядка с конечными

корреляционным радиусом и линейной восприимчивостью. При отсутствии замороженного беспорядка, $I_0 \rightarrow 0$, система претерпевает переход парамагнетик–ферромагнетик, и её критические свойства описываются стандартной критической динамикой [88]. В этом случае формально T_g совпадает с температурой фазового перехода, T_c , и масштаб упорядоченных доменов становится микроскопическим.

Отметим также то, что не только замороженный беспорядок может привести к появлению массовой щели в спектре калибровочного поля и, как следствие, стеклованию системы. К такому же результату приводят геометрические фрустрации, связанные с топологическими свойствами системы. Так, например, в модели дефектных состояний ориентационного порядка [117] появление массы калибровочного поля обусловлено суммарным топологическим зарядом, Q , определяющим кривизну гиперсферы, соответствующей локально предпочтительной тетраэдрической упаковке.

5.7 Теплоёмкость

Зная восприимчивость можно определить температурную зависимость теплоёмкости. Анализ проще проводить рассматривая корреляционные функции во импульсно-временном представлении. Учитывая, что $\langle \bar{\phi} \bar{\phi} \rangle = \langle \bar{A} \bar{A} \rangle = 0$, получаем:

$$c_p = \frac{dU}{dT} \approx -k_B \ln Z - \frac{k_B T}{Z} \frac{dZ}{dT} = -k_B \ln Z + \quad (85)$$

$$\begin{aligned}
& +Vk_B T \alpha g^2 / 4v \frac{\partial}{\partial T} \left[(T - T_g) \int_p \langle \bar{A} A \rangle_{t=0} \right] + \\
& +Vk_B T \alpha \frac{\partial}{\partial T} \left[(T - T_c) \int_p \langle \bar{\phi} \phi \rangle_{t=0} \right] + \\
& +Vk_B T \frac{\partial}{\partial T} \left[\int_p \langle \bar{\phi} \phi \rangle_{t=0} \int_p \langle A A \rangle_{t=0} + \int_p \langle \phi \phi \rangle_{t=0} \int_p \langle \bar{A} A \rangle_{t=0} + \right. \\
& \quad \left. + \int_p \langle \bar{\phi} \phi \rangle_{t=0} \int_p \langle \phi \phi \rangle_{t=0} \right], \tag{86}
\end{aligned}$$

где введено обозначение $\int_p(\dots) = \int_{-\infty}^{\infty}(\dots)d\mathbf{p}$. Поскольку при замораживании неупорядоченная структура вещества сохраняется, будем полагать, что Z слабо зависит от температуры при T_g , поэтому первое слагаемое будем считать некоторой константой. Из (78) и (80) несложно получить:

$$\langle \bar{\phi} \phi \rangle_t = \theta(t) \Gamma_{\varphi}^{-1}(T) e^{-t\varepsilon_p(m)/\Gamma_{\varphi}(T)},$$

$$\langle \phi \phi \rangle_t = \frac{1}{\varepsilon_p(m)} e^{-|t|\varepsilon_p(m)/\Gamma_{\varphi}(T)},$$

$$\langle \bar{A} A \rangle_t = \theta(t) \Gamma_A^{-1}(T) e^{-t\varepsilon_p(M)/\Gamma_A(T)},$$

$$\langle A A \rangle_t = \frac{1}{\varepsilon_p(M)} e^{-|t|\varepsilon_p(M)/\Gamma_A(T)},$$

откуда

$$\int_p \langle \bar{\phi} \phi \rangle_{t=0} = \frac{1}{V\Gamma_{\varphi}(T)}, \quad \int_p \langle \bar{A} A \rangle_{t=0} = \frac{1}{V\Gamma_A(T)},$$

и, в результате,

$$\begin{aligned}
c_p = & -k_B \ln Z + k_B T \alpha g^2 / 4v \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{(T - T_g)}{\Gamma_A(T)} \right] + \\
& + k_B T \alpha \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{(T - T_c)}{\Gamma_{\varphi}(T)} \right] + k_B T \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{1}{\Gamma_{\varphi}(T)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathbf{p}}{\varepsilon_p(M)} + \right. \\
& \left. + \frac{1}{\Gamma_A(T)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathbf{p}}{\varepsilon_p(m)} + \frac{1}{\Gamma_{\varphi}(T)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathbf{p}}{\varepsilon_p(m)} \right].
\end{aligned}$$

Из (5.4) следует, что в критической области $\Gamma_A(T)$ слабо зависит от температуры, поэтому будем полагать $\Gamma_A(T) \approx \Gamma_A = \text{const}$, в результате получаем

$$c_p = -k_B \ln Z + \frac{k_B T \alpha g^2}{4v\Gamma_A} + k_B T \alpha \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{(T - T_c)}{\Gamma_\varphi(T)} \right] + \\ + k_B T \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{1}{\Gamma_\varphi(T)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathbf{p}}{\varepsilon_p(M)} + \frac{1}{\Gamma_A} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathbf{p}}{\varepsilon_p(m)} + \frac{1}{\Gamma_\varphi(T)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathbf{p}}{\varepsilon_p(m)} \right].$$

Рассмотрим последний, четвёртый, вклад в теплоёмкость, в нём $\varepsilon_p(M) \ll \varepsilon_p(m)$, поэтому доминировать над другими будет первое слагаемое. По этим же причинам можно пренебречь третьим вкладом. Оставляя только наиболее существенный вклад, можно получить качественный вид температурной зависимости теплоёмкости:

$$c_p(T) \propto T \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{e^{-CT_g/(T-T_g)}}{(T - T_g)} \right] = \frac{T e^{-CT_g/(T-T_g)}}{(T - T_g)^3} [(C + 1)T_g - T].$$

График полученной зависимости приведён на рис. 37. На нём можно ви-

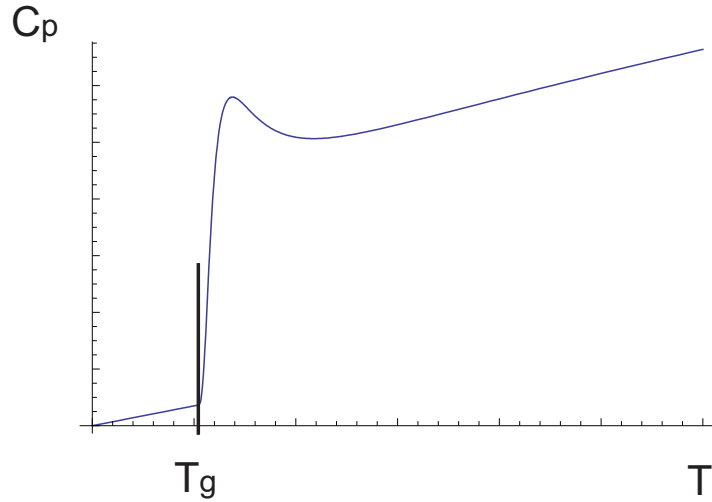


Рис. 37: Качественный вид температурной зависимости теплоёмкости вблизи T_g , полученной с помощью предложенной теории

дет характерное резкое повышение теплоёмкости при $T \gtrsim T_g$ спадающее в T_g , свойственное для стеклующихся систем. С помощью предложенной теории несложно дать простое качественное объяснение такой температурной зависимости теплоёмкости: система близка к T_c , при приближении к которой флуктуации растут, а следовательно, растёт и теплоёмкость; однако, поскольку “вмороженные” фрустрации не позволяют развиваться флуктуациям до размеров, превышающих некоторый определяемый ими конечный масштаб, теплоёмкость не расходится в T_g , а достигает лишь конечного максимума при $T_{\max} > T_g$, после которого убывает. Эта физическая картина аналогична картине фазового перехода в системе, ограниченной конечным объёмом.

5.8 Зависимость температуры стеклования, T_g^* , от скорости охлаждения, v

Предложенная теория, описывающая стекольный переход как критическое явление, позволяет объяснить широко известный и очень важный эффект зависимости значения температуры стеклования от скорости охлаждения, v . Обозначим через $T_g^*(v)$ температуру стеклования, фиксируемую на эксперименте при высокой скорости охлаждения. Из экспериментов известно, что эта температура повышается при повышении скорости закалки, причём эта зависимость носит логарифмический характер: $T_g^*(v) \propto 1/(C - \ln v)$.

Прежде всего напомним, что согласно нашим представлениям флуктуации имеют характерное время жизни, которое увеличивается с приближением температуры к T_g . Теперь рассмотрим, что будет проис-

ходить с флуктуациями, когда температура системы равномерно понижается от некоторого начального значения T_o со скоростью v К/с ($T(t) = T_o - vt$). Время релаксации флуктуаций в этом случае будет непрерывно расти. При некоторых значениях температуры и скорости охлаждения, скажем, в момент времени $t = t^*$, должна возникнуть ситуация, когда за малое время δt температура система понизится так, что время релаксации увеличится на ту же величину $\delta\tau = \delta t$. Это равносильно тому, что, начиная с данного момента, флуктуации фактически перестают затухать и при дальнейшем охлаждении быстро растут со временем, что можно интерпретировать как замерзание системы. Математически это состояние можно выразить с помощью простого равенства $d\tau/dt|_{t=t^*} = 1$. Поскольку $\tau(T)$ и $T(t)$ нам известны, несложно получить следующее равенство:

$$v = \frac{x^2 T_g}{\tau_0} \exp\left(-\frac{C}{x}\right), \quad \text{где} \quad x = \frac{[(T_o - T_g) - vt^*]}{T_K} = \frac{(T_g^*(v) - T_g)}{T_g},$$

прологарифмировав которое можно получить функцию зависимости температуры стеклования от скорости охлаждения системы:

$$T_g^*(v) = T_g + \frac{T_g C}{2 \ln x - \ln(v\tau_o/T_g)}.$$

При низких скоростях охлаждения, когда $v\tau_o \ll T_g$, и, соответственно, $x \ll C$, получаем

$$T_g^*(v) - T_g \approx \frac{T_g C}{\ln(T_g/v\tau_o)},$$

что хорошо согласуется с экспериментальными данными [15]. В случае высоких скоростей охлаждения, $v \rightarrow T_g/\tau_o$, приходим к

$$T_g^*(v) - T_g \approx (v\tau_o T_g)^{1/2}.$$

5.9 Корреляционная функция $\langle\phi\phi\rangle_t$ вблизи температуры стеклования

Вычислим временную корреляционную функцию $\langle\phi\phi\rangle_t$ вблизи температуры стеклования. Для этого также ограничимся “однопетлевым” приближением, и, используя (82), запишем:

$$\langle\phi\phi\rangle_t = \text{a} + \text{b} + \dots$$

Рис. 38: Графическое представление разложения корреляционной функции $\langle\phi\phi\rangle_t$ в однопетлевом приближении: а) — соответствует релаксации свободного поля намагниченности, б) — вклад, который содержит самодействие поля намагниченности посредством калибровочного поля.

$$\begin{aligned} \langle\phi\phi\rangle_{t,k=0} &\simeq G^K(t) \\ &- \frac{4g^2 I_0 v \xi}{\pi^2} \iint G^R(t_1) e^{-4I_0 v |t_2 - t_1| / \Gamma_\phi g^2} G^A(t - t_2) dt_1 dt_2 \\ &= G^K(t) + \frac{4g^2 I_0 v}{2\pi^2} \ln \left(\frac{T_g}{\alpha(T - T_g)} \right) \iint G^K(t_1) e^{-4I_0 v |t - t_1| / \Gamma_\phi g^2} dt_1. \end{aligned} \quad (87)$$

На рис. 39 приведён график полученной функции $\langle\phi\phi\rangle_t$, из которого можно видеть, что первый пик, который появляется благодаря первому слагаемому в (87), соответствует высокотемпературным свойствам системы, “не чувствующим” коллективных эффектов. Второй, широкий долговременный пик, описываемый вторым слагаемым в (87), соответствует кооперативным процессам, реализующимся вследствие самодействия поля намагниченности посредством индуцированного фрустрациями калибровочного поля. Естественно полагать, что этот пик

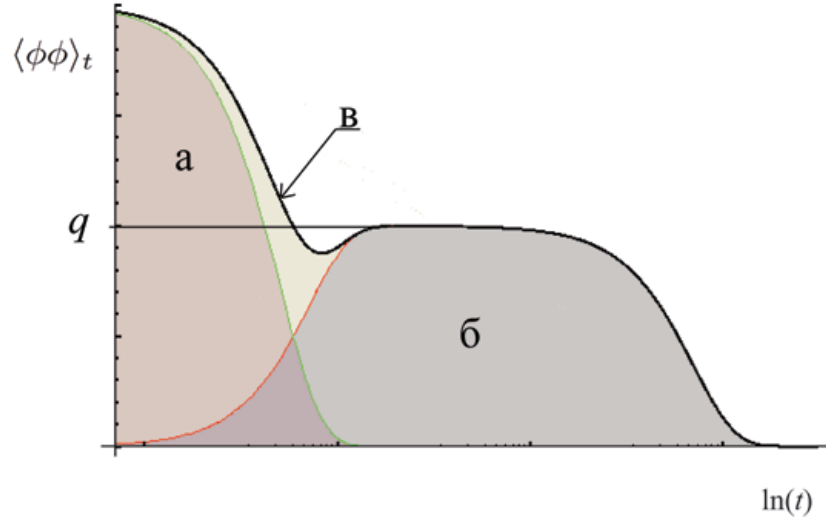


Рис. 39: Зависимость $\langle \phi \phi \rangle_t$ от $\ln(t)$: а) вклад от затравочной функции $\langle \phi \phi \rangle_t^0$; б) вклад от диаграммы б; в) сумма первого и второго вкладов

прямо связан с критическим замедлением, вызванным коллективизацией движения, и соответствует α -релаксации. Суперпозиция двух этих вкладов даёт результирующую корреляционную функцию, которая имеет вид, характерный для всех стеклующихся систем. Кроме того, полученная корреляционная функция может содержать характерный провал между основными пиками, который часто наблюдается в стеклующихся системах и называется “бозонным пиком”.

Из-за расходящегося в T_g времени релаксации Γ_ϕ по мере приближения T к T_g правая граница плато второго пика на графике сдвигается в сторону $t = \infty$, так, что при $T = T_g$ возникает стационарное состояние с ненулевым коррелятором $\langle \phi \phi \rangle_{k=0}$. Кроме того, по мере приближения температуры к температуре стеклования, T_g , высота второго пика растёт $\sim -\ln(T - T_g)$, что свидетельствует о появлении при $T = T_g$ спонтанной локальной намагниченности, а следовательно, и спонтан-

ного ненулевого параметра порядка Эдвардса-Андерсона,

$$q = \langle \phi \phi \rangle_{k=0} \simeq \frac{g^4 \ln(L/a_0)}{\mu^2 \pi^2}, \quad (88)$$

где L — линейный размер системы, а a_0 — межатомное расстояние.

5.10 Вывод уравнения теории связанных мод

В рамках предложенной теории несложно вывести уравнение теории связанных мод представлении Званжиги-Мори [136]. Для этого можно воспользоваться уравнениями Дайсона и ФДТ. Запишем уравнения Дайсона для G^A и G^R :

$$G^A = G_0^A + G_0^A \otimes D^A \otimes G^A, \quad (89)$$

$$G^R = G_0^R + G_0^R \otimes D^R \otimes G^R, \quad (90)$$

где символом $\otimes$ обозначена операция свертки, а

$$D^{A(R)}(t) = \theta(\pm t) \frac{g^4 \mu^2 \ln(L/a_0)}{\Gamma_\phi \pi^2} e^{\mp 4I_0 v t / \Gamma_\phi g^2} \quad (91)$$

— собственно-энергетическая часть. Подействуем на эти уравнения слева оператором $\hat{G}_0^{-1} = \Gamma_\phi \partial_t - \nabla^2 + \mu^2$:

$$\hat{G}_0^{-1} G^A = 1 + D^A \otimes G^A, \quad (92)$$

$$\hat{G}_0^{-1} G^R = 1 + D^R \otimes G^R, \quad (93)$$

после чего вычтем первое выражение из второго:

$$\hat{G}_0^{-1} (G^R - G^A) = D^R \otimes G^R - D^A \otimes G^A. \quad (94)$$

Рассмотрим подробнее правую часть последнего выражения, во втором слагаемом которого произведем замену переменной интегрирова-

ния ($t \rightarrow -t$):

$$\begin{aligned}
D^R \otimes G^R - D^A \otimes G^A &= \\
&= \theta(t) \int_0^t D^R(t') G^R(t - t') dt' - \theta(-t) \int_{-t}^0 D^A(t') G^A(t - t') dt' = \\
&= \theta(t) \int_0^t D^R(t') G^R(t - t') dt' + \theta(-t) \int_0^t D^A(-t') G^A(t + t') dt' = \\
&= \theta(t) \int_0^t D^R(|t'|) G^R(|t - t'|) dt' + \theta(-t) \int_0^t D^R(|-t'|) G^R(|t + t'|) dt' = \\
&= \int_0^t D^R(|t'|) G^R(|t - t'|) dt' = - \int_0^t D^R(|t'|) \partial_t G^K(t - t') dt'. \quad (95)
\end{aligned}$$

Отсюда, используя ФДТ, $G^R - G^A = T^{-1} \partial_t G^K$, получаем:

$$\partial_t^2 G^K(t) + \mu^2 \partial_t G^K(t) + T \int_0^t D(t') \partial_t G^K(t - t') dt' = 0, \quad (96)$$

где $D(t) = D^R(|t|)$. Полученное выражение представляет собой уравнение теории связанных мод, при $\mathbf{q} = 0$. Для того, чтобы получить стандартный вид этого уравнения, можно учесть независящий от времени (статический) вклад в функцию D (и в G^K):

$$D(t) \rightarrow D^*(t) = D(t) + \frac{1}{T} \Omega^2, \quad (97)$$

где Ω — микроскопическая частота, вычисляемая из структурного фактора, $S(q)$: $\Omega^2 = q^2 k_B T / (m S(q))$, m — масса частицы [136], тогда

$$\partial_t^2 G^K(t) + \Omega^2 G^K(t) + \mu^2 \partial_t G^K(t) + T \int_0^t D(t') \partial_t G^K(t - t') dt' = 0. \quad (98)$$

Таким образом, разность первого и второго уравнений, при условии выполнения ФДТ (84), даёт уравнение теории связанных мод.

Это важный результат, поскольку, как следует из (98), функция $D(t)$ является функцией памяти в уравнении теории связанных мод, и определение этой функции является ключевой проблемой теории. Предложенный же выше подход позволяет непосредственно определять аналитический вид функции памяти, зависящий только от параметров микроскопической модели.

5.11 Феноменологическая интерпретация калибровочной теории стекольного перехода

В качестве очень упрощённого объяснения полученной выше картины физического процесса стеклования приведём две интерпретации.

Прежде всего рассмотрим иллюстрацию, изображённую на рис. 40. При приближении температуры к T_c линейный масштаб упорядоченных областей растёт как $L \propto T/(T - T_c)$. Время жизни флуктуаций, определяющее скорость их роста, можно оценить как время релаксации активационного (гиббсовского) процесса: $\tau \propto \exp(\delta E/T)$, где δE — энергия активации, пропорциональное изменению энергии системы в процессе роста. Во время своего роста флуктуация поглощает фрустрации, что приводит к увеличению её энергии, δE , поскольку фрустрации противодействуют упорядочению. В неупорядоченной области свободно ориентирующихся спинов вдали от упорядоченных областей фрустрации не вносят заметного вклада в энергию системы. Но попадая в упорядоченную область фрустрация приводит к

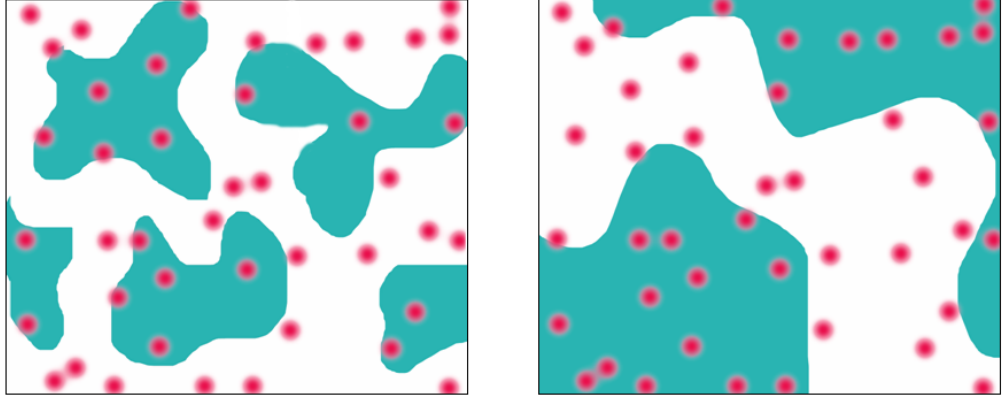


Рис. 40: Заштрихованные области обозначают упорядоченные области, возникающие в процессе флуктуаций параметра порядка, точки — топологические дефекты, фрустрирующие систему. При приближении температуры к T_c размер флуктуаций растёт, а оказавшиеся в упорядоченной области дефекты увеличивают необходимую для образования этой флуктуации энергию.

резкому повышению энергии системы, причём из-за дальнего действия характера взаимодействия между дефектами эффективная область упорядочения имеет масштаб, характерная величина которого, L^* , больший чем L , но растёт при уменьшении температуры так же: $L^* \propto T/(T - T_g)$ ($T_g > T_c$). Приращение энергии пропорционально количеству поглощённых флуктуациями фрустраций, следовательно, $\delta E \propto L^{*2} \propto T/(T - T_g)$, откуда $\tau \propto \exp(\text{const}/(T - T_g))$.

Альтернативная интерпретация созвучна популярному подходу, связывающему стекольный переход с возникновением в системе перколяционного кластера. Когда температура приближается T_g , корреляционный радиус калибровочного поля расходится, в то время как корреляционный радиус поля локальной намагниченности остаётся конечным. Бесконечная корреляция калибровочного поля означает, что

относительные повороты векторов намагниченности коррелированы на бесконечно большом расстоянии. В этом случае дальнейший рост флуктуаций намагниченности становится невозможным, поскольку вектора локальной намагниченности не могут поворачиваться независимо друг от друга. Исходя из результатов изложенной теории несложно объяснить почему рост корреляционной длины калибровочного поля растёт быстрее корреляционного радиуса локальной намагниченности: В отсутствие фрустраций калибровочные радиусы обоих полей растут одинаково. Опережающий рост флуктуаций калибровочного поля становится возможным в присутствии фрустраций в структуре. Причина этого в том, что эти флуктуации развиваются вокруг этих фрустраций, являющихся источниками калибровочного поля. В случае ненулевой концентрации этих статических источников флуктуации вокруг них могут перекрываться и образовывать кластеры, что приводит к быстрому росту эффективной корреляционной длины калибровочного поля. При некоторой концентрации этих источников и соответствующем корреляционном радиусе поля локальной намагниченности это приводит к формированию перколяционного кластера, связывающего эти источники. Таким образом, эффективная корреляционная длина калибровочного поля становится бесконечно большой, относительные повороты становятся скоррелированными, а время релаксации системы расходится, в то время, как корреляционный радиус поля локальной намагниченности остаётся относительно небольшим. Поэтому система замерзает в неупорядоченном состоянии.

В зависимости от происхождения фрустрации можно разделить на

два типа: замороженные фрустрации и самообразующиеся фрустрации. Причиной первых являются внешние факторы: дефекты решётки, на которой, например, выстраивается спиновая система, случайное расположение атомов примесей, и т.д. Вторые появляются как топологические дефекты при понижении температуры, например, в жидкостях, у которых локально предпочтительная структура (ЛПС) отличается от локальной структуры термодинамически стабильного кристалла, в результате того, что ЛПС не может без разрывов замостить пространство. Влияние этих фрустраций на систему, в которой они находятся, в основном идентично, за исключением одного различия, связанного с подвижностью самообразующихся фрустраций. В том случае, когда подвижность самообразующихся фрустраций мала, их можно считать статическими, и ситуация не отличается от случая с замороженными фрустрациями, необходимо лишь определить количество самообразующихся фрустраций. В том же случае, когда фрустрации подвижны, требуется учитывать их движение при исследовании динамики системы. Однако, в настоящей работе подвижность фрустраций не принималась во внимание, поскольку для описания всех известных экспериментальных фактов оказалось достаточным рассмотреть лишь приближение статических фрустраций.

5.12 Выводы к главе 5

1. Предложен новый аналитический метод описания стекольного перехода трёхмерной модели Гейзенберга с замороженными фрустрациями, развивающий калибровочную модель стекольного перехода и основанный на методе теоретического описания критической динамики квази-неэргодических систем. Причиной стекольного перехода, согласно предложенной теории, является угнетение процесса упорядочения вследствие взаимодействия поля параметра порядка с калибровочным полем, описывающим индуцируемые равновесными геометрическими фрустрациями пластические деформации.
2. Показано, что стекольный переход происходит когда масса калибровочного поля становится равной нулю, при температуре T_g , превышающей предполагаемую температуру фазового перехода T_c в подсистеме поля параметра порядка. Главной проблемой при этом остаётся неавтономность реномгруппового уравнения, возникающая вследствие нарушения эргодичности описываемой системы на малых масштабах времени.
3. С помощью метода теоретического описания неравновесной динамики квази-неэргодических систем показано, что кинетика релаксации рассматриваемой системы вблизи стекольного перехода удовлетворяет закону Фогеля-Фулчера-Таммана, а параметр порядка Эдвардса-Андерсона испытывает в точке стекольного перехода скачок.

4. С помощью метода теоретического описания неравновесной динамики квази-неэргодических систем показано, что линейная составляющая восприимчивости рассматриваемой системы в точке стекольного перехода остаётся конечной, а нелинейная её часть расходится по степенному закону с показателем $2.5 \lesssim \gamma < 3$, что согласуется с известными экспериментальными данными.
5. С помощью метода теоретического описания неравновесной динамики квази-неэргодических систем получено аналитическое выражение для величины теплоёмкости рассматриваемой системы вблизи температуры стеклования, которое даёт хорошее качественное согласие с результатами экспериментальных исследований.
6. С помощью метода теоретического описания неравновесной динамики квази-неэргодических систем получено аналитическое выражение зависимости температуры стеклования от скорости охлаждения, которое при больших величинах скорости закалки хорошо согласуется с экспериментальными данными.
7. С помощью метода теоретического описания неравновесной динамики квази-неэргодических систем получен аналитический вид временной зависимости парной корреляционной функции параметра порядка, представляющий собой суперпозицию двух вкладов: вклада свободного поля параметра порядка, и вклада коллективного движения, вызванного самодействием поля параметра порядка посредством калибровочного поля.

Заключение

Научная новизна работы

В диссертационной работе предложены новые аналитические подходы, позволяющие дать последовательное описание стеклования квази-неэргодических конденсированных систем. Полученные результаты позволяют значительно продвинуться в понимании физической природы стекольного перехода. Они дают новый обобщающий взгляд на процессы, протекающие при стекольном переходе, и согласуются с экспериментальными данными. Все результаты диссертации являются новыми. Основные результаты заключаются в следующем:

Основные результаты

1. Предложен новый метод теоретического описания неравновесной динамики квази-неэргодических систем с помощью функциональных методов неравновесной динамики и априорного задания ступенчатой временной корреляционной функции случайных обменных интегралов, для учёта ультраметрической иерархии времён релаксации системы.
2. С помощью метода теоретического описания неравновесной динамики квази-неэргодических систем описана кинетика мягкой модели спинового стекла Эдвардса-Андерсона вблизи критической точки. Показано, что кинетика релаксации рассмотренной системы удовлетворяет закону Фогеля-Фулчера-Таммана.

3. Предложен новый теоретический подход к описанию стекольного перехода во фрустрированной конденсированной системе, в котором фрустрации рассматриваются в качестве источников калибровочного поля, описывающего пространственную неоднородность системы.
4. Исследована неравновесная динамика трёхмерной модели Гейзенберга со свободными случайными фрустрациями вблизи точки фазового перехода T_c . Показано, что при $T_g > T_c$, вследствие взаимодействия поля параметра порядка с массивным калибровочным полем, происходит критическое замедление роста флуктуаций поля параметра порядка, приводящее к замораживанию структуры в макроскопически неупорядоченном стеклоподобном состоянии.
5. Показано, что кинетика релаксации фрустрированной модели Гейзенберга вблизи стекольного перехода, T_g , удовлетворяет закону Фогеля-Фулчера-Таммана, линейная восприимчивость остаётся конечной, а нелинейная восприимчивость расходится по степенному закону с показателем γ , величина которого, $2.5 \leq \gamma < 3$, согласуется с экспериментальными данными.
6. Получен характерный для стекольных переходов аналитический вид зависимости корреляционной функции параметра порядка от температуры. Показано, что появление на этой зависимости плато происходит в результате суперпозиции вклада от свободного поля параметра порядка и “кооперативного” вклада от взаимодействия поля параметра порядка с калибровочным полем.

7. Показано, что уравнение теории связанных мод, в представлении Званжиги-Мори, описывающее динамику конденсированной системы вблизи стекольного перехода, может быть непосредственно получено из предложенной калибровочной теории стекольного перехода.

Положения, выносимые на защиту

На защиту выносятся:

1. Способ описания иерархии времён релаксации в модели квази-неэргодической конденсированной системы с помощью задания временной корреляционной функции случайного взаимодействия в виде тета-функции Хевисайда.
2. Ренормгрупповой метод описания критической динамики квази-неэргодической конденсированной системы, в котором ультраметричность пространства состояний системы задаётся с помощью сшивки систем ренормгрупповых уравнений, соответствующих большим и малым временным масштабам.
3. Теоретическое описание механизма нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в квази-неэргодической конденсированной системе.
4. Теоретическое представление фрустраций в калибровочной модели стекла Гейзенберга с помощью источников калибровочного поля.
5. Теоретическое описание стекольного перехода во фрустрированной модели трёхмерного гейзенберговского магнетика с использованием калибровочной теории с равновесными источниками калибровочного поля и ренормгруппового метода описания критической динамики квази-неэргодической системы.

Теоретическая и практическая ценность.

Работа носит теоретический характер. Предложенные в работе подходы дают возможность более последовательного, по сравнению с используемыми сегодня методами, аналитического описания стекольного перехода, что обуславливает её практическую значимость. Разработанные теоретические подходы могут быть использованы как для дальнейшего развития теории конденсированного вещества, так и для решения прикладных задач.

Апробация работы.

Результаты работы докладывались автором на следующих конференциях:

1. International Conference on Statistical Physics “SigmaPhi 2011”: Ларнака, Кипр, 11–15 июля 2011;
2. International Conference on Liquid and Amorphous Metals “LAM14”, Рим, Италия, 11–16 июля 2010;
3. 7-th Liquid Matter Conference, Лунд, Швеция 2008;
4. XXXII Международная зимняя школа физиков-теоретиков “Кояровка-2008”, Екатеринбург, Россия 2008;
5. Thirteenth international conference on liquid and amorphous metals “LAM13”, Екатеринбург, Россия 2007;
6. XXIII IUPAP International Conference on Statistical Physics (STAT-PHYS 23), Генуя, Италия, 9–13 июля, 2007;

7. Statistical Physics 2006 Condensed Matter: Theory and Applications, Харьков, Украина, 12–15 сентября, 2006;
8. 10-th International Conference on the Structure of Non-Crystalline Materials, Прага, Чешская республика, 18–22 сентября, 2006;
9. XXXI Международная зимняя школа физиков-теоретиков “Коуровка-2006”, Екатеринбург- Челябинск, Россия, Февраль 22–28, 2006;
10. 6-th Liquid Matter Conference of the European Physical Society, Утрехт, Нидерланды, 2–6 июля 2005;
11. “XI All-Russian Conference on Structure and Properties of Metal and Slag Alloys”, Yekaterinburg, Россия, 14–16 сентября, 2004;
12. International Conference on Liquid and Amorphous Metals “LAM12”, Мец, Франция, 11–16 июля, 2004;
13. Join ESRF-CECAM Workshop “Polymorphism in Liquid and Amorphous Matter”(POLIMAT), ESRF, Гренобль, Франция, 7–9 июля, 2004;
14. Statistical Physics of Complex Fluids (STATPHYS22 Satellite Meeting), Занжан, Иран, 27 июня– 1 июля, 2004;
15. International Workshop on Dynamics in Viscous Liquids, Мюнхен, Германия, 14–17 марта, 2004;
16. XXX Международная зимняя школа физиков-теоретиков “Коуровка-2004”, Екатеринбург- Челябинск, Россия, Февраль 22–28, 2004;

Публикации по теме диссертации

Основные результаты диссертации опубликованы в 19 работах (15 из них опубликованы в изданиях, рекомендованных ВАК):

1. Vasin M. G. Gauge theory of glass transition. // Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment. – 2011. – P. P05009;
2. Ладьянов В. И., Меньшикова С. Г., Васин М. Г., Бельтюков А. Л., Маслов В. В. О немонотонных релаксационных процессах в неравновесных нанообразующих расплавах Al-ПМ-РЗМ. // Известия РАН. Серия физическая. – 2011. – Т. 75. – № 11. – С. 1423–1426;
3. Васин М. Г., Щелкачёв Н. М., Винокур В. М. Новый подход к описанию кинетики стеклования // Теоретическая и Математическая Физика. – 2010. – Т. 163. – № 1. – С. 163–176;
4. Васин М. Г. О некоторых деталях описания неупорядоченной конденсированной системы с помощью теории дефектных состояний ориентационного порядка. // Теоретическая и Математическая Физика. – 2009. – Т. 161. – № 2. – С. 267–277;
5. Lad'yanov V. I., Bel'tyukov A. L., Shishmarin A. I., Vasin M. G., Maslov V. V., Nozenko V. K., Mashira V. A. Kinematical Viscosity of Glass-Forming Melts of System Fe-B-Si. // J. Non Cryst. Solids. – 2007. – V. 353. – P. 3264;
6. Vasin M.G. General approach to the description of the glass transition in terms of critical dynamics // Phys. Rev. B. – 2006. – V. 74. – P. 214116;

7. Vasin M.G. Description of glass transition in terms of critical dynamics
// Condensed Matter at the Leading Edge, editor - Das M.P. New-York, Nova Science Publishers, 2006, pp. 147–163, ISBN: 1-60021-022-8;
8. Васин М. Г. Описание перехода парамагнетик-спиновое стекло в модели Эдвардса-Андерсона методами критической динамики // Теоретическая и Математическая Физика. – 2006. – Т. 147. – № 2. С. 328–336;
9. Васин М. Г. Ренормгрупповой подход к описанию перехода жидкость–стекло в дисклинационной модели жидкости // Вестник УдГУ. – 2006. – № 4. – С. 41–58;
10. Васин М. Г., Стеколыщikov В. А., Ладьянов В. И. Полиморфные переходы в однокомпонентных жидкостях: часть II. Теоретическое описание // Вестник УдГУ. – 2006. – № 4. – С. 93–114;
11. Ладьянов В. И., Камаева Л. В., Васин М. Г., Корепанов А. Ю. О вязкости расплавов Ni-P в области малых концентраций фосфора // Расплавы. – 2006. – № 4. – С. 13–20;
12. Vasin M. G., and Lady'anov V. I. Description of Fisher clusters formation in supercooled liquids within framework of continual theory of defects // J. Phys.: Condensed Matter. – 2005. – V. 17. – P. S1287–S1292;
13. Васин М. Г., Ладьянов В. И. Полиморфные переходы в однокомпонентных жидкостях: Часть I. Экспериментальные данные // Вестник УдГУ. – 2005. – № 4. – С. 99–116;

14. Киммель А. В., Васин М. Г., Гусенков И. Н., Ладьянов В. И. Молекулярно-динамическое моделирование структурных и динамических свойств жидкой меди // Вестник ИжГТУ. – 2004. – № 4. С. 6–10;
15. Vasin M. G., Lad'yanov V. I. Structural transitions and non-monotonic relaxation processes in liquid metals // Phys. Rev. E. – 2003. – V. 68. – P. 5120;
16. Ладьянов В. И., Бельтюков А. Л., Камаева Л. В., Тронин К. Г., Васин М. Г. О структурном переходе и временной нестабильности в жидком кобальте // Расплавы. – 2003. – № 1. – С. 32–39;
17. Lad'yanov V. I., Vasin M. G., Logunov S. V., Bovin V. P. Nonmonotonic relaxation processes in nonequilibrium metal liquids // Phys. Rev. B. – 2000. – V. 62. – P. 12107–12112;
18. Васин М. Г., Ладьянов В. И., Бовин В. П. О механизме немонотонных релаксационных процессов в металлических расплавах // Металлы. – 2000. – № 5. – С. 27–32;
19. Васин М. Г., Ладьянов В. И., Бовин В. П. Статистическое моделирование процессов релаксации в расплавах с двумя конкурирующими типами ближнего порядка // Расплавы. – 1999. – № 3. С. 89–94.

Список литературы

- [1] Коренблит И. Я., Шендер Е. Ф. Спиновые стекла и неэргодичность // УФН. – 1989. – Т. 157. – С. 267–310;
- [2] Mulder C. A. M., van Duynveldt A. J., and Mydosh J. A. // Phys. Rev. B. – 1981. – V. 23, – P. 1384;
- [3] Chikazawa S., Taniguchi S., Matsuyama H., and Miyako Y. // J. Magn. Magn. Mater. – 1983. – V. 31–34. – P. 1355;
- [4] Binder K., Young A. P. // Reviews of Modern Physics. – 1986. – V. 58. – N. 4. – P. 801–976;
- [5] Aarts J., Felsch W., von Lohneysen H., Steglich F. // Z. Phys. Ser. B. – 1980. – V. 40. – P. 127–132;
- [6] Гинзбург С. Л., Необратимые явления в спиновых стёклах. – М.: Наука, 1989. – 152 с. ISBN 5-02-014156-9;
- [7] Alba C. A., Busse L. E. and Angell C. A. // J. Chem. Phys. – 1990. – V. 92. – P. 617;
- [8] Hcen H. S. and Turnbull D. // Appl. Phys. Letters. – 1967. – V. 10, – P. 284;
- [9] Easteal A. J., Wilder J. A., Mohr R. K. and Moynihan C. T. // J. Am. Ceram. Soc. – 1977. – V. 60. – P. 134;
- [10] Angell C. A. and Tucker J. C. // Glass forming molten salt systems, in Chemistry of Process Metallurgy, P. 207, – Richardson conference

(Imperial College of Science, London, 1973), Eds. J.H.E. Jeffes and R.J. Tait, Inst. Mining Metallurgy Publ. (1974);

- [11] Angell C. A. // Pure & Appl. Chem. – 1991. – V. 63. – N. 10. – P. 1387–1392;
- [12] Angell C. A., Williams E., Rao K. J., and Tucher J. C. // J. Phys. Chem. – 1977. – V. 81, – N. 3. – P. 238–243;
- [13] Cape J. N., Woodcock L. V. // J. Chem. Phys. – 1979. – V. 72. – P. 976;
- [14] Стишëв С. М. // УФН. – 1988. – Т. 154. – N. 1. – С. 93–122;
- [15] Bruning R. and Samwer K. // Phys. Rev. B. – 1992. – V. 46. – P. 11318–11322;
- [16] Angell C. A. // J. Non-Cryst. Solids. – 1988. – V. 102. – P. 205–221;
- [17] Cugliandolo L. F. / Dynamics of Glassy Systems // Slow relaxation and Nonequilibrium Dynamics, Les Houches Session LXXVII, NATO Advanced Study Institute. – 2002. – P. 371–521;
- [18] McKenna G. B. // Nature physics. – 2008. – V. 4. – P. 637–638;
- [19] Simon S. L., Sobiesky J. W., Plazek D. J. // Polymer. – 2001. – V. 42. – P. 2555–2567;
- [20] Debenedetti P. G. Metastable Liquids, Concepts and Principles. – Princeton Univ. Press, Princeton, 1996;

- [21] Debenedetti P. G., Stillinger F. N. // Nature. – 2001. – V. 410. – P. 259–267;
- [22] Binder K., Kob W. Glassy materials and disordered solids. – World Scientific Publishing, ISBN 981-256-520-8. – 2005;
- [23] Gibbs J. H., and Di Marzio E. A. // J. Chem. Phys. – 1958. – V. 51. – P. 3728–3739;
- [24] Adam G., Gibbs J. H. // J. Chem. Phys. – 1965. – V. 43. – P. 139–146;
- [25] Angell C. A. // J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. – 1997. – V. 102. – P. 171–185;
- [26] Yamamuro O., Tsukushi I., Lindqvist A., Takahara S., Ishikawa M., and Matsuro T. // J. Phys. Chem. B. – 1998. – V. 102. – P. 1605–1609;
- [27] Martinez L.-M., and Angell C. A. // Nature. – 2001. – V. 410. – P. 663–667;
- [28] Johari G. P. // J. Chem. Phys. – 2002. – V. 116. – P. 2043–2046;
- [29] Tanaka H. // Phys. Rev. Lett. – 2003. – V. 90. – P. 055701;
- [30] Palmer R. G. // Adv. Phys. – 1982. – V. 31. – P. 669;
- [31] Angell C. A. // Nature. – 1998. – V. 393. – P. 521;
- [32] Zürcher U. and Keyes T., in *Supercooled Liquids: Advances and Novel Applications*, J. Fourkas et al. Eds. (ACS Symposium Series 676, Washington, 1997). – P. 82;

- [33] Cohen M. H., and Turnbull D. // J. Chem. Phys. – 1959. – V. 31. – P. 1164–1169;
- [34] Doolittle A. K. // J. Appl. Phys. – 1951. – V. 22. – P. 1471–1475;
- [35] Dyre J. C. // Rev. Mod. Phys. – 2006. – V. 78. P. 953;
- [36] Tobolsky A., Powell R. E. and Eyring H., “Elastic-viscous properties of matter,” in *Frontes in Chemistry*, edited by R. E. Burk and O. Grummit // Interscience, New York. – 1943. – V. 1. – P. 125–190;
- [37] Granato A. V., Khonik V. A. // Phys. Rev. Lett. – 2004. – V. 93. – P. 155502;
- [38] Barrat J. L. and Klein M. L. // Annu. Rev. Phys. Chem. – 1991. – V. 42. – P. 23;
- [39] Hansen J. P. // Physica A. – 1993. – V. 201. – P. 138;
- [40] Götze W. and Sjögren L. // Rep. Prog. Phys. – 1992. – V. 55. – P. 241;
- [41] Das S. P. and Mazenko G. F. // Phys. Rev. A. – 1986. – V. 34. – P. 2265;
- [42] Bouchaud J. P., Cugliandolo L., Kurchan J., and Mezard M. // Physica A. – 1997. – V. 235. – P. 369;
- [43] Li G., Du W. M., Chen X. K., Cummins H. Z., and Tao N. J. // Phys. Rev. A. – 1992. – V. 45. – P. 3867;
- [44] Gibbs J. H. // J. Chem. Phys. – 1956. – V. 25. – P. 185;

- [45] Gibbs J. H. and Di Marzio E. A. // J. Chem. Phys. – 1958. – V. 28. – P. 373;
- [46] Adam G. and Gibbs J. H. // J. Chem. Phys. – 1965. – V. 43. – P. 139;
- [47] Flory P. J. // Proc. R. Soc. Lond. A. – 1956. – V. 234. – P. 60;
- [48] Доценко В.С. // УФН. – 1993. – Т. 163. -N. 6. – С. 1–37;
- [49] Kivelson D. and Tarjus G. // Phyl. Mag. B. – 1998. – V. 77. – P. 245–256;
- [50] Kivelson D., Kivelson S. A., Zhao X., Nussinov Z., Tarjus G. // Physica A. – 1995. – V. 219. – P. 27;
- [51] Tarjus G. and Kivelson D. // J. Chem. Phys. – 1995. – V. 103. – P. 3071;
- [52] Chayes L., Emery V. J., Kivelson A. S., Nussinov Z. and Tarjus G. // Physica A. – 1996. – V. 225. – P. 129;
- [53] Kivelson D. and Tarjus G. // J. Chem. Phys. -1998. – V. 109. – P. 5481;
- [54] Viot P. and Tarjus G. // Europhys. Lett. – 1998. – V. 44. – P. 423;
- [55] Tarjus G., Kivelson D., Viot P. // J. Phys.: Condens. Matter. – 2000. – V. 12. – P. 6497;
- [56] Grousson M., Tarjus G. and Viot P. // Phys. Rev. Lett. – 2001. – V. 86. – P. 3455;

- [57] Tarjus G., Alba-Simionesco C., Grousson M., Viot P. and Kivelson D. // J. Phys.: Condens. Matter. – 2003. – V. 15. – P. S1077;
- [58] Sausset F., Tarjus G. and Viot P. // Phys. Rev. Lett. – 2008. – V. 101. – P. 155701;
- [59] Nelson D. R. // Phys. Rev. Lett. – 1983. – V. 50. – P. 982;
- [60] Nelson D. R. // Phys. Rev. B. – 1983. – V. 28. – P. 5515;
- [61] Sethna J. P. // Phys. Rev. Lett. – 1983. – V. 51. – P. 2198;
- [62] Sethna J. P. // Phys. Rev. B. – 1985. – V. 31. – P. 6278;
- [63] Shore J. D. and Sethna J. P. // Phys. Rev. B. -1991. – V. 43. – P. 3782;
- [64] Shore L. D., Holzer H., and Sethna J. P. // Phys. Rev. B. – 1992. – V. 46. – P. 11376;
- [65] Stauffer D., Coniglio A., and Adam M. // Adv. Polym. Sci. – 1982. – V. 44. – P. 103–158;
- [66] Tanaka F. // Macromolecules. – 1989. – V. 22. – N. 4. – P. 1989–1994;
- [67] Tanaka F. // Macromolecules. – 1990. – V. 23. – N. 16. – P. 3784–3789;
- [68] Tanaka F., and Matsuyama A. // Phys. Rev. Lett. – 1989. – V. 62. – N. 23. – P. 2759–2762;
- [69] Tanaka F., and Stockmayer W. H. // Macromolecules. – 1994. – V. 27. – N. 14. – P. 3943–3954;

- [70] Semenov A.N., Nyrkova I.A., and Cates M.E. // *Macromolecules*. – 1995. – V. 28. – N. 23. – P. 7879–7885;
- [71] Semenov A.N., and Rubinstein M. // *Macromolecules*. – 1998. – V. 31. – N. 4. – P. 1373–1385;
- [72] Kumar S.K., and Panagiotopoulos A.Z. // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – V. 82. – N. 25. – P. 5060–5063;
- [73] Kumar S.K., and Donuglas J.F. // *Phys. Rev. Lett.* – 2001. – V. 87. – N. 18. – P. 188301;
- [74] Semenov A.N., and Rubinstein M. // *Macromolecules*. – 1998. – V. 31. – N. 4. – P. 1386–1385;
- [75] Segré P.N., Prasad V., Schofield A.B., and Weitz D.A. // *Phys. Rev. Lett.* – 2001. – V. 86. – N. 26. – P. 6042-6045;
- [76] Geotze W. / Aspects of structural glass transitions // In Hansen, J. P., Levesque, D., and Zinn-Justin, J., editors, *Liquids, Freezing and Glass Transition, Part I*, Vol. 51 of *Les Houches*. North-Holland. – 1989;
- [77] Ikkai F., and Shibayama M. // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – V. 82. – N. 24. – P. 4946–4949;
- [78] Schmalian J., and Wolynes P.G. // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – V. 85. – N. 4. – P. 836–839;
- [79] Ren S.Z., and Sorensen C.M. // *Phys. Rev. Lett.* – 1993. – V. 70. – N. 11. – P. 1727–1730;

- [80] *L.F. Cugliandolo*, Dynamics of glassy systems, cond-mat/0210312
(July 2002, Les Houches Summer school)
- [81] Reichman D. R. and Charbonneau P. // J. Stat. Mech. – 2005. – V. 5.
– P. 05013;
- [82] Parisi G., Sourlas N. // Phys. Rev. Lett. – 1979. – V. 43. – P. 744;
- [83] Kurchan J. // J. Phys. I (France). – 1992. – V. 2. – P. 1333;
- [84] Васильев М. Н. Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике. – Издательство ПИЯФ, Санкт-Петербург, 1998. – 774 с. ISBN 5-86763-122-2;
- [85] Келдыш Л. В. // ЖЭТФ. – 1964. – Т. 47. – С. 1515;
- [86] Kamenev A. // Nanophysics: Coherence and Transport, edited by H. Bouchiat, *et al*, [Elsevier, Amsterdam, 2005].
- [87] Martin P. C., Siggia E. D., and Rose H. A. // Phys. Rev. A. – 1976. – V. 8. – P. 423; De Dominics // J. Physique (Paris). – 1976. – V. 37. – P. 1;
- [88] Hohenberg P. C. and Halperin B. I. // Rev. Mod. Phys. – 1977. – V. 49. – P. 435–479;
- [89] Паташинский А. З., Покровский В. Л. Флуктуационная теория фазовых переходов – М.: Наука, 1982;
- [90] Sherrington D. and Kirkpatrick S. // Phys. Rev. Lett. – 1975. – V. 32. – P. 1972; Kirkpatrick S, Sherrington D. Phys. Rev. B. – 1978. – V. 17. – P. 4384;

- [91] Mehta M. Random matrices – Elsevier, Amsterdam, 2004;
- [92] Стратанович Р. Л. // Докл. Акад. Наук СССР. – 1957. – Т. 115. – С. 1097; Hubbard J. // Phys. Rev. Lett. – 1959. – V. 3. – P. 77;
- [93] Ландау Л. Д. и Лифшиц Е. М. Курс теоретической физики, том 5, Статистическая физика. – М: Наука, 2002;
- [94] Croxton C. A. Liquid state physics – a statistical mechanical introduction – Cambridge: University press. – 1974;
- [95] Cugliandolo L. The effective temperature, arXiv: 1104.4901v1 [cond-mat.stat-mech] 2011;
- [96] де Женн П. Идеи скейлинга в физике полимеров – М.: Мир, 1982, – 368 с.
- [97] Dong M., Marchetti M. C., Alan Middleton A., and Vinokur V. // Phys. Rev. Lett. – 1993. – V. 70. – P. 662–665;
- [98] Климонтович Ю. Л. Статистическая физика – М.: Наука, – 1982. – 608 с.;
- [99] Доценко В. С. // УФН. – 1995. – Т. 165. – № 5. – С. 481–528;
- [100] Feigel'man M. V., Larkin A. I., and Skvortsov M. A. // Phys. Rev. B. – 2000. – V. 61. – P. 12361;
- [101] Beloborodov I. S., Lopatin A. V., Schwiete G., and Vinokur V. M. // Phys. Rev. B. – 2004. – V. 70. – P. 073404;
- [102] Васин М. Г. // ТМФ. – 2006. – Т. 147. – № 2. – С. 328–336;

- [103] Burmistrov I. S. and Chtchelkatchev N. M. // Phys. Rev. B. – 2008. – V. 77. – P. 195319;
- [104] Chandrasekhar S. // Rev. Mod. Phys. – 1943. – V. 15. – P. 1;
- [105] Ludwig A. W. W. // Nucl. Phys. B. – 1990. – V. 330. – P. 639–680;
- [106] Френкель Я. И. Кинетическая теория жидкостей. – М.-Л.: Изд АН СССР, – 1945, – 423 с.
- [107] Nelson D. R. and Spaepen F. // Solid State Phys. – 1989. – V. 42. – P. 1;
- [108] Bernal J. D. // Nature. – 1960. – V. 185. – P. 68–70;
- [109] Bernal J. D. // Proc. Royal Soc. A. – 1964. – V. 280. – P. 299–322;
- [110] Cargill G. S. // Solid State Phys. – 1975. – V. 30. – P. 227;
- [111] Jonsson H. and Andersen H. C. // Phys. Rev. Lett. – 1988. – V. 60. – P. 2295;
- [112] Coxeter H. S. M. Regular Polytopes – Dover, New York, – 1973;
- [113] Nelson D. R. // Phys. Rev. Lett. – 1983. – V. 50. – P. 982;
- [114] Nelson D. R. // Phys. Rev. B. – 1983. – V. 28. – N. 10. – P. 5515–5535;
- [115] Лихачёв В. А., Волков А. Е., Шудегов В. Е. Континуальная теория дефектов (структурно-аналитическая механика материалов). – Л.: Изд-во Ленинградского уни-та, 1986. 232 с.;
- [116] Kadic A., Edelen D. G. B. A gauge theory of dislocations and disclinations. – Springer-Verlag, Berlin–Heidelberg–New York, 1983;

- [117] Nelson D. R. // Phys. Rev. B. – 1983. – V. 28. – P. 5515–5535;
- [118] Катанаев М. О. // УФН. – Т. 175. – № 7. – С. 705–733;
- [119] Osipov V. A. // Phys. Lett. A. – 1992. – V. 164. – P. 327;
- [120] Prasad M. K. // Physica D. – 1980. – P. 167–191;
- [121] Tanaka H. // Phys. Rev. E. – 2000. – V. 62. – P. 5;
- [122] Монастырский М. И. Топология калибровочных полей и конденсированных сред. — М.: ПАИМС, 1995. 478 с.;
- [123] Тамм Е. И. Основы теории электричества. — М.: Наука. Гл. ред. Физ.-мат. лит., 1989, 504 с. ISBN 5-02-014244-1;
- [124] Rivier N., Duffy D. M. // J. Physique. – 1982. – V. 43. – P. 295–306;
- [125] де Женн П. Физика жидких кристаллов. — М.: Мир, 1977. – 400 с.;
- [126] Kivelson S. A. and Tarjus G. // Nature Materials. – 2008. – V. 7. – P. 831–833;
- [127] Mc Kenna G. B. // Nature Physics. – 2008. – V. 4. – P. 673–674;
- [128] Tanaka H., Kawasaki T., Shintani H. and Watanabe K. // Nature Materials, Advance Online Publication. – 2010. – P. 1–8;
- [129] Toulouse G. // Commun. Phys. – 1977. – V. 2. – P. 115;
- [130] Hertz J. A. // Phys. Rev. B. – 1978. – V. 18. – P. 4875–4885;

- [131] Volovik G. E., Dzyaloshinskii I. E. // Sov. Phys. JETP. – 1978. – V. 48. – N 3. – P. 555–559;
- [132] Chtchelkatchev N. M., Ryzhov V. N., Schelkacheva T. I., and Tareyeva E. E. // Phys. Lett. A. – 2004. – V. 329. – P. 244;
- [133] Коллинз Дж. Перенормировка. Введение в теорию перенормировок, ренормализационной группы и операторных разложений. Пер. с англ. — М.: Мир, 1988. — 448 с.;
- [134] Васин М. Г., Щелкачёв Н. М., Винокур В. М. // ТМФ. — 2010. — Т. 163. — № 1. С. 537–548;
- [135] Bouchaud J.-P. // J. Phys. France. — 1992. — V. 2. P. 1705;
- [136] Kob W. / The Mode-Coupling Theory of the Glass Transition // Experimental and Theoretical Approaches to Supercooled Liquids: Advances and Novel Applications Eds.: J. Fourkas, D. Kivelson, U. Mohanty, and K. Nelson (ACS Books, Washington. — 1997.

Предметный указатель

- Аррениуссовская релаксация, 21
- Келдышевская техника, 61
- бозонный пик, 23, 25, 173
- дисклинация, 152
- долина, 71
- энергетический рельеф, 28
- флуктуации, 160, 178
- флуктуационно-диссипативная теорема, 61, 75, 99, 162
- формализм проекционного оператора Званжиги-Мори, 32
- формула Кубо, 77
- фрустрация, 152, 166
- функциональные методы неравновесной динамики, 57
- гель, 50
- калибровочная модель, 151
- калибровочное поле, 150, 152
- келдышевский контур, 63
- комплексная восприимчивость, 15
- кроссовер, 75, 78
- квази-неэргодическая система, 9
- квазиэргодическая система, 71
- локально предпочтительная структура, 44, 179
- метод динамического производящего функционала, 59
- модель Эдвардса-Андерсона, 61, 83
- модель Гейзенберга, 151
- модель Шерингтона-Киркпатрика, 66
- модель мягких сфер, 17
- нарушение эргодичности, 55, 163
- орбита группы, 120
- параметр порядка Эдвардса-Андерсона, 132, 174
- переход парамагнетик-ферромагнетик, 151
- переход золь-гель, 51, 75
- поли-аморфизм, 49
- политетраэдрическая модель, 106
- ренормализационная группа, 89, 143, 156
- ренормировка вершины, 140
- скейлинговая гипотеза, 82, 103, 131, 137
- скейлинговые свойства, 131
- скорость охлаждения, 20, 170
- слабый гель, 76
- соотношение Фогеля-Фулчера-Таммана, 38, 100, 146
- спиновые стёкла, 14
- сшивающая функция, 98, 162
- свободный объём, 28
- температура стеклования, 18, 76, 170
- теория Адама-Гиббса-Ди-Марцио, 35
- теория Янга-Миллса, 155
- теория ограниченных фрустрациями флуктуаций (ТОФФ), 43, 151
- теория связанных мод, 31
- теплоёмкость, 17, 167
- термическое гелеобразование, 78
- топологический момент, 123
- вмороженный беспорядок, 167
- восприимчивость, 14, 164, 167
- закон Фогеля-Фулчера-Таммана, 21, 24

золь, 76

“хрупкие” стёкла, 23, 54, 55

“сильные” стёкла, 23