МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ УКРАИНЫ
СУМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

Коплык Игорь Владимирович

НЕЭРГОДИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННОЙ СТРУКТУРЫ НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

Специальность 01.04.07 - Физика твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-матеметических наук

ИКоплык

СУМЫ - 1994

Диссертацией является рукопись

Работа выполнена в Сумском государственном университете

Научный руководитель

доктор физико-математических наук,
профессор
Олемской Александр Иванович

Официальные оппоненты

доктор физико-математических наук
Денисов Станислав Иванович

кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник
Головач Юрий Васильевич

Ведущая организация

Донецкий государственный
технический университет, г.Донецк

Защита состоится "3" ноября 1994 г. в 15.00 час.
на заседании специализированного ученого совета К 22.01.01 при Сумском государственном университете

244007, г.Сумы, ул. Римского-Корсакова,2,
ауд. 216, корпус ЭТ

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Сумского государственного университета

Автореферат разослан "23" сентября 1994 г.

Ученый секретарь
специализированного совета
кандидат физико-математических наук А.Я.Флат

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Обычно при описании фазового перехода выделяются термодинамический и кинетический аспекты превращения. Кроме того стандартная микроскопическая теория основывается на статистическом рассмотрении эргодической системы. Однако такие условия удовлетворительно отражают физическую ситуацию только при рассмотрении слабо неравновесных систем.

Основным объектом настоящей работы являются конденсированные системы типа закаленных твердых растворов, спиновых стекол, химических систем, испытывающих реакцию Белоусова-Жаботинского, и т.п. В последнее время на примере спиновых стекол было выяснено, что они, во-первых, не являются эргодическими и, во-вторых, находятся в состоянии, существенно удаленном от равновесия. Поэтому стандартный аппарат статистической физики не может претендовать на описание систем такого рода.

Как было показано Паризи, адекватное представление неэргодической системы с памятью может быть достигнуто за счет введения множества реплик этой системы. Что касается кинетического поведения, то его описание требует учета взаимного влияния конденсатной и флуктуационной составляющих параметра порядка (ПП) и пространственной неоднородности. До выполнения настоящей работы такая программа была реализована только для спиновых стекол, обладающих диссипативным режимом поведения.

Таким образом, представляется актуальной задача построения микроскопической теории сильно неравновесной термодинамической системы, описывающей как диссипативный, так и реактивный режимы поведения.

Цель работы состоит в развитии суперсимметричной неэргодической теории, описывающей основные стадии эволюции неравновесной термодинамической системы как этапы единого процесса пространственно-временной перестройки ее структуры.

Научная новизна

- Впервые построена теория эволюции сильно неравновесной термодинамической системы, равноправным образом учитывающая наличие гомогенных и гетерофазных флуктуаций ПП, с одной стороны, а также начальную и конечную стадии фазового превращения, с другой.
- Впервые построена суперсимметричная теория фазового перехода, позволяющая единым образом представить самосогласованное поведение конденсатной и флуктуирующей составляющих ПП и антифазных границ.
- Впервые построена микроскопическая теория неравновесной термодинамической системы, обладающей как реактивным, так и диссипативным режимами поведения.

Научные положения, выносимые на защиту

1. Самосогласованное описание конденсатной и флуктуационной составляющих параметра порядка, а также распределения антифазных границ в процессе фазового превращения достигается в рамках суперсимметричного подхода при описании неэргодической системы.

2. Переход от начальной стадии превращения к конечной, означающей появление пространственной неоднородности в распределении фаз, проявляется как потеря суперсимметрии термодинамической системы. При этом появляется различие в поведении гетерофазных и гомогенных флуктуаций,

обусловленное разделением фазового пространства системы.

3. Учет реактивного поведения диссипативной системы приводит к увеличению числа базисных матриц, по которым раскладывается суперкоррелятор, от трех до шести. Такое расширение базиса является основой микроскопической теории химических систем, испытывающих реакцию Белоусова-Жаботинского.

Практическая ценность

Получена формула, выражающая критическую скорость стеклования через параметры межатомного взаимодействия. Для систем, испытывающих реакцию Белоусова-Жаботинского, найдены критические значения параметра возбуждения и ангармонизма, обеспечивающие реактивный режим поведения. Таким образом, появляется возможность прогнозировать склонность конденсированных систем к стеклованию и автоколебательному поведению.

Апробация работы

Основные результаты работы были доложены на 1 Международном семинаре "Эволюция дефектных структур в металлах и сплавах" (Барнаул 1992); Международной конференции "Физика на Украине" (Киев 1993) и научных семинарах СумГУ (г. Сумы).

Публикации

По материалам диссертации опубликовано 6 оригинальных статей и 2 обзора.

Личный вклад автора

В обзоре [1] участие автора оценивается 20%. Соответственно в обзоре [7] - 50%. В оригинальных работах [2-6,8] вклад автора составляет 30%. Во всех работах участие автора сводилось к аналитическому решению задач, поставленных научным руководителем.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и списка литературы. Объем диссертации составляет 141 страницу, включая 13 рисунков и библиографию из 56 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, приведено краткое содержание работы, сформулированы цели и задачи исследования и основные положения, выносимые на защиту.

Глава 1 посвящена обзору полевых теорий кинетики формирования макроструктуры новой фазы на основе микроскопического подхода. Установлена связь между микроскопическим и макроскопическим уровнями фазового превращения. Поскольку последнее может протекать по двум возможным сценариям, то в разделе 1.1 исследуется непрерывный (спинодальный) механизм образования фазы, а в разделе 1.2 прерывистый (бинодальный). Рассмотрены случаи несохраняющегося и сохраняющегося ПП. Последовательно изложены методы описания пространственно - временной зависимости поля ПП, развитые Каном, Куком и Лангером. Показано, что коррелятор ПП разбивается на флуктуационную и конденсатную составляющие. Первая характеризуется обычной корреляционной длиной, вторая - макроскопическим масштабом L, задающим размер домена (выделения) новой фазы. Из наглядных соображений найден характер временной зависимости $L(t)$ для случаев несохраняющегося и сохраняющегося ПП, а также для процесса коалесценции. Приведена схема, позволяющая представить критический зародыш фазы как солитонное решение полевого уравнения. Показано, что при росте амплитуды гомогенной флуктуации ПП происходит ее замедление в движении как целого, и в бинодальной области образуется пара "кинк - антикинк", т.е. зародыш. Указано, что раздельное описание бинодального и спинодального режимов распада в представленных теориях является неудовлетворительным в том смысле, что в спинодальной области учитывается лишь изменение амплитуды ПП в макроскопически однородной системе. Напротив, в бинодальной области принимается во внимание лишь изменение характерного размера гетерогенной системы при постоянном значении ПП.

Глава 2 посвящена построению суперсимметричной теории эволюции неравновесной термодинамической системы. Обычно при ее рассмотрении используют два приближения. Если система переведена в спинодальную область, то пространственно-временная зависимость ПП представляется набором плоских волн - гомогенных флуктуаций, эволюция которых описывается теорией Кана-Хиллерта-Кука и ее позднейшими модификациями. В бинодальной области образование фазы рассматривается как флуктуационное зарождение выделений за счет стабилизации гетерофазных флуктуаций, обладающих резкой межфазной границей. Однако совершенно ясно, что на стадии, предшествующей зарождению фазы, должны быть равноправны оба типа указанных флуктуаций. Поскольку гомогенные являются волнами ПП, а гетерофазные - частицами упорядоченной фазы, то очевидно, что теория, претендующая на их равноправное представление, должна отражать своеобразную корпускулярно-волновую природу процесса образования фазы и, следовательно, носить суперсимметричный характер. Применительно к линейной стадии эволюции попытка такого описания предпринималась Клейном и Батрауни в 1991 г. В настоящей диссертационной работе использована самосогласованная схема, позволяющая представить весь процесс эволюции системы, включая и потерю суперсимметрии в результате нарушения эргодичности в нелинейном режиме.

Следуя стандартной полевой методике, мы исходим из производящего функционала, представленного как континуальный интеграл по полю ПП $\eta(r,t)$, пробному полю $\phi(r,t)$ и паре грассмановых переменных $\bar\psi(r,t)$, $\psi(r,t)$. Первые из них отвечают гомогенным флуктуациям, последние - гетерофазным. Основным предположением работы является то, что перечисленные поля являются компонентами суперполя

$$\Phi = \eta + \bar\chi\psi + \bar\psi\chi + \bar\chi\chi\phi, \qquad (1)$$

где $\bar\chi(r,t)$, $\chi(r,t)$ - грассмановы координаты.

В рамках Φ^4-супертеории возмущений можно видеть, что процесс эволюции неравновесной системы протекает следующим образом. На начальной стадии отвечающей линейному режиму спинодальной системы и инкубационному периоду для бинодальной, имеем среднее по объему $\eta(r,t) = 0$, и система является суперсимметричной относительно взаимной трансформации суперкомпонент η, ϕ, $\bar\psi$, ψ. Это означает полную эквивалентность гомогенных и гетерофазных флуктуаций. С их усилением проявляются эффекты нелинейности, приводящие к появлению барьера между областями суперпространства, отвечающими разрешенным значениям $\bar\psi(r,t)$, $\psi(r,t)$, с одной стороны, и $\eta(r,t)$, $\phi(r,t)$ - с другой. В результате нарушается суперсимметрия относительно гомогенных и гетерофазных флуктуаций, и система переходит на качественно новую стадию зарождения фазы. При этом ввиду сужения области определения величин η, ϕ их временные изменения становятся когерентными - изменение пробного поля $\phi(t)$ при $t < \infty$ будет сказываться на изменении порядка $\eta(t)$ даже в бесконечный момент времени $t = \infty$. Таким образом, появляется неэргодичность, характеризуемая параметром $\Delta = \langle\eta(\infty)\ \phi(0)\rangle$, величина которого определяет разность между изотермическим и адиабатическим значениями восприимчивости. Что касается когерентности в изменении самого ПП, которая характеризуется параметром Эдвардса-Андерсона $q = \langle\eta(\infty)\eta(0)\rangle$, то она появляется лишь с разделением областей определения компонент η, ϕ. Это обеспечивается появлением барьеров за счет замороженного беспорядка $h \propto |\dot{T}|^{\alpha}$, $\alpha > 0$, обусловленного конечным значением скорости закалки $\dot{T}$. Ее критическое значение, обеспечивающее процесс стеклования ($q \neq 0$), имеет вид

$$|\dot{T}|_c \propto \frac{\left(8w / A^2 - 1\right)^{3/2\alpha}}{(18v)^{1/2\alpha}}, \qquad (2)$$

где A - коэффициент при квадратичном члене в разложении Ландау, параметры w, v характеризуют межатомное взаимодействие и ангармонизм. Поскольку эффективная жесткость пружинки A обычно превышает $w^{1/2}$, то наиболее легко стеклуются системы с сильным ангармонизмом v и значительным межатомным взаимодействием w. Именно такая ситуация реализуется в соединениях типа "металл-металлоид".

Пространственно-временная эволюция системы на макроуровне описывается функцией Грина

$$C_{\pm} = \Delta + g\ \theta\ (\theta \pm ig\tau\omega)^{-1}, \quad g = \theta\chi, \qquad (3)$$

где χ - адиабатическая восприимчивость, τ - время релаксации макроансамбля доменов, ω - частота. Отсюда для определения временной зависимости $L(t)$ размера домена следует учесть, что пространственная дисперсия на микроуровне дает $\tau_k = \tau_0(1 + \xi^2 k^2)^{-1}$, где τ_0 - затравочное время релаксации, ξ - корреляционная длина, k - волновой вектор. При переходе на макроуровень, представляющий поведение самих доменов, τ_k трансформируется в боголюбовскую особенность $\tau_k \propto (\xi k)^{-2}$. Тогда, учитывая слейлинговые соотношения $k \sim L^{-1}$, $\omega \sim t^{-1}$, из условия $\theta \sim g\tau\omega$ соизмеримости слагаемых в знаменателе (3) для несохраняющегося ПП получаем $L^2 \propto t$. При наличии закона сохранения величина θ, характеризующая уровень шума, приобретает множитель k^2, в соответствии с чем получается соотношение $L^4 \propto t$, имеющее место на стадии, предшествующей коалесценции. С её наступлением устанавливается когерентный режим так называемого диффузионного взаимодействия, означающий появление эффективного поля, имеющего смысл спонтанного потока j, направленного от малых выделений к большим. В отличие от обычного диффузионного потока ζ, который, будучи пропорциональным градиенту химпотенциала, даёт мощность коррелятора белого шума $<\zeta_k^2> = 2\theta k^2$, пропорцианальную второй степени волнового вектора, когерентный поток j_k, не связанный с каким-либо градиентом, характеризуется коррелятором $<\zeta_k^* j_k> \propto k$. Добавляя его к обычному слагаемому θ в знаменателе гриновской функции (3) и сравнивая со слагаемым $g\tau_k\omega$, находим скейлинговую зависимость $L^3 \propto t$, присущую коалесценции.

Для выяснения картины действия внешнего поля H, приводящего к ориентации доменов в заданном "направлении", уместно воспользоваться суперсимметричной моделью нелинейного маятника, в рамках которой потенциальная энергия представляется гармонической функцией с амплитудой H_0

Процесс переориентации характеризуется макроскопической величиной J, определяемой скоростью изменения среднего значения ПП. В системах с сохраняющимся ПП роль поля H может играть самосогласованное поле диффузионного взаимодействия выделений в процессе коалесценции. В линейном приближении это поле приводит к диффузионному потоку $j_d = \sigma H$, где $\sigma > 0$ - константа связи, величина которой определяется коэффициентом диффузии. Условие самосогласования $\mathrm{J}(H) = j_d$ дает температурную зависимость спонтанного диффузионного потока $\mathrm{J}(\theta)$. В непосредственной окрестности температуры спинодали, ограниченной значением $\theta_d = (2H_0/3)/ln\ (\sigma/(2\pi)^2)$, величина которого уменьшается с ростом коэффициента атомной диффузии, флуктуации на макроуровне выделений настолько велики, что процесс коалесценции не проявляется. При удалении от спинодали $(|\theta - \theta_s| > \theta_d)$ диффузионный поток нарастает согласно зависимости $\mathrm{J} \propto |\theta - \theta_d|^{1/2}$.

<u>В Главе 3</u> исследуются термодинамические системы, претерпевающие фазовое превращение. <u>Раздел 3.1.</u> посвящен суперсимметричной теории флуктуаций ПП. В стандартной теории фазовых переходов принимается, что они имеют плавный характер. Это позволяет представить их поле рядом Фурье, где основной вклад обеспечивается длинноволновыми компонентами, так что определение флуктуационных поправок сводится к вычислению простейших интегралов гауссовского типа. В рамках такого подхода не учитывается однако, что значительный вклад может быть связан не только с плавным изменением поля ПП, но и с солитоноподобными образованиями типа антифазных границ. Иными словами, наряду с гомогенными флуктуациями следует учитывать и гетерогенную составляющую.

Для решения данной задачи используется суперсимметричная теория, изложенная в главе 2. В квадратичном приближении получается вторично квантованный гамильтониан

$$\hat{H} = \hat{H}_a + \hat{H}_b\,,$$
$$\hat{H}_a = \sum_k \varepsilon_k \left(\hat{n}_k - 1/2 \right),\ n_k = \hat{a}_k^+ \hat{a}_k^-, \tag{4}$$
$$\hat{H}_b = \sum_k \varepsilon_k \left(\hat{\nu}_k + 1/2 \right),\ \nu_k = \hat{b}_k^+ \hat{b}_k^-$$

где $\hat{a}^\pm$, $\hat{b}^\pm$ - фермионные и бозонные операторы вторичного квантования, $\varepsilon_k = \varepsilon_0 + \gamma k^2$ затравочный спектр в параболическом приближении ($\varepsilon_0 = \alpha\,(T-T_c)$ - "частота" мягкой моды, T_c - критическая температура, α, γ - положительные константы). Согласно (4), поведение флуктуирующей системы представляется двумя равноправными слагаемыми $\hat{H}_a$, $\hat{H}_b$, первое из которых носит фермиевский характер (оператор $\hat{n}_k$ принимает только значения $n_k = 0,1$), а второе - бозевский (оператор $\hat{\nu}_k$ имеет собственные значения $\nu_k = 0,1,2,\ldots$). Очевидно, фермиевский вклад отвечает гетерофазным флуктуациям, солитонная природа которых отражается присущим фермионам правилом запрета. Соответственно, бозонное слагаемое связано с обычными, гомогенными флуктуациями, число которых ν_k в континуальном пределе $k \to 0$ может принимать сколь угодно большие значения. Равноправный характер гетеро- и гомогенных флуктуаций отражается в том, что обе составляющие имеют одинаковый спектр ε_k. Принципиально важной особенностью является то обстоятельство, что нулевая энергия $E^{(0)}_{a,b} = \mp (1/2)\sum_k \varepsilon_k$ фермиевской и бозевской компонент, вычисленные по отдельности, расходятся, а при совместном учете в точности компенсируют друг друга. Этот факт указывает, что непротиворечивая картина может быть достигнута только при совместном рассмотрении обоих типов флуктуаций.

С учетом сказанного выражение для полного термодинамического потенциала флуктуаций представляется в виде

$$\Omega = TV \int_0^{\infty} \frac{k^2\, dk}{2\pi^2}\, \ln th \frac{\varepsilon_k}{2T}, \qquad (5)$$

где V – объем системы. Полученная формула принципиально отличается от обычно используемой наличием функции th. В области $\varepsilon_k \ll T$, которая и дает основной вклад в термодинамические величины, наличие этой функции не сказывается, однако при больших ε_k имеем $\ln th(\varepsilon_k/2T) \approx 0$, так что не требуется вводить верхний предел обрезания.

Флуктуационная поправка ΔC к теплоемкости при условии $\varepsilon_k \ll T$ выражается следующим образом:

$$\Delta C = \frac{\alpha^{3/2}\, T_c^2\, V}{2\pi^2\, \gamma^{3/2}} (T - T_c)^{-1/2}. \qquad (6)$$

Подобно формуле Леванюка здесь появляется большой сомножитель в знаменателе. Однако учет гетерофазных флуктуаций привел к повышению значения ΔC в $8/\pi \approx 2{,}55$ раз.

Корреляционная функция $S_k = \langle|\eta_k|^2\rangle$ имеет вид

$$S_k = cth\left(\varepsilon_k/2T\right)\left(T/\varepsilon_k\right). \qquad (7)$$

Как и в флуктуационно-диссипационной теореме, здесь наличие котангенса проявляется при малости энергии флуктуации ε_k в сравнении с тепловой энергией T. В пределе $\varepsilon_k \ll T$ имеем $S_k = 2(T/\varepsilon_k)^2$, откуда при $T = T_c$ следует зависимость Порода

$$S_k = \frac{2T^2}{\gamma^2 k^4}, \qquad (8)$$

означающая аномальное нарастание флуктуаций в критической области. В обратном пределе $\epsilon_k \gg T$, отвечающем закритической области, получаем распределение Орнштейна - Цернике.

В <u>разделе 3.2</u> на основе суперсимметричного подхода получены полевые уравнения

$$(2T)^{-1}\tau_0\ddot{\eta} + \left[-\beta\nabla^2 + V''(\eta) \right]\phi = -6B\psi\bar{\psi}\eta, \quad (9а)$$

$$\phi = -(1/2T\tau_0)\left[-\beta\nabla^2\eta + V'(\eta) \right], \quad (9б)$$

$$\dot{\psi} + \tau_0^{-1}\left[-\beta\nabla^2 + V''(\eta) \right]\psi = 0, \quad (9в)$$

$$-\dot{\bar{\psi}} + \tau_0^{-1}\left[-\beta\nabla^2 + V''(\eta) \right]\bar{\psi} = 0, \quad (9г)$$

определяющие самосогласованное поведение компонент поля (1), где τ_0 - затравочное время релаксации,

$$V''(\phi) \equiv d^2V/d\phi^2 = A + 3B\phi^2. \quad (10)$$

Их общей особенностью является нелинейное действие конденсатной сотавляющей η на все остальные компоненты. Характерно, что для η, ψ, $\bar{\psi}$ эта связь осуществляется через вторую производную $V''(\eta)$ потенциала Ландау $V(\eta)$, тогда как в уравнение (9б) для флуктуационной составляющей ϕ входит лишь первая $V'(\eta)$. С другой стороны грассмановы компоненты ψ, $\bar{\psi}$ влияют только на конденсатную составляющую η, но не флуктуационную ϕ. Аналогичным образом, влияние флуктуационной компоненты ϕ сказывается только на конденсатной η.

Поведение грассмановых компонент описывается уравнением непрерывности для плотности антифазных границ $\rho = \tau_0\psi\bar{\psi}$

$$\dot{\rho} + \nabla j = 0, \qquad j = \beta\left[\psi\nabla\bar{\psi} - (\nabla\psi)\bar{\psi}\right]. \quad (11)$$

Сравнивая с обычными квантовомеханическими выражениями, видим, что коэффициент β играет роль постоянной Планка. Выбор последовательности $\psi\bar{\psi}$ грассмановых полей в определении ρ обусловлен тем обстоятельством, что при формальном квантовании имеем $\hat{\psi} = (\hat{a}^{+} + \hat{a}^{-})/2$, $\hat{\bar{\psi}} = \hat{a}^{-} - \hat{a}^{+}$, где $\hat{a}^{\pm}$ - фермиевские операторы рождения-уничтожения, и выбранная последовательность $\bar{\psi}\psi = \hat{n} - 1/2$ сводится к стандартному оператору числа фермионов $\hat{n} = \hat{a}^{+}\hat{a}^{-}$. В однородном случае $\nabla\psi = \nabla\bar{\psi} = 0$, и согласно (11) величина ρ не зависит от времени: $\rho_k(t) = \tau_0\psi_{0k}\bar{\psi}_{0k} = \rho_k(0)$.

В стационарном упорядоченном состоянии компоненты суперполя (1) принимают значения

$$\eta_{00}^2 = - A/B, \quad \psi_{00} = \bar{\psi}_{00} = 0, \quad \phi_{00} = 0; \quad \varphi = 0.$$

Отсюда видно, что если в неупорядоченной фазе все суперкомпоненты являются совершенно равноправными, то упорядочение приводит к спонтанному нарушению суперсимметрии, состоящему в выделении конденсатной составляющей $\eta_{00} \neq 0$. Выпадение конденсата η_{00} приводит к появлению самосогласованного поля $h = \chi\eta_{00}$, где $\chi = |2A|^{-1}$ - восприимчивость. В результате стационарная величина флуктуационной компоненты ϕ в уравнениях (9) приобретает среднее значение $\langle\phi\rangle = - \chi\eta_{00}/2T|A|$. Соответственно суперсреднее

$$\langle\Phi\rangle_s = \int \langle\Phi\rangle \, d\bar{\chi}\, d\chi = - \langle\phi\rangle$$

становится ненулевым, что и означает нарушение суперсимметрии.

При положительных значениях плотности ρ грассманова поля получаем

$$\eta^2 = \eta_{00}^2 \left[1 - \rho/\rho_c \right] \left\{ 1 + \sqrt{\rho/\rho_c} \;\; ch \left[(t - t_0)/\tau \right] \right\}^{-1}, \qquad (12)$$

$$\tau = (\tau_0/2) \left[1 - \rho/\rho_c \right]^{-1/2}.$$

Найденная зависимость представляет инстантон, ширина которого τ неограниченно возрастает, а высота $\eta(t_0)$ спадает до нуля при увеличении плотности $\rho \le \rho_c$. Очевидно, такой процесс отвечает взаимной переориентации доменов упорядоченной фазы, число которых определяется величиной ρ. С энергетической точки зрения это означает переход системы из одной ямы потенциала $V(\eta)$ в другую. Интенсивность таких переходов задается соотношением между высотой барьера $\sim |A|\eta_{00}^2$, разделяющего ямы, и температурой T. Именно их отношение определяет критическое значение плотности границ ρ_c. Физический смысл зависимостей (12) состоит в том, что при повышении плотности границ ρ до критического значения ρ_c стационарное значение ПП в домене спадает до нуля, а время переориентации τ неограниченно возрастает. При $\rho \ge \rho_c$ барьер между ямами пропадает, и реализуется неупорядоченное состояние стекольного типа.

При учете флуктуаций ($\phi \ne 0$) получаем зависимость толщины границы d и размера домена L от плотности границ $\rho \le \rho_c$:

$$d = \xi \left(1 + \sqrt{\rho/\rho_c} \right)^{-1/2},$$

$$L = \xi \left(\sqrt{1 + \rho/\rho_c} - 1 \right)^{-1/2}. \tag{13}$$

Таким образом, толщина границы $d(\rho)$ спадает в интервале от ξ до $2^{-1/2}\xi \simeq 0{,}707\xi$, а размер домена $L(\rho)$ от $L \approx \xi\,(2\rho_c/\rho)^{1/2}$ при $\rho \ll \rho_c$ до $L_{min} = (\sqrt{2} - 1)^{-1/2}\xi \simeq 1{,}554\xi$ при $\rho = \rho_c$.

Глава 4 посвящена построению суперсимметричной теории сильно неравновесной термодинамической системы, которая может проявлять не только диссипативное поведение, присущее спиновым стеклам, но и реактивное - как в случае реакции Белоусова-Жаботинского. В рамках вариационной процедуры показано, что уравнение движения свободного поля имеет вид

$$\hat{L}\phi = 0, \quad \hat{L} = \theta^{-1}\left\{ (1 - \xi^2\nabla^2) + \tau_0[\bar{D},D] \right\} \tag{14}$$

Здесь квадратные скобки означают коммутатор, ξ - корреляционная длина, учитывающая микроскопическую неоднородность системы, $\nabla = \partial/\partial r$, τ_0 - затравочное время релаксации, $\bar{D}$, D - ковариантные суперпроизводные, удовлетворяющие свойствам

$$\{\bar{D},D\} = \partial/\partial t, \quad [\bar{D},D]^2 = \partial^2/\partial t^2 . \tag{15}$$

Отсюда видно, что операторы $\bar{D}$, D можно ассоциировать с квадратным корнем из временной производной. Физически это означает, что развиваемая схема позволяет описывать не только экспоненциально быструю (дебаевскую) релаксацию, но и замедленные процессы типа структурной релаксации стекла.

Оператор уравнения движения (14) описывает только процессы диссипации, отвечающие исходному уравнению Ланжевена. Это выражается в том, что коммутатор $[\bar{D},D]$ содержит только первую степень производной $\partial/\partial t$. Однако совершенно ясно, что с ростом степени возбуждения θ система может приобрести реактивных характер поведения, который, как известно, связан со вторыми производными $\partial^2/\partial t^2$. Как видно из второго равенства (15), учет такого поведения обеспечивается добавлением в (14) слагаемого, пропорционального $[\bar{D},D]^2$. В результате исходный оператор уравнения движения принимает вид

$$\hat{L} = \theta^{-1}\left\{ (1 - \xi^2\nabla^2) + \tau_0 [\bar{D},D] + \omega_0^{-2} [\bar{D},D]^2\right\}, \tag{16}$$

где ω_0 - собственная частота (частота мягкой моды).

Пространственно-временное поведение исследуемой системы представляется суперкоррелятором

$$C(r,t;r',t') = \langle\phi(r;t)\phi(r',t')\rangle.$$

В линейном приближении он удовлетворяет уравнению

$$\hat{L}\,\hat{C} = \hat{\delta}\,, \qquad \delta(r,t;\chi) = -\bar{\chi}\chi\,\delta(r)\delta(t). \tag{17}$$

После фурье-преобразования по пространственно-временным компонентам отсюда находим

$$\hat{C}_{\omega k} = \frac{\theta\tau_0}{D_{\omega k}}\left\{ R_{\omega k}\hat{B}_{+} + \left[1-\left(\frac{\omega\tau_0}{2}\right)^2\right]\hat{T}_{+} + \right.$$

$$\left. + \left[1+\left(\frac{\omega\tau_0}{2}\right)^2\right]\hat{T}_{-} + R_{\omega k}\hat{F}_{+} - i\tau_0\omega\hat{F}_{-}\right\}, \tag{18}$$

$$D_{\omega k} = R^2_{\omega k} + \tau_0^2\omega^2, \qquad R_{\omega k} = (1+\xi^2k^2) - \omega^2/\omega_0^2.$$

где введены базисные операторы $\hat{B}_{\pm}$, $\hat{T}_{\pm}$, $\hat{F}_{\pm}$, матричные элементы которых имеют ви"

$$B_{\pm}(\chi,\chi') = -\tau_0^{-1}(\bar{\chi}\chi \pm \bar{\chi}'\chi'),$$

$$T_{\pm}(\chi,\chi') = 1 \pm \tau_0^{-2}\bar{\chi}\chi\bar{\chi}'\chi', \tag{19}$$

$$F_{\pm}(\chi,\chi') = \tau_0^{-1}(\bar{\chi}'\chi \pm \bar{\chi}\chi').$$

Удобство представления (18) состоит в том, что по базисным матрицам (19) может быть разложен суперкоррелятор не только для свободного поля, но и в произвольном случае. Это связано с тем обстоятельством, что операторы $\hat{B}_{\pm}$, $\hat{T}_{\pm}$, $\hat{F}_{\pm}$ образуют полный базис. Характерно, что квадраты бозевских операторов $\hat{B}_{\pm}$, $\hat{T}_{\pm}$, сводятся к единичному бозевскому оператору $\hat{B}_{-}$, тогда как квадраты фермиевских $\hat{F}_{\pm}$ дают единичный фермиевский $\hat{F}_{-}$. С другой стороны бозевская природа операторов $\hat{B}_{\pm}$, $\hat{T}_{\pm}$ и фермиевская $\hat{F}_{\pm}$ выражается в том обстоятельстве, что произведения операторов разных групп сводятся к нулю.

Для нахождения явных выражений экспериментально измеряемых корреляторов подставим в определение $C(r,t) = \langle\Phi(r,t)\Phi(r,t)\rangle$ координатное представление суперполя

(1) и сравним множители при одинаковых базисных операторах в (18). В результате для корреляторов различных компонент ПП

$$
\begin{aligned}
& S_{\omega k} = \langle \eta_{\omega k}\, \eta_{-\omega -k} \rangle , \quad \tilde{S}_{\omega k} = \tau_0^2 \langle \phi_{\omega k}\, \phi_{-\omega -k} \rangle ; \\
& \chi'_{\omega k} = \langle \eta_{\omega k}\, \phi_{-\omega -k} \rangle = \langle \phi_{\omega k}\, \eta_{-\omega -k} \rangle ; \\
& G^-_{\omega k} = \langle \psi_{\omega k}\, \bar{\psi}_{-\omega -k} \rangle , \quad G^+_{\omega k} = \langle \bar{\psi}_{\omega k}\, \psi_{-\omega -k} \rangle
\end{aligned}
\tag{20}
$$

находим выражения

$$
\begin{aligned}
& S^{(0)}_{\omega k} = 2 \frac{\theta \tau_0}{D_{\omega k}}, \quad \tilde{S}^{(0)}_{\omega k} = - \frac{1}{2} \frac{\theta \tau_0}{D_{\omega k}} (\tau_0 \omega)^2 ; \\
& \chi'^{(0)}_{\omega k} = \frac{1}{2} \left[G^{+(0)}_{\omega k} - G^{-(0)}_{\omega k} \right] , \quad G^{\pm(0)}_{\omega k} = \mp \frac{\theta}{R_{\omega k} \pm i \tau_0 \omega} ,
\end{aligned}
\tag{21}
$$

где индекс $^{(0)}$ указывает, что полученные выражения относятся к свободному полю.

Сравнивая формулы (21) с результатами стандартной теории фазовых переходов, нетрудно видеть, что первая сводится к обычному выражению для структурного фактора в гауссовском приближении. На первый взгляд представляется неожиданным то обстоятельство, что флуктуационно-диссипационная теорема $S_{\omega k} = (2/\omega)\, \Im m\, G^-_{\omega k}$ выполняется для автокорреляторов бозевской $S_{\omega k}$ и фермиевской $G^-_{\omega k}$ составляющих суперполя, тогда как в стандартном случае вместо последнего должна стоять функция отклика $\langle \eta_{\omega k}\, \varphi_{-\omega -k} \rangle$ ПП η на "поле духов" φ. Легко видеть однако, что в рамках используемого приближения фермиевский автокоррелятор и функция отклика тождественно совпадают: $G^-_{\omega k} = \langle \eta_{\omega k}\, \varphi_{-\omega -k} \rangle$. Характерно, что если мнимая часть восприимчивости $\chi''^{(0)}_{\omega k} \propto \omega$ пропорциональна в гидродинамическом пределе $\omega, k \to 0$ лишь первой степени частоты, то $\tilde{S}^{(0)}_{\omega k} \propto \omega^2$ имеет вторую степень малости. Именно этим обстоятельством оправдывается тот факт, что в гидродинамическом приближении обычно допускается отсутствие корреляции флуктуаций.

Для рассмотрения нелинейной задачи следует исходить из суперсимметричного уравнения Дайсона $\hat{C}^{-1} = \hat{C}^{(0)-1} - \hat{\Sigma}$, где $\hat{C}^{(0)}$ - исследованный выше линейный суперкоррелятор, $\hat{\Sigma}$ - собственно-энергетическая функция. Определение ее компонент разложения по базису (19) производится в рамках суперсимметричной диаграмной техники. Использование соответствующих выражений, имеющих достаточно громоздкий вид, позволяет найти компоненты точного суперкоррелятора $\hat{C}$ во втором порядке по ангармонизму.

Для описания реактивного поведения неравновесной системы достаточно ограничится первым порядком теории возмущений и пренебречь межатомным взаимодействием. Соответствующий закон дисперсии имеет вид

$$\omega = i\,\frac{\omega_0^2\tau_0}{\theta} \pm \omega_0 \left[\left(1 + 12\,\frac{v}{\theta}\,S \right) - \left(\frac{\omega_0\tau_0}{2\theta} \right)^2 \right]^{1/2}, \tag{22}$$

где S - среднеквадратичное значение ПП. При малых степенях неравновесности θ спектр (22) носит чисто диссипативный характер. Однако при степенях возбуждения θ, превышающих критическое значение

$$\theta_c = -6vS + \left[3vS + \left(\omega_0\tau_0/2\right)^2 \right]^{1/2}, \tag{23}$$

частота (22) приобретает действительную составляющую, которая в условиях $\theta \gg \theta_c$ намного превосходит мнимую часть. Это означает, что предельно возбужденные системы могут находится в стационарном состоянии, где гидродинамическая мода, отвечающая ПП, совершает автоколебательное движение. Наиболее яркий пример такого поведения представляет реакция Белоусова-Жаботинского. Согласно (23) системы, в которых может быть реализовано автоколебательное стационарное состояние, должны обладать ангармонизмом, превышающим критическое значение

$$v_c = \left[1/24\, S\right] \left[1 + \sqrt{1 + \left(2\omega_0 \tau_0\right)^2} \right]. \qquad (24)$$

Как и следовало ожидать, его величина тем меньше, чем больше среднеквадратичное значение ПП S и чем меньше значения частоты мягкой моды ω_0 и времени релаксации τ_0. Столь жесткие ограничения объясняют причину, по которой так редко наблюдаются системы с поведением типа реакции Белоусова-Жаботинского.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Как показывает анализ поведения пространственно-временной структуры неравновесной системы, единая картина описания ее эволюции достигается в рамках представления конденсатной и флуктуационной составляющих параметра порядка и плотности межфазных границ как компонент единого суперполя. При этом бозевские компоненты суперполя отвечают составляющим параметра порядка, а фермиевские - плотности антифазных границ.

2. Суперсимметричный подход позволяет представить стадию зарождения фазы и последующую стадию роста выделений как начальную и позднюю стадии единого процесса релаксации неравновесной системы. При этом само разделение стадий представляется как потеря суперсимметрии, которая означает выделение гетерофазных флуктуаций на фоне гомогенных. В результате система теряет свою эргодичность.

3. Использование суперсимметричного подхода позволяет представить гидродинамическую моду упорядочения, ее прост-

ранственную неоднородность, а также учесть (наряду с обычными кинетическими эффектами) замедленную эволюцию типа структурной релаксации. Это достигается за счет учета иерархической связи между микро- и макроскопическим структурными уровнями системы, претерпевающей фазовый переход. Характеристики микроскопического уровня описывают параметр порядка и его стандартное кинетическое поведение, а характеристики макроуровня - крупномасштабную (доменную или гетерофазную) структуру упорядоченной фазы и ее замедленную эволюцию.

4. Совместное рассмотрение реактивного и диссипативного режимов поведения системы требует введения в операторном пространстве шести базисных суперматриц, по которым проводится разложение произвольнго суперкоррелятора. Коэффициенты такого разложения дают структурный фактор и восприимчивости конденсатной и флуктуационной компонент параметра порядка, а также плотности распределения антифазных границ.

5. Суперсимметричная теория фазовых переходов позволяет единым образом представить поведение как гомогенных, так и гетерофазных флуктуаций. При этом пропадают нефизические расходимости в выражении для термодинамического потенциала, а скачок теплоемкости при фазовом переходе возрастает.

6. Первый порядок суперсимметричной теории возмущений показывает, что неравновесная термодинамическая система может переходить в реактивный режим поведения, если степень ее возбуждения превышает критическое значение, определяемое параметром ангармонизма. Такие условия реализуются только в системах, где величина этого параметра превышает пороговое

значение, обратно пропорциональное среднеквадратичной флуктуации параметра порядка.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Олемской А.И., Коплык И.В., Торопов Е.А., Скляр И.А., Флат А.Я. Синергетика эволюции макроструктуры новой фазы. // Изв.вузов. Физика. - 1993. - N 1. - С.90-120.

2. Олемской А.И., Коплык И.В., Торопов Е.А., Суперсимметричная теория фазового превращения. // ФММ. - 1994. - N 1. - С.40-46.

3. Олемской А.И., Коплык И.В., Торопов Е.А. Суперсимметричное представление флуктуаций параметра порядка. // Изв.вузов. Физика. - 1994. - N 4. - С.49-53.

4. Олемской А.И., Коплык И.В., Торопов Е.А. Исследование сильно неравновесной термодинамической системы. Суперсимметричная теория в линейном приближении. // Изв.вузов. Физика. - 1994. - N 6. - С.15-21.

5. Олемской А.И., Коплык И.В., Торопов Е.А. Исследование сильно неравновесной термодинамической системы. Суперсимметричная диаграмная техника ϕ^4-модели. // Изв.вузов. Физика. - 1994. - N 6. - С.22-27.

6. Олемской А.И., Коплык И.В., Торопов Е.А. Исследование сильно неравновесной термодинамической системы. Самосогласованная ϕ^4-теория. // Изв.вузов. Физика. - 1994. - N 8. - С.9-14.

7. Олемской А.И., Коплык И.В. Образование и эволюция новой фазы // Современные проблемы прикладной физики: Сб. научн. трудов / под ред. проф. В.В.Кулиша. - К.: НМК ВО, 1992. - С.128.

8. Olemskoi A.I., . Kop
Proceedings Contributed Papers of International Conference "Physics in Ukraine". - Kiev. 1993. - V.1. - P.75-78.

Коплык И.В. Неэргодическая теория пространственно-временной структуры неравновесной термодинамической системы.
Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-матеметических наук по специальности 01.04.07 - физика твердого тела, Сумский государственный университет, Сумы, 1994.
Защищается 8 научных работ, в которых развита суперсимметричная теория термодинамических систем, находящихся вдали от равновесия. Проведено совместное исследование гомогенных и гетерофазных флуктуаций в процессе фазового перехода. Описана эволюция неравновесной системы как в диссипативном, так и в реактивном режимах.

Ключові слова: параметр порядку, суперкорелятор, просторово-часова структура.

Koplyk I.V. Nonergodic theory of the space-time structure of a strong nonequilibrium thermodynamical systems.
Thesis on search the scientific degree of candidate of physics and mathematics for specialty 01.04.07 - Solid State Physics, Sumy State University, Sumy, 1994.
Eight scientific work are defended in which the supersymmetrical theory of thermodynamical systems located far from equilibrium has been developed. The joint research of homogeneous and heterophase fluctuations in the process of phase transition has been carried out. The evolution of nonequilibrium system in the dissipative and reactive regimes has been described.

Key words: order parameter, super correlator, spatial-time structure.