Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

М. Г. Васин, Калибровочная теория перехода жидкость–стекло в статическом и динамическом подходах, *ТМФ*, 2013, том 174, номер 3, 467–483

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8420>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.81.55.215

26 апреля 2023 г., 13:33:18

© 2013 г.

М. Г. Васин*

КАЛИБРОВОЧНАЯ ТЕОРИЯ ПЕРЕХОДА ЖИДКОСТЬ–СТЕКЛО В СТАТИЧЕСКОМ И ДИНАМИЧЕСКОМ ПОДХОДАХ

Предлагаются статическая и динамическая формулировки теории перехода жидкость–стекло, основанной на калибровочной теории стекла и флуктуационной теории фазовых переходов. Согласно предложенной теории переход жидкость–стекло представляет собой недостижимый фазовый переход второго рода, блокируемый преждевременным критическим замедлением релаксации калибровочного поля, вызванным фрустрацией системы. Показано, что предложенная теория на качественном уровне хорошо согласуется с экспериментальными данными.

Ключевые слова: переход жидкость–стекло, неравновесная динамика, калибровочные поля.

DOI: 10.4213/tmf8420

1. ВВЕДЕНИЕ

Формулировка теории перехода жидкость–стекло до сих пор остается наиболее интригующей проблемой физики конденсированного состояния. Множество физических систем, в которых наблюдается это явление независимо от их природы, позволяет сделать вывод, что оно носит универсальный характер и, как и фазовые переходы второго рода, определяется не столько микроскопическими деталями стеклующейся системы, сколько свойствами ее симметрии. С другой стороны, такая универсальность позволяет предположить, что переход жидкость–стекло является проявлением динамических свойств конденсированной системы и происходит исключительно по причине замедления диффузионной динамики. Поэтому до сих пор остается актуальным центральный вопрос физики стекольного состояния, который можно сформулировать следующим образом: является ли стекольный переход фазовым переходом, или его природа является исключительно динамической?

Согласно теории, представленной в настоящей работе, переход жидкость–стекло по своей природе близок фазовому переходу, но его характерные свойства определяются особенностями неравновесной динамики стеклующейся системы. Теория

* Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия. E-mail: dr_vasin@mail.ru

предполагает, что для осуществления стекольного перехода необходимы два основных условия: 1) начало структурного упорядочения системы, сопровождающегося возникновением локального порядка; 2) наличие фрустрации. Первое условие предполагает существование настоящего либо виртуального фазового перехода в нефрустрированной системе. Например, это может быть настоящий фазовый переход парамагнетик–ферромагнетик в нефрустрированной спиновой системе, либо виртуальный переход жидкость–политетраэдрический кристалл, невозможный по топологическим причинам (трехмерное пространство не может быть замощено политетраэдрами без введения геометрических фрустраций (дисклинаций)). Таким образом, предполагается, что сценарий перехода жидкость–стекло довольно прост и выглядит следующим образом: при приближении к некоторой критической температуре, в которой нарушается симметрия системы, начинают возрастать флуктуации параметра порядка. Однако в отличие от фазового перехода второго рода бесконечному росту этих флуктуаций препятствует фрустрация системы. Фрустрация приводит к возникновению в системе устойчивых вихрей (спиновых вихрей в случае спиновых систем или дисклинаций в переохлажденной жидкости [1], [2]), которые препятствуют росту упорядоченных областей. Это приводит к резкому замедлению кинетики и в конечном счете к замораживанию системы, не достигшей упорядоченного состояния.

Неравновесная динамика замедления вихревой системы, учитывающая взаимодействие этих вихрей, может быть описана с помощью калибровочной теории. Поэтому в основе рассмотренного подхода лежит калибровочная теория стекла, предложенная в конце прошлого века [1], [3]–[5]. Идеологически она близка ставшей сейчас популярной теории фрустрационно-ограниченных доменов [6], [7], однако представляется более удобной, поскольку с помощью использования калибровочных полей удастся избежать включения дальнедействующего взаимодействия в действие системы. Согласно предложенному подходу стекольный переход соответствует критической точке в подсистеме калибровочного поля. В настоящей работе рассмотрены как статический, так и динамический случаи, и показано, что поведение линейной и нелинейной восприимчивостей в обоих случаях качественно совпадает с экспериментальными результатами. Характерные свойства стекольного перехода такие, как соотношение Фогеля–Фулчера–Таммана для зависимости времени релаксации от температуры, температурная зависимость теплоемкости и плато на временной зависимости корреляционной функции параметра порядка, обнаруживаются с помощью применения функциональных методов неравновесной динамики. В заключение рассматривается связь представленной теории с теорией связанных мод и теорией фрустрационно-ограниченных доменов.

2. КАЛИБРОВОЧНАЯ МОДЕЛЬ

В качестве примера покажем сначала, каким образом формулируется калибровочная теория фрустрированной спиновой системы. Для этого рассмотрим трехмерную изотропную модель Гейзенберга, параметром порядка которой является вектор локальной намагниченности $\mathbf{S}$, инвариантную относительно преобразований симметрии $SO(3)$ -группы. Статическое действие этой модели многим хорошо знакомо и имеет вид

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \quad (1)$$

Рис. 1. Простейшая модель спинового стекла, описываемая гамильтонианом Эдвардса–Андерсона $H = \sum J_{ij} S_i S_j$, где $S_i = \pm 1$ – фрустрированный спин в i -м узле квадратной решетки, а $J_{ij} = \pm 1$. Эта система инвариантна относительно локального поворота фрустрированного спина.

где $J_{ij} = 1$ – взаимодействие между соседними спинами. Система, описываемая данной моделью, испытывает фазовый переход ферромагнетик–парамагнетик при некоторой температуре T_c . В непрерывном представлении статическое действие этой системы вблизи фазового перехода парамагнетик–ферромагнетик представляется как

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

где $\mathbf{s}$ – поле параметра порядка (локальная намагниченность $\mathbf{s} = \langle \mathbf{S} \rangle_{\delta V}$ единицы объема δV), $\beta = 1/(TK_B)$, K_B – постоянная Больцмана, $U(\mathbf{s}) = \mu^2 \mathbf{s}^2 + v s^4$, $\mu^2 = \alpha K_B (T - T_c)$ и α – некоторая константа.

Эта система пока не содержит замороженного беспорядка и не фрустрирована. Для того чтобы сделать модель фрустрированной, необходимо перейти от модели (1) к модели гейзенберговского стекла, в которой взаимодействие между спинами J_{ij} является случайной знакопеременной величиной ($\langle J \rangle = 0$) с некоторой заданной функцией распределения. Система, описываемая этой моделью, фрустрирована, и ключевым ее свойством является локальная инвариантность относительно поворотов фрустрированных спинов [3], [8]. На локальную (калибровочную) инвариантность рассматриваемой модели впервые обратил внимание Тулуз [9], после чего калибровочно-инвариантная теория была развита для описания спин-стекловых систем в работах [1], [3]–[5], [10], [11]. Иллюстрация локальной инвариантности фрустрированной системы приведена на рис. 1.

Калибровочное поле появляется при описании фрустрированной системы с помощью непрерывной теории. Лагранжиан непрерывной теории (2) инвариантен относительно глобального поворота вектора $\mathbf{s}(\bar{r}) \rightarrow \hat{R} \mathbf{s}(\bar{r})$, однако в отличие от лагранжиана дискретной теории он оказывается неинвариантным относительно локальных поворотов $\hat{R}$ фрустрированных векторов, положение которых произвольным образом зависит от координаты $\bar{r}$ $\mathbf{s}(\bar{r}) \rightarrow \hat{R}(\bar{r}) \mathbf{s}(\bar{r})$. При таком преобразовании производная $\partial_j \mathbf{s}$ уже не является инвариантной величиной, а преобразуется следующим образом:

$$\partial_j \mathbf{s}(\bar{r}) \rightarrow \hat{R}(\bar{r}) \partial_j \mathbf{s}(\bar{r}) + (\partial_j \hat{R}(\bar{r})) \mathbf{s}(\bar{r}).$$

Так как в лагранжиане (2) присутствуют производные, то он также не будет инвариантным относительно таких преобразований. По этой причине для воплощения идеи о калибровочной инвариантности вводится новый оператор D_j , инвариантный относительно локальных преобразований

$$D_j \mathbf{s}(\bar{r}) \rightarrow \hat{R}(\bar{r}) D_j \mathbf{s}(\bar{r}). \quad (3)$$

Такой оператор называют *ковариантной производной*. Допустим, что он имеет следующий вид: $D_i = \partial_i + \hat{A}_i(\bar{r})$, где $\hat{A}_i$ – некоторая функция от координаты $\bar{r}$, которая определяется требованием ковариантности (инвариантности) (3): $(\partial_i \hat{R}(r))\mathbf{s} = -[\hat{A}_i \hat{R}]\mathbf{s}$. Теперь лагранжиан

$$L = \frac{1}{2}(D_i \mathbf{s})(D_i \mathbf{s}) + U(\mathbf{s})$$

становится инвариантным относительно калибровочных преобразований, но при этом в теорию вводится новое поле $A_j(\bar{r})$. Кроме того, для того чтобы это поле могло существовать самостоятельно, необходимо включить в лагранжиан его кинетический член, не нарушив при этом исходной локальной симметрии. Простейшим калибровочно-инвариантным членом является

$$L_A = -\frac{1}{4}F_{a\mu\nu}^2, \quad \text{где} \quad F_{a\mu\nu} = \partial_\mu A_{a\nu} - \partial_\nu A_{a\mu} + g\varepsilon^{abc}A_{b\mu}A_{c\nu},$$

g – индекс Франка, ε_{abc} – тензор Леви-Чивиты. В результате калибровочно-инвариантное действие имеет вид [3], [5], [11]

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

При $\mu^2 > 0$ действие локально-инвариантно относительно $SO(3)$ -преобразований и $\langle \mathbf{s} \rangle = 0$. Однако при $\mu^2 < 0$ симметрия частично нарушается, поскольку система должна “выбрать” лишь одно состояние из всех эквивалентных с минимумом энергии $U(\mathbf{s})$, находящихся на сфере $|\mathbf{s}| = i\mu/\sqrt{2v}$. В результате система уже не будет симметричной относительно преобразований $SO(3)$ -группы вращений, но останется симметричной относительно преобразований $SO(2)$ -группы вращений вокруг выбранной оси. Разложение поля локальной намагниченности $\mathbf{s}$ около одного из вакуумных состояний, например $\langle \mathbf{s} \rangle_0 = (0, 0, i\mu/\sqrt{2v})$, по малому параметру $\phi = s - i\mu/\sqrt{2v}$ с использованием свойств калибровочного преобразования позволяет переписать действие (4) в форме функционала двух массивных векторных бозонов $A_{\kappa\mu}$ ($\kappa = 1, 2$) с массами $M_0 = ig\mu/\sqrt{2v}$, одного безмассового векторного бозона $A_{3\mu}$ и скалярного поля ϕ :

$$S = \beta \int \left[\frac{1}{2}(\partial_\mu \phi)^2 + 2\mu^2 \phi^2 + \frac{g^2 \mu^2}{4v} A_{\kappa\mu} A_{\kappa\mu} + \frac{1}{4}F_{a\mu\nu}^2 + v\phi^4 + \frac{g^2}{2}\phi^2 A_{a\mu} A_{a\mu} \right] d\mathbf{r}. \quad (5)$$

Важным свойством этой модели является существование в ней солитоноподобных вихревых решений. Эти вихри представляют собой подвижные источники калибровочного поля и находятся в тепловом равновесии между собой [1].

Полученный лагранжиан (5) описывает систему, находящуюся в низкотемпературном состоянии $T < T_c$, с нарушенной глобальной $SO(3)$ -симметрией. Во флуктуационной области температур $T \gtrsim T_c$ такое представление лагранжиана также будет справедливым, поскольку флуктуации параметра порядка можно рассматривать как упорядоченные области, масштаб которых ограничен присутствием подвижных термоиндуцированных вихрей, концентрация которых определяется корреляционным радиусом калибровочного поля. Другими словами, флуктуации параметра порядка и калибровочного поля дуальны друг другу, и процесс спинового упорядочения можно рассматривать как процесс упорядочения в системе вихрей. Если предполагать калибровочное поле свободным, то выражение (5) связывает масштаб критических флуктуаций с характерным расстоянием между вихрями так, что

эффективный линейный размер критических флуктуаций поля параметра порядка пропорционален корреляционному радиусу калибровочного поля. При приближении T к T_c^+ этот корреляционный радиус растет, а плотность вихрей уменьшается. В результате в $T = T_c$ калибровочное поле становится безмассовым (плоским), как и поле параметра порядка, а вихри исчезают. Таким образом, теория с лагранжианом (5) хотя и является локально-инвариантной, все еще описывает фазовый переход второго рода и не содержит в себе перехода жидкость–стекло.

В случае, когда температура системы выше температуры стеклования, кажется вполне естественным рассматривать калибровочное поле как динамическое, постоянно поддерживающее калибровочную инвариантность сильно неоднородной и постоянно меняющейся во времени жидкой системы. Система термоиндуцированных вихрей должна при этом находиться в тепловом равновесии [1]. Для того чтобы при $T < T_c$ система обладала свойствами стекла, в теорию необходимо ввести замороженный беспорядок, фрустрирующий систему. Поскольку фрустрация приводит к вырождению основного состояния системы, естественно предположить, что при $T > T_c$ замороженный беспорядок будет приводить к возникновению дополнительных вихрей, средняя плотность которых I_0 в отличие от термоиндуцированных вихрей не зависит от температуры и остается отличной от нуля при $T = T_c$. Такие вихри могут быть введены в теорию как поле случайных источников калибровочного поля $J_{a\mu}$:

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

Поскольку нами предполагается, что при $T > T_c$ система вихрей находится в тепловом равновесии [1], можно выполнить усреднение по J_μ^a :

$$\mathcal{Z} = \int \left[\int \exp \left(-S - \frac{1}{4} \int I_0^{-1} J_\mu^{a2} d\mathbf{r} \right) D J_\mu^a \right] \mathfrak{D}\phi \mathfrak{D} A_\mu^a,$$

где $\int(\cdot) \mathfrak{D}x$ – обозначение континуального интегрирования. Эта процедура приводит к появлению дополнительного вклада в “массу” калибровочного поля A_μ^a , которая принимает вид

$$M^2 = \frac{\mu^2 g^2}{4v} - I_0. \quad (6)$$

В результате действие для фрустрированной системы записывается следующим образом:

$$S = \beta \int \left[\frac{1}{2} (\partial_\mu \phi)^2 + 2\mu^2 \phi^2 + M^2 A_{\kappa\mu} A_{\kappa\mu} + \frac{1}{4} (D_a A_{\mu\nu})^2 + v\phi^4 + \frac{g^2}{2} \phi^2 A_{a\mu} A_{a\mu} \right] d\mathbf{r}. \quad (7)$$

Полученная перенормировка массы калибровочного поля влияет на поведение системы во флуктуационной области, поскольку сдвигает особенность $M^2 = 0$ в область температур, находящихся выше температуры виртуального фазового перехода T_c . Если полагать, что вблизи фазового перехода $\mu^2 = \alpha K_V (T - T_c)$, то согласно выражению (6) корреляционный радиус калибровочного поля расходится при $T_g = T_c + 4I_0 v / (\alpha K_V g^2)$. В работе [12] было показано, что это приводит к критическому замедлению всей системы в T_g . Таким образом, фрустрация подавляет рост флуктуаций и корреляционного радиуса поля параметра порядка ϕ и приводит к замораживанию системы в неупорядоченном состоянии. При этом величина T_g может быть интерпретирована как температура перехода жидкость–стекло. Ниже это предположение будет проверено.

Рис. 2. Графическое представление функций Грина: G_0 (а), $\Delta_{\mu\nu}$ (б), и вершин, входящих в действие (в–е).

3. АНАЛИЗ ТЕОРИИ В СТАТИЧЕСКОМ СЛУЧАЕ

Поскольку выше было предположено, что при температурах $T > T_c$ система вихрей находится в тепловом равновесии, рассмотрим прежде всего квазиравновесный статический случай. Как было показано ранее, усреднение по случайному полю J_μ^a приводит к сдвигу температуры перехода из T_c в T_g . В этом случае перенормируется масса калибровочного поля M , а пропагаторы присутствующих в теории полей записываются в следующем виде:

$$G_0(k) = \frac{1}{k^2 + \mu^2}, \quad \Delta_{\mu\nu} = \frac{\delta_{\mu\nu} + k_\mu k_\nu / k^2}{k^2 + M^2}.$$

Диаграммное представление этих функций Грина и вершин приведено на рис. 2.

Здесь и далее выберем параметризацию модели таким образом, чтобы $T_g K_B = 1$. Вблизи критической точки $M \rightarrow 0$ коррелятор калибровочного поля аналогичен пропагатору безмассового фотона в квантовой электродинамике:

$$\Delta_{\mu\nu} \simeq \frac{\delta_{\mu\nu}}{k^2}.$$

Эта теория перенормируема, поэтому можно исследовать ее критические свойства при $T \rightarrow T_g^+$.

Приведем канонические размерности величин, входящих в теорию.

ТАБЛИЦА 1

F	k	ϕ	A	μ^2	M^2	g	v
$d_k[F]$	1	$-1 - d_k/2$	$-1 - d_k/2$	$d_k - 2$	$d_k - 2$	0	0

Процедура перенормировки лишь уточняет эти размерности и приводит к замене канонических размерностей на критические: $\Delta[F] = d[F] + O[F](\varepsilon)$, где $\varepsilon = 4 - d_k$, и d_k – критическая размерность пространства.

Процедура перенормировки выполняется с помощью стандартных методов [13]. Предполагается, что поля ϕ и A медленно меняются так, что их фурье-образы имеют только длинноволновые компоненты: $|k| < k_0$. На первом шаге ренормгрупповых (РГ) преобразований проводится сглаживание полей – статистическая сумма интегрируется по компонентам поля в ограниченном по импульсам интервале $\Lambda k_0 < k < k_0$, где $\Lambda \ll 1$ – параметр регуляризации (импульсное обрезание). Затем конфигурация поля снова приводится к прежнему виду, для чего изменяются масштабы координат: $k \rightarrow \Lambda^{-1}k$, и восстанавливается амплитуда флуктуаций посредством введения дополнительного фактора Z . Предполагается, что эта процедура сохраняет действие системы в первоначальном виде; в этом случае теория является мультипликативно перенормируемой. Можно проверить, что рассматриваемая

Рис. 3. Графическое представление однопетлевых вкладов в перенормировку действия.

теория удовлетворяет этому критерию. В результате процедуры перенормировки получается эффективное действие S_Λ с перенормированными параметрами (Z_v , Z_μ , Z_M , Z_g и Z_{g^2}), которые называются константами перенормировки и зависят от параметра обрезания Λ ; на втором этапе проводится обратное масштабирование полей (Z_A , Z_ϕ) и координат для восстановления начального масштаба обрезания k_0 . Тогда перенормированные параметры модели имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}\mu^{2(R)} &= Z_\mu^2 Z_\phi^2 \Lambda^d = \Lambda^{-2} Z_{\mu^2}, & M^{2(R)} &= Z_M^2 Z_A^2 \Lambda^d = \Lambda^{-2} Z_{M^2}, \\ v^{(R)} &= Z_v Z_\phi^4 \Lambda^{3d} = \Lambda^{-\varepsilon} Z_v, \\ g^{(R)} &= Z_g Z_A^3 \Lambda^{2d+1} = \Lambda^{-\varepsilon/2} Z_g, & g^{2(R)} &= Z_g^2 Z_A^4 \Lambda^{3d} = Z_g^2 Z_A^2 Z_\phi^2 \Lambda^{3d+3z} = \Lambda^{-\varepsilon} Z_{g^2}.\end{aligned}$$

Предполагается, что действие S инвариантно относительно масштабных преобразований в критической точке.

Вблизи $M^2 = 0$ ($T \gtrsim T_g$) калибровочное поле становится “безмассовым”, при этом скалярное поле остается 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 фейнмановские диаграммы, содержащие пропагаторы поля, масса которого значительно превышает внешний импульс, обратно пропорциональны степени этой массы и дают конечный вклад в перенормировку [14].

На рис. 3 приведены некоторые графы, дающие логарифмически-расходящиеся вклады в перенормированную теорию.

Рассмотрим в качестве примера перенормировку вершины M^2 . Ограничимся использованием однопетлевого приближения; оказывается, что этого вполне достаточно для демонстрации всех характерных особенностей теории. В этом случае перенормировка вершины M^2 имеет вид

$$\begin{aligned}Z_{M^2} \delta_{\mu\nu} &\simeq M^2 \delta_{\mu\nu} - \frac{6M^2 g^2}{4(2\pi)^{d_k}} \int_{\Lambda k_0}^{k_0} \Delta_{\mu\lambda}(k) \Delta_{\lambda\nu}(k) dk \simeq \\ &\simeq M^2 \delta_{\mu\nu} - \frac{3M^2 g^2}{(2\pi)^{d_k}} \frac{\delta_{\mu\nu} d_k \pi^{d_k/2}}{\Gamma(1 + d_k/2)} \int_{\Lambda k_0}^{k_0} \frac{k^{d_k-1}}{k^4} dk.\end{aligned}$$

Можно видеть, что интегрирование в этом выражении приводит к логарифмически-расходящемуся вкладу в перенормировку M^2 , когда размерность $d_k = 4$. В этом случае получаем следующее выражение для перенормировки M^2 :

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

где $\xi = \ln(1/\Lambda)$ – логарифмически-расходящийся множитель. Аналогично получаем другие слагаемые перенормированного действия:

$$\mu^{2(R)} = e^{2\xi} Z_{\mu^2} \simeq e^{2\xi} \left[\mu^2 - \frac{M^2 g^2}{8\pi^2} \xi \right], \quad g^{(R)} = e^{\varepsilon\xi/2} Z_g \simeq e^{\varepsilon\xi/2} \left[g - \frac{g^4}{8\pi^2} \xi \right], \quad (9)$$

$$g^{2(R)} = e^{\varepsilon\xi} Z_{g^2} \simeq e^{\varepsilon\xi} \left[g^2 - \frac{g^4}{4\pi^2} \xi \right], \quad v^{(R)} = e^{\varepsilon\xi} Z_v \simeq e^{\varepsilon\xi} \left[v - \frac{g^4}{8\pi^2} \xi \right]. \quad (10)$$

Таким образом, в однопетлевом приближении РГ имеет вид

$$\frac{\partial \ln(M^2)}{\partial \xi} = 2 - \frac{3g^2}{8\pi^2}, \quad \frac{\partial \ln(\mu^2)}{\partial \xi} = 2 - \frac{M^2 g^2}{8\mu^2 \pi^2} \approx 2, \quad (11)$$

$$\frac{\partial \ln(g^2)}{\partial \xi} = \varepsilon - \frac{g^2}{4\pi^2}, \quad \frac{\partial \ln v}{\partial \xi} = \varepsilon - \frac{g^4}{8v\pi^2}. \quad (12)$$

Из условия неподвижности критической точки $\partial \ln(g^2)/\partial \xi = 0$, $\partial \ln(v)/\partial \xi = 0$ следует, что $g^2 = 4\pi^2 \varepsilon$, а $v = g^2/2$. Кроме того, можно видеть, что

$$M^2 = \frac{\alpha K_B g^2}{4v} (T - T_g) \approx e^{2\xi}. \quad (13)$$

Таким образом, в T_g калибровочное поле становится безмассовым, в то время как поле локальной намагниченности имеет “массу” μ . Анализ этой модели вблизи T_g позволяет сделать вывод, что эта температура – не что иное, как температура перехода жидкость–стекло. Прежде всего из формулы (7) видно, что линейная восприимчивость $\chi_L = \partial \langle \phi \rangle / \partial h \sim \mu^{-2} = g^2 / (4I_0 v)$ (h – внешний источник поля ϕ) конечна в $T = T_g$. Аналогичная простая оценка показывает, что корреляционный радиус $r_{\text{cor}} \sim \sqrt{g^2 / 4I_0 v}$ также конечен. Интересно, что в отсутствие фрустрации ($I_0 = 0$) линейная восприимчивость и корреляционный радиус будут расходиться в T_g , что представляется вполне естественным, поскольку в этом случае $T_g = T_c$, и стекольный переход становится фазовым переходом второго рода.

С другой стороны, нелинейная восприимчивость $\chi_N = \partial^3 \langle \phi \rangle / \partial h^3 = \langle \phi^4 \rangle$ [15] расходится в T_g из-за расходящегося вклада от петли поля A (см. ниже рис. 7):

$$\chi_N \sim Z_v \sim e^{\varepsilon\xi} \sim (T - T_g)^{-\gamma}, \quad (14)$$

где $\gamma \approx \varepsilon / (2 - 3\varepsilon/2)$. Таким образом, получаем оценку $\gamma \approx 2$ при $\varepsilon = 1$.

Использование предложенной теории позволяет определить температурную зависимость теплоемкости при $T \rightarrow T_g^+$:

$$\begin{aligned} c_p &= \frac{dQ}{dT} \approx -\frac{K_B T}{Z} \frac{dZ}{dT} \approx \\ &\approx V \left(\frac{\partial}{\partial T} - \frac{1}{T} \right) \left(\frac{\alpha g^2}{4v} (T - T_g) \int_k \langle A_{ij} A_{ij} \rangle_{\mathbf{k}} + \alpha (T - T_c) \int_k \langle \phi \phi \rangle_{\mathbf{k}} + 3v \left[\int_k \langle \phi \phi \rangle_{\mathbf{k}} \right]^2 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{g^2}{2} \int_k \langle \phi \phi \rangle_{\mathbf{k}} \int_k \langle A_{ij} A_{ij} \rangle_{\mathbf{k}} + \frac{3g^2}{4} \left[\int_k \langle A_{ij} A_{ij} \rangle_{\mathbf{k}} \right]^2 \right), \end{aligned}$$

где $\int_k(\cdot) = \int_{-\infty}^{\infty}(\cdot) d\mathbf{k}$. Корреляционные функции имеют вид $\langle \phi \phi \rangle_{\mathbf{k}} = (k^2 + m^2)^{-1}$, $\langle A_{ij} A_{ij} \rangle_{\mathbf{k}} = (k^2 + M^2)^{-1}$, где $m \propto (T - T_c)^{1/2}$, $M \propto (T - T_g)^{1/2}$. Поскольку система сохраняет разупорядоченную структуру при стекловании, предполагается, что Z и V слабо зависят от температуры в области T_g . Таким образом, вблизи T_g слагаемые с $\partial \langle A_{ij} A_{ij} \rangle / \partial T \propto (T - T_g)^{-1/2}$ доминируют над другими, поскольку расходятся при T_g в отличие от слагаемых, содержащих только $\langle \varphi \varphi \rangle$. В результате $c_p \propto (T - T_g)^{-1/2}$.

Полученные результаты показывают, что T_g является критической точкой теории, но не позволяют утверждать, что это именно температура перехода жидкость–стекло. Корреляционный радиус поля A расходится в T_g , однако физический смысл этого не вполне ясен. Кроме того, полученная температурная зависимость теплоемкости расходится в T_g , что не характерно для переходов жидкость–стекло. Можно предположить, что это является результатом неучета динамических особенностей процесса стеклования. Ниже будет проведен анализ критической динамики теории вблизи T_g , который подтвердит это предположение и покажет, что в T_g действительно происходит переход жидкость–стекло.

Связь с теорией фрустрационно-ограниченных доменов. Предложенная теория идеологически близка механизму релаксации, предложенному Стиллинжером [16], и теории “фрустрационно-ограниченных доменов”, предложенной Кивелсоном и Тайрусом [6]. В этих теориях геометрическая фрустрация представляется в виде источников напряжения, дающих вклад в свободную энергию системы и препятствующих росту упорядоченных областей в системе.

Можно показать, что модель (7) имеет прямое отношение к теории фрустрационно-ограниченных доменов. Для этого не следует проводить усреднение по полю J , как это было сделано выше. Предположим, что источники произвольным образом расположены в системе, и просуммируем действие (7) по полю $A_{a\mu}$. Для упрощения сделаем сильное приближение, заключающееся в том, что релаксация системы определяется только кинетикой вихревой подсистемы, и при этом в выражении (7) можно пренебречь неквадратичными членами. Тогда функциональное интегрирование по A_{μ}^a

$$Z_A = \int \mathfrak{D} A_{a\mu} \exp \left[- \int \left(\frac{1}{2} A_{a\mu} \Delta_{\mu\nu}^{-1} A_{a\nu} + J_{a\mu} A_{a\mu} \right) d\mathbf{k} \right]$$

приводит к

$$Z_A \propto \exp \left[\frac{1}{2} \int J_{a\mu} k^{-2} J_{a\mu} d\mathbf{k} \right] = \exp \left[\frac{1}{2} \int J_{a\mu}(\mathbf{r}) |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} J_{a\mu}(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \right].$$

В результате действие описываемой системы может быть переписано в следующем виде:

$$S = S_{\phi} + S_J,$$

где S_{ϕ} – часть действия, определяемая только скалярным полем, а

$$S_J \approx C_1 \sum_{i,j} J_{a\mu}(\mathbf{r}_i) J_{a\mu}(\mathbf{r}_j) - C_2 \sum_{i \neq j} \frac{J_{a\mu}(\mathbf{r}_i) J_{a\mu}(\mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

($J_{a\mu}(\mathbf{r}_i)$ – источник, находящийся в узле i с координатами $\mathbf{r}_i$) – вклад, вносимый в систему фрустрацией [7]. Здесь первое слагаемое – вклад от кора вихря (дисклинации), второе – от взаимодействия вихрей [17]. Согласно теории Кивелсона–Тайруса конкуренция этих двух вкладов определяет свойства стеклообразующей жидкости вблизи перехода жидкость–стекло.

4. АНАЛИЗ ТЕОРИИ В ДИНАМИЧЕСКОМ СЛУЧАЕ

Естественно, что статическая теория не может в полной мере описывать переход жидкость–стекло, так как в ней никак не учитывается динамическая неоднородность задачи, играющая очень важную роль. Для исправления этого недостатка

Рис. 4. Графическое представление функций Грина: G_0^K (а), G_0^A (б), G_0^R (в), $\Delta_{\mu\nu}^K$ (г), $\Delta_{\mu\nu}^A$ (д), $\Delta_{\mu\nu}^R$ (е).

Рис. 5. Графическое представление вершин (16), присутствующих в действии теории.

можно исследовать неравновесную динамику системы вблизи T_g с помощью функциональных методов неравновесной динамики [18]. Это приводит к следующему представлению статистической суммы системы:

$$Z = \int e^{-S^*} \mathfrak{D}\vec{\phi} \mathfrak{D}\vec{A}_{a\mu}, \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} S^* = & \frac{1}{2} \int [\vec{\phi}(t, \mathbf{r}) \hat{G}^{-1}(t - t', \mathbf{r} - \mathbf{r}') \vec{\phi}(t', \mathbf{r}') + \\ & + \vec{A}_{a\mu}(t, \mathbf{r}) \hat{\Delta}_{\mu\nu}^{-1}(t - t', \mathbf{r} - \mathbf{r}') \vec{A}_{a\nu}(t', \mathbf{r}')] d\mathbf{r} d\mathbf{r}' dt dt' + \\ & + \int [g\varepsilon_{abc}(\partial_\mu \bar{A}_{a\nu}) A_{b\mu} A_{c\nu} + g\varepsilon^{abc}(\partial_\mu A_{a\nu}) \bar{A}_{b\mu} A_{c\nu} + g\varepsilon_{abc}(\partial_\mu A_{a\nu}) A_{b\mu} \bar{A}_{c\nu} + \\ & + g^2 \varepsilon_{abc} \varepsilon_{aij} \bar{A}_{b\mu} A_{c\nu} A_{i\mu} A_{j\nu} + g^2 \bar{A}_{a\mu} A_{a\mu} \phi^2 + g^2 (A_{a\mu})^2 \bar{\phi} \phi + v 4 \bar{\phi} \phi^3] d\mathbf{r} dt, \end{aligned} \quad (16)$$

$\vec{\phi} = \{\bar{\phi}, \phi\}$ и $\vec{A}_\mu^a = \{\bar{A}_\mu^a, A_\mu^a\}$ – векторы, компоненты которых именуются соответственно квантовой и классической [18]. Матрицы G^{-1} и $\Delta_{\mu\nu}^{-1}$ – обратные соответствующим матрицам функций Грина, имеющим вид (см. рис. 4, 5)

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} G_0^K & G_0^A \\ G_0^R & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\Delta}_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} \Delta_{\mu\nu}^K & \Delta_{\mu\nu}^A \\ \Delta_{\mu\nu}^R & 0 \end{pmatrix}, \quad (17)$$

где в импульсном представлении

$$G_0^{R(A)}(k, \omega) = \frac{1}{k^2 + \mu^2 \pm i\Gamma_\phi \omega}, \quad G_0^K(k, \omega) = \frac{2\Gamma_\phi}{(k^2 + \mu^2)^2 + \Gamma_\phi^2 \omega^2}, \quad (18)$$

Γ_ϕ – кинетический коэффициент поля локальной намагниченности. При $M \rightarrow 0$

$$\Delta_{\mu\nu}^{R(A)}(k, \omega) \simeq \frac{\delta_{\mu\nu}}{k^2 \pm i\Gamma_A \omega}, \quad \Delta_{\mu\nu}^K(k, \omega) \simeq \frac{2\Gamma_A \delta_{\mu\nu}}{k^4 + \Gamma_A^2 \omega^2}, \quad (19)$$

где Γ_A – кинетический коэффициент калибровочного поля.

Рис. 6. Петля корреляционной функции калибровочного поля, дающая логарифмически расходящийся вклад.

4.1. Исследование критической динамики. Критическое поведение системы вблизи T_g может быть рассмотрено с помощью методов исследования критической динамики. Это было сделано недавно в работах [12], [19]. Было показано, что взаимодействие поля локальной намагниченности с калибровочным полем (рис. 6) играет очень важную роль в представленной теории.

Это становится ясным, когда мы рассматриваем перенормировку вершины Γ_ϕ . Вклад от этой вершины пропорционален времени релаксации локальной намагниченности и поэтому определяет кинетику стекольного перехода: петля безмассового калибровочного поля A_μ^a , приведенная на рис. 6, дает логарифмически-расходящийся вклад $\sim \ln(1/\Lambda)\delta(\omega)$ в перенормировку этой вершины. Этот вклад определяет расходимость Γ_ϕ , при этом петля массивного поля локальной намагниченности дает конечный множитель $4I_0v/g^2$ перед расходящимся логарифмом:

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

где t_o – время наблюдения за системой. Благодаря этому вкладу в задаче естественным образом появляется иерархия времен релаксации, которая определяется временным масштабом $t \sim \Gamma_\phi g^2/(4I_0 v)$. Задача делится на две предельные подзадачи с автономными РГ, соответствующие малым временным масштабам $t_o \ll \Gamma_\phi g^2/(4I_0 v)$ и большим временным масштабам $t_o \gg \Gamma_\phi g^2/(4I_0 v)$. Не зависящее от масштаба общее решение данной РГ-задачи представляется в виде сшивки двух решений, соответствующих предельным случаям.

На больших временных масштабах $t_o \gg \Gamma_\phi g^2/(4I_0 v)$ вклад в перенормировку Γ_ϕ логарифмически расходится. Таким образом, в однопетлевом приближении РГ рассматриваемой теории имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln(\Gamma_\phi)}{\partial \xi} &= \frac{g^4}{\pi^2}, & \frac{\partial \ln(\Gamma_A)}{\partial \xi} &= -\varepsilon + \frac{3g^4}{4\pi^2} + \frac{g^2}{8\pi^2}, \\ \frac{\partial \ln(M^2)}{\partial \xi} &= 2 - \frac{3g^2}{8\pi^2}, & \frac{\partial \ln(\mu^2)}{\partial \xi} &= 2 - \frac{M^2 g^2}{8\mu^2 \pi^2} \approx 2, \\ \frac{\partial \ln(g^2)}{\partial \xi} &= \varepsilon - \frac{g^2}{4\pi^2}, & \frac{\partial \ln v}{\partial \xi} &= \varepsilon - \frac{g^4}{8v\pi^2}. \end{aligned} \quad (20)$$

Так же, как и в статическом случае, из условия существования неподвижной критической точки $\partial \ln(g^2)/\partial \xi = 0$, $\partial \ln(v)/\partial \xi = 0$ мы получаем $g^2 = 4\pi^2 \varepsilon$ и $v = g^2/2$.

На малых масштабах времени $t_o \ll \Gamma_\phi g^2/(4I_0 v)$ вклад в перенормировку Γ_ϕ пренебрежимо мал. В этом случае РГ-уравнения имеют тот же вид, что и (20), за

исключением первого уравнения:

$$\frac{\partial \ln(\Gamma_\phi)}{\partial \xi} = 0. \quad (21)$$

Для того чтобы “сшить” решения (20) и уравнение (21), необходимо проанализировать перенормировку в области $t_o \sim \Gamma_\phi g^2 / (4I_0 v)$ и найти соответствующую сшивающую функцию $\Phi(\xi)$, как, например, это было сделано в работах [12], [19]–[22]:

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

где $\xi \sim 1$. Сшивающая функция, которая дает единицу на больших временных масштабах $\xi \gg 1$ и нуль на малых временных масштабах $\xi \ll 1$, может быть выбрана в следующем виде:

$$\Phi(\xi) = 1 - \Lambda^z = 1 - e^{-z\xi},$$

где $z \approx 2$ – динамический критический индекс [13], [23]. В результате

$$\tau_{\text{rel}} = \Gamma_\phi \propto \exp\left(\frac{2vg^2 T_g}{\alpha \pi^2 (T - T_g)}\right). \quad (22)$$

Таким образом, с помощью техники Келдыша и методов критической динамики удается показать, что во фрустрированной системе при T_g происходит критическое замедление релаксационных процессов, которое может быть описано законом Фогеля–Фулчера–Таммана.

Заметим, что в отсутствие фрустрации ($I_0 \rightarrow 0$) температура замерзания системы совпадает с температурой фазового перехода. Диаграммы с петлями полей ϕ и $\bar{\phi}$ становятся логарифмически-расходящимися, и система испытывает фазовый переход парамагнетик–ферромагнетик, который описывается стандартной критической динамикой [24].

4.2. Оценка температурной зависимости теплоемкости. Функции линейной и нелинейной восприимчивостей в динамической теории совпадают с полученными в статической теории. Тем не менее динамическая теория помогает получить лучший результат при оценке теплоемкости системы при $T \rightarrow T_g^+$. Для проведения анализа удобно рассмотреть корреляционную функцию в (t, k) -представлении и принять во внимание, что $\langle \bar{\phi}\phi \rangle = \langle \bar{A}_{ij} A_{ij} \rangle = 0$. В результате получаем

$$\begin{aligned} c_p = \frac{dQ}{dT} \approx & -\frac{K_B T}{Z} \frac{dZ}{dT} \approx \frac{V \alpha g^2}{4v} \left(\frac{\partial}{\partial T} - \frac{1}{T} \right) \left[(T - T_g) \int_k \langle \bar{A}_{ij} A_{ij} \rangle_{t=0} \right] + \\ & + V \alpha \left(\frac{\partial}{\partial T} - \frac{1}{T} \right) \left[(T - T_c) \int_k \langle \bar{\phi}\phi \rangle_{t=0} \right] + \\ & + V \left(\frac{\partial}{\partial T} - \frac{1}{T} \right) \left[g^2 \int_k \langle \bar{\phi}\phi \rangle_{t=0} \int_k \langle A_{ij} A_{ij} \rangle_{t=0} + \right. \\ & + g^2 \int_k \langle \phi\phi \rangle_{t=0} \int_k \langle \bar{A}_{ij} A_{ij} \rangle_{t=0} + 12v \int_k \langle \bar{\phi}\phi \rangle_{t=0} \int_k \langle \phi\phi \rangle_{t=0} + \\ & \left. + 3g^2 \int_k \langle \bar{A}_{ij} A_{ij} \rangle_{t=0} \int_k \langle A_{ij} A_{ij} \rangle_{t=0} \right], \end{aligned}$$

где опять же, поскольку система сохраняет разупорядоченную структуру при стекловании, предполагается, что Z и V слабо зависят от температуры в области T_g . Из

выражений (18) и (19) несложно получить, что

$$\langle \bar{\phi}\phi \rangle_t = \theta(t) \frac{e^{-t\varepsilon_k(\mu)/\Gamma_\varphi(T)}}{\Gamma_\varphi(T)}, \quad \langle \phi\phi \rangle_t = \frac{e^{-|t|\varepsilon_k(\mu)/\Gamma_\varphi(T)}}{\varepsilon_k(\mu)}, \quad (23)$$

$$\langle \bar{A}_{ij}A_{ij} \rangle_t = \theta(t) \frac{e^{-t\varepsilon_k(M)/\Gamma_A(T)}}{\Gamma_A(T)}, \quad \langle A_{ij}A_{ij} \rangle_t = \frac{e^{-|t|\varepsilon_k(M)/\Gamma_A(T)}}{\varepsilon_k(M)}, \quad (24)$$

где $\varepsilon_k(x) = k^2 + x^2$. Таким образом,

$$\int_k \langle \bar{\phi}\phi \rangle_{t=0} = \frac{1}{V\Gamma_\varphi(T)}, \quad \int_k \langle \bar{A}_{ij}A_{ij} \rangle_{t=0} = \frac{1}{V\Gamma_A(T)}.$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} c_p \approx & \frac{\alpha g^2}{4v\Gamma_A} + \alpha \left(\frac{\partial}{\partial T} - \frac{1}{T} \right) \left[\frac{(T - T_c)}{\Gamma_\varphi(T)} \right] + \\ & + \left(\frac{\partial}{\partial T} - \frac{1}{T} \right) \left[\frac{g^2}{\Gamma_\varphi(T)} \int_k \varepsilon_k^{-1}(M) + \frac{g^2}{\Gamma_A(T)} \int_k \varepsilon_k^{-1}(\mu) + \right. \\ & \left. + \frac{3g^2}{\Gamma_A(T)} \int_k \varepsilon_k^{-1}(M) + \frac{12v}{\Gamma_\varphi(T)} \int_k \varepsilon_k^{-1}(\mu) \right]. \end{aligned}$$

Поскольку система находится вблизи T_g , последнее слагаемое дает наиболее значимый вклад в теплоемкость. Рассматривая только этот вклад, можно получить качественный вид температурной зависимости теплоемкости вблизи перехода жидкость–стекло:

$$c_p(T) \propto \frac{\partial}{\partial T} [e^{-CT_g/(T-T_g)}] = \frac{e^{-CT_g/(T-T_g)}}{(T - T_g)^2} CT_g,$$

где $C = 2vg^2/(\alpha\pi^2)$. График полученной зависимости приведен на рис. 7: можно видеть характерное резкое повышение теплоемкости при $T \gtrsim T_g$, спадающее в T_g , свойственное для стекующих систем.

С помощью предложенной теории несложно дать простое качественное объяснение такой температурной зависимости теплоемкости: система близка к T_c , при приближении к которой флуктуации растут, а следовательно, растет и теплоемкость; однако, поскольку “вмороженные” фрустрации не позволяют развиваться флуктуациям до размеров, превышающих некоторый определяемый ими конечный масштаб, теплоемкость не расходится в T_g , а достигает лишь конечного максимума при $T_{\max} > T_g$, после которого убывает (рис. 7). Эта физическая картина аналогична картине, наблюдаемой при фазовом переходе второго рода в системе, ограниченной конечным объемом.

4.3. Вывод уравнения теории связанных мод в представлении Цванцига–Мори. Поскольку представленная теория имеет общий характер, можно установить ее связь с другими хорошо известными теоретическими подходами к описанию переходов жидкость–стекло. Наиболее популярной среди них является теория связанных мод, которая в представлении Цванцига–Мори имеет форму уравнения движения парной корреляционной функции. Центральная проблема этой теории заключается в определении функции памяти, являющейся ядром интегрально-дифференциального уравнения.

Рис. 7. Качественное представление температурной функции нелинейной восприимчивости $\chi_N \propto 1/(T - T_g)^\gamma$ и линейной восприимчивости $\chi_L \propto 1/(T - T_c)$. Функция χ_L не описывается представленной теорией в области температур $T < T_g$ (а). Качественное представление температурной зависимости теплоемкости вблизи T_g , полученное из статической (1) и динамической (2) теорий (б).

В работе [12] было показано, что в однопетлевом приближении корреляционная функция поля ϕ может быть представлена как сумма невозмущенного и кооперативного слагаемых:

$$\langle \phi \phi \rangle_{t, k=0} = G^K(t) \simeq G_0^K(t) + \frac{2I_0 g^2 v \ln(L/a_0)}{\Gamma_\phi \pi^2} \int_0^t G_0^K(t') e^{-4I_0 v |t-t'|/\Gamma_\phi g^2} dt', \quad (25)$$

где L – размер системы, а a_0 – параметр порядка межатомного расстояния. Полученная функция имеет вид, характерный для стеклующихся систем (рис. 8).

Рис. 8. Зависимость $\langle \phi\phi \rangle_t$ от $\ln(t)$: вклад от первого слагаемого $\langle \phi\phi \rangle_t^0$, представляющий собой дебаевскую релаксацию (а); вклад от второго слагаемого, учитывающего кооперативные эффекты (б); результирующая функция, представляющая собой суперпозицию первого и второго слагаемых (в).

В рамках предложенной теории несложно вывести уравнение теории связанных мод в представлении Цванцига–Мори [25], [26] для структурного фактора $S(t) \equiv G_K(t)$. Для этого можно воспользоваться уравнениями Дайсона и ФДТ. Запишем уравнения Дайсона для G^A и G^R :

$$G^A = G_0^{A(R)} + G_0^{A(R)} \otimes D^{A(R)} \otimes G^{A(R)}, \quad (26)$$

где символом $\otimes$ обозначена операция свертки по t , а

$$D^{A(R)}(t) = \theta(\pm t) \frac{g^4 \mu^2 \ln(L/a_0)}{2\Gamma_\phi \pi^2} e^{\mp 4I_0 vt / \Gamma_\phi g^2} \quad (27)$$

– собственно-энергетическая часть, которая имеет физический смысл функции памяти. Подействуем на эти уравнения слева оператором $\hat{G}_0^{-1} = \Gamma_\phi \partial_t - \nabla^2 + \mu^2$, после чего вычтем первое выражение из второго:

$$\begin{aligned} G_0^{-1}(G^R - G^A) &= D^R \otimes G^R - D^A \otimes G^A = \\ &= \int_0^t D^R(|t'|) G^R(|t - t'|) dt' = - \int_0^t D^R(|t'|) \partial_t G^K(t - t') dt'. \end{aligned} \quad (28)$$

Отсюда, используя ФДТ, $G^R - G^A = T^{-1} \partial_t G^K$, получаем

$$\partial_t^2 G^K(t) + \mu^2 \partial_t G^K(t) + T \int_0^t D^R(|t'|) \partial_t G^K(t - t') dt' = 0,$$

где $D(t) = D^R(|t|)$. Полученное выражение представляет собой уравнение теории связанных мод в представлении Цванцига–Мори при $\mathbf{q} = 0$. Для того чтобы получить стандартный вид этого уравнения, можно учесть не зависящий от времени статический вклад в функцию Грина и в функцию памяти D , $D(t) \rightarrow D(t) + \Omega^2/T$, где Ω – микроскопическая частота, вычисляемая из структурного фактора $S(q)$: $\Omega^2 = q^2 k_B T / (mS(q))$, m – масса частицы [26]. Тогда

$$\partial_t^2 G^K(t) + \Omega^2 G^K(t) + \mu^2 \partial_t G^K(t) + T \int_0^t D^R(|t'|) \partial_t G^K(t - t') dt' = 0.$$

Это важный результат, поскольку функция $D(|t|)$ – функция памяти в уравнении теории связанных мод, и ее определение является ключевой проблемой теории. Предложенный же выше подход позволяет непосредственно определять аналитический вид функции памяти, зависящий только от параметров микроскопической модели.

5. ВЫВОДЫ

Согласно предложенной выше теории процесс стеклования представляется следующим образом: когда температура приближается к T_g , корреляционный радиус калибровочного поля расходится, в то время как корреляционный радиус параметра порядка остается конечным. Бесконечный радиус корреляции калибровочных полей означает, что все относительные вращения становятся скоррелированными на бесконечно больших расстояниях. В результате рост флуктуаций поля параметра порядка становится невозможным, так как спины уже не могут поворачиваться независимо друг от друга. Как было показано выше, эта картина может быть описана с помощью квазиравновесной статической теории фазовых переходов в подсистеме калибровочных полей, но очень важные динамические особенности этого перехода могут быть объяснены только в динамическом подходе.

В заключение следует заметить, что представленный выше теоретический подход хорошо описывает все основные свойства стеклования: выражение для температурной зависимости теплоемкости вблизи стеклования находится в хорошем качественном согласии с экспериментальными данными. Полученные температурные зависимости линейной и нелинейной восприимчивостей ведут себя правильно в T_g ; оценка критического показателя нелинейной восприимчивости $\gamma \simeq 2$ также согласуется с экспериментальными данными. Кроме того, эта теория воспроизводит характерный вид временной зависимости корреляционной функции $\langle \phi \phi \rangle_t$ и воспроизводит соотношение Фогеля–Фулчера–Таммана (22) для температурной зависимости времени релаксации. Прежде всего, теория была разработана для спиновых систем, но она также может быть применена и для описания переходов переохлажденная жидкость–стекло. В этом случае речь уже будет идти про геометрическую фрустрацию системы, а в качестве вихрей будут рассматриваться дисклинации в упругой локально-упорядоченной среде. В обоих случаях теория имеет схожий топологический смысл и, следовательно, будет приводить к качественно аналогичным результатам. В этом смысле теория имеет общий характер.

Благодарности. Автор благодарит РФФИ (гранты № 13-02-00592, 13-02-91177, 12-03-00757) и РАН (программы 12-П-3-1013 и 12-П-2-1044), при поддержке которых выполнена настоящая работа.

Список литературы

- [1] N. Rivier, D. M. Duffy, *J. Physique*, **43**:2 (1982), 293–306.
- [2] D. R. Nelson, *Phys. Rev. B*, **28**:10 (1983), 5515–5535.
- [3] N. Rivier, *Revista Brasileira de Física*, **15**:4 (1985), 311–378.
- [4] I. E. Dzyaloshinskii, G. E. Volovik, *J. Physique*, **39**:6 (1978), 693–700.
- [5] J. A. Hertz, *Phys. Rev. B*, **18**:9 (1978), 4875–4885.
- [6] D. Kivelson, G. Tarjus, *Phys. Mag. B*, **77**:2 (1998), 245–256.
- [7] G. Tarjus, S. A. Kivelson, Z. Nussinov, P. Viot, *J. Phys.*, **17**:50 (2005), R1143–R1182.
- [8] D. Chowdhury, *Spin Glasses and Other Frustrated Systems*, World Sci., Singapore, 1986.
- [9] G. Toulouse, *Commun. Phys.*, **2** (1977), 115–119.
- [10] I. Kanazawa, *J. Non-Cryst. Solids*, **293–295**:1–2 (2001), 615–619.
- [11] Z. Nussinov, *Phys. Rev. B*, **69**:1 (2004), 014208, 25 pp., arXiv: cond-mat/0209292.
- [12] M. G. Vasin, *J. Stat. Mech.*, **2011** (2011), P05009, arXiv: 1010.0061.

- [13] А. Н. Васильев, *Квантовополовая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике*, ПИЯФ, СПб., 1998.
- [14] J. C. Collins, *Renormalization. An Introduction to Renormalization, the Renormalization Group, and the Operator-Product Expansion*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1984.
- [15] K. Binder, A. P. Young, *Rev. Modern Phys.*, **58**:4 (1986), 801–976.
- [16] F. H. Stillinger, *J. Chem. Phys.*, **89**:10 (1988), 6461–6469.
- [17] N. Rivier, D. M. Duffy, “Line defects and glass transition”, *Numerical Methods in the Study of Critical Phenomena* (Corry-le-Rouet, France, June 2–4, 1980), Springer Series in Synergetics, **9**, eds. J. Della Dora, J. Demongeot, B. Lacole, Springer, Berlin–New York, 1981, 132–142.
- [18] A. Kamenev, “Many-body theory of non-equilibrium systems”, *Nanophysics: Coherence and Transport*, eds. H. Bouchiat, J. Dalibard, Elsevier, Amsterdam, 2005, 177–246.
- [19] M. G. Vasin, *Phys. Rev. B*, **74**:21 (2006), 214116, 5 pp.
- [20] I. S. Burmistrov, N. M. Chtchelkatchev, *Phys. Rev. B*, **77**:19 (2008), 195319, 12 pp.
- [21] I. S. Beloborodov, A. V. Lopatin, G. Schwiete, V. M. Vinokur, *Phys. Rev. B*, **70**:7 (2004), 073404, 4 pp., arXiv:cond-mat/0311512.
- [22] М. Г. Васин, Н. М. Щелкачев, В. М. Винокур, *ТМФ*, **163**:1 (2010), 163–176.
- [23] А. З. Паташинский, В. Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, М., 1982.
- [24] C. Hohenberg, B. I. Halperin, *Rev. Modern Phys.*, **49**:3 (1977), 435–479.
- [25] D. R. Reichman, P. Charbonneau, *J. Stat. Mech.*, **05** (2005), P05013, 24 pp.
- [26] W. Kob, “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, 28, arXiv:cond-mat/9702073.

Поступила в редакцию 1.10.2012