

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Теория пространственно-временной эволюции неравновесной термодинамической системы

А.И. Олемской, И.В. Коплык

Обзор полевых теорий формирования макроструктуры новой фазы на основе микроскопического подхода. В рамках суперсимметричного подхода, равноправным образом представляющего гомогенные и гетерофазные флуктуации, описана эволюция системы, резко переведенной через точку фазового перехода первого рода. Найдены зависимости параметра порядка, восприимчивостей и параметров нэргодичности и памяти от внешних условий и скорости закалки. Определены критическая степень неравновесности и величина ангармонизма, необходимые для перехода системы из диссипативного режима поведения в реактивный (типа реакции Белоусова–Жаботинского).

PACS numbers: 05.70.Fh, 05.70.Ln, 11.30.Pb, 64.70.Kb

Содержание

1. Введение (1105).
2. Механизмы образования и эволюции новой фазы (1109).
 - 2.1. Спинодальный механизм.
 - 2.2. Бинодальный распад.
3. Использование суперсимметричного подхода для описания релаксации термодинамической системы (1119).
 - 3.1. Формулировка задачи.
 - 3.2. Начальная стадия.
 - 3.3. Поздняя стадия.
 - 3.4. Влияние поля.
 - 3.5. Анализ пространственно-временного поведения релаксирующей системы.
 - 3.6. Суперсимметричное представление флуктуаций параметра порядка.
 - 3.7. Суперсимметричная теория фазового превращения.
4. Суперсимметричная теория сильно неравновесной термодинамической системы (1138).
 - 4.1. Линейное приближение.
 - 4.2. Суперсимметричная диаграммная техника Φ^4 -модели.
 - 4.3. Самосогласованная Φ^4 -теория.
5. Заключение (1143).

Список литературы (1143).

1. Введение

Основной объект предлагаемого обзора — конденсированные системы, которые с изменением внешних условий претерпевают качественную перестройку (фазовые переходы в их обобщенном понимании). С термодинамической точки зрения все такие системы являются, строго говоря, неравновесными. Однако можно выделить те из них, где полное описание картины превращения достигается в рамках стандартной термодинамической схемы,

набор параметров состояния которой дополнен степенью свободы, отвечающей параметру порядка. Именно такие системы описываются теорией Ландау, начиная с работ которого системы, претерпевающие фазовое превращение, привлекают возрастающее внимание.

Разумеется, с течением времени первоначальная концепция фазового перехода претерпела существенную эволюцию. Так, оказалось, что параметр порядка определяет амплитуду гидродинамической моды, пространственно-временная зависимость которой описывает эволюцию системы в ходе превращения. В последние годы в связи с развитием синергетической концепции выяснилось, что фазовое превращение реализуется в результате самоорганизации, процесс которой отражается не одной, а по крайней мере тремя гидродинамическими степенями свободы, отвечающими параметру порядка, сопряженному ему полю и управляющему параметру. Простота ландауской картины обусловлена тем обстоятельством, что поле оказывается пропорциональным параметру порядка, а управляющий параметр (обычно он сводится к температуре) изменяется независимо от остальных степеней свободы (но, разумеется, не наоборот). В результате для описания квазистатического фазового превращения оказывается достаточным использовать единственную степень свободы — параметр порядка.

В системах, значительно удаленных от состояния термодинамического равновесия, каждая из указанных мод приобретает самостоятельное значение, а процесс самоорганизации складывается в результате конкуренции положительной обратной связи параметра порядка с управляющим параметром и отрицательной связи с сопряженным полем (первая из этих связей является движущей силой превращения, вторая отражает принцип Ле-Шателье). Такого рода автономизация гидродинамических мод существенно обогащает сценарии поведения сильно неравновесной термодинамической системы — кроме процесса релаксации к равновесному

А.И. Олемской, И.В. Коплык. Сумський державний університет, 244007 Суми, вул. Римського-Корсакова 2, Україна
Тел. (0542) 33-34-65
E-mail: simpo@demex.sumy.ua

Статья поступила 9 марта 1995 г.

состоянию может реализовываться реактивный (автоколебательный) режим, наиболее ярким проявлением которого является реакция Белоусова–Жаботинского.

С феноменологической точки зрения релаксационный режим реализуется, если время релаксации параметра порядка намного превосходит времена релаксации остальных степеней свободы. Автоколебательное поведение требует соизмеримости характерных времен изменения параметра порядка и управляющего параметра. Если же окажутся соизмеримыми времена релаксации всех трех степеней свободы, то система может перейти в стохастический режим поведения, характеризуемый странным аттрактором. Свообразная ситуация реализуется, если время релаксации параметра порядка окажется намного меньше остальных времен. Например, в спиновых стеклах наибольшим временем характеризуется процесс релаксации сопряженного поля, которое, таким образом, приобретает характер холодной переменной. Поэтому при закалке из неупорядоченного состояния такая система приобретает замороженный беспорядок, обусловливающий появление памяти и потерю эргодичности.

Настоящий обзор предпринят с целью изложить концепцию, позволяющую в рамках единого подхода исследовать все указанные системы. Формальной основой такого подхода является, как видно из дальнейшего, теория суперсимметрии. Ее использование позволяет, с одной стороны, провести самосогласованное описание одиночных и коллективных возбуждений, а с другой — связать поведение системы на микроскопическом уровне (отвечающем, скажем, спинам или атомам) и макроуровне, отражающем пространственно-временную эволюцию фазы, образовавшейся в результате превращения. Обзор построен таким образом, чтобы, кратко ознакомившись с современной картиной фазового превращения (раздел 2), можно было без отвлечения к другим источникам разработать суперсимметричную теорию как для термодинамической системы, релаксирующую к равновесию (раздел 3), так и для сильно неравновесной системы (раздел 4).

Следует отметить, что наиболее популярным способом приготовления неравновесной системы является бесконечно быстрая закалка из области фазовой диаграммы, отвечающей однородной неупорядоченной фазе, в область упорядоченной фазы. Начиная с работ Кана–Хиллерта [1–4], И.М. Лифшица [5], Кука [6], Лангера [7, 8], исследование картины фазового превращения такой системы привлекает к себе постоянное внимание [9–24]. При этом в соответствии с делением механизмов превращения на спинодальный и бинодальный разделяются и методы исследования. В рамках первого направления используется волновое представление поля параметра порядка [9–11]. Хотя оно охватывает и поздние стадии эволюции, когда макроструктура новой фазы уже сформировалась, для описания бинодальной системы наиболее естественным представляется подход, альтернативный волновому. В его рамках рассматриваются сформировавшиеся выделения новой фазы и описание сводится к представлению эволюции ансамбля этих выделений [12–14].

В соответствии с этим можно выделить два альтернативных метода описания неустойчивой термодинамической системы: спинодальный, основанный на псевдобозевском представлении ансамбля волн параметра

порядка, и бинодальный, представляющий систему как псевдофермиевский ансамбль гетерофазных флуктуаций. Реальная физическая ситуация, разумеется, намного сложнее. Совершенно очевидно, что на начальной стадии эволюции равноправным образом представлены как гомогенные, так и гетерофазные флуктуации. Поэтому последовательная теория должна носить суперсимметричный характер. Применительно к линеаризованной модели [1–4] первая формулировка такого рода была изложена в работе [17]. Однако, кроме того, что эта модель не обладает обратной связью и, следовательно, не самосогласована, работа [17] содержит лишь аргументацию в пользу суперсимметричного полевого подхода и обсуждение трансформационных свойств соответствующего действия. Что же касается самосогласованного исследования на основе вариационного принципа, то ввиду пренебрежения нелинейностью оно в рамках схемы [17] не представляется возможным.

Подобная программа реализована с использованием стандартного полевого подхода в серии работ [18–21] группы Мазенко, который обратил внимание на тот факт, что при появлении межфазных границ волновое представление становится несостоительным. Он предложил, не выходя за рамки такого подхода, ввести дополнительное поле l , которое, по сути дела, происходит от координаты, представляющей кинковую особенность $\eta = \tanh l$ для зависимости параметра порядка вблизи границы. Хотя такой подход позволил развить непротиворечивую самосогласованную схему описания гетерофазной системы, он обладает недостатком принципиального характера. Действительно, флуктуации параметра порядка в каждом выделении фазы (домене) распространяются только на область этого домена. Поэтому, строго говоря, гетерофазная система является неэргодической, хотя ввиду того, что межатомные связи фрустрированы лишь на межфазной границе, неэргодичность будет слабой. Тем не менее, последовательная полевая схема становится неприменимой, и, по-видимому, именно это обстоятельство является причиной расхождения аналитических результатов [18–21] и численного эксперимента [22] (см. [23, 24]).

Последовательная схема, представляющая указаные эффекты неэргодичности гетерофазной смеси, была развита в [24]. Она основана на технике корреляционных функций Мори, в рамках которой параметр неэргодичности представляется как вычет коррелятора параметра порядка при нулевой частоте. Данный подход позволяет описать разницу между значениями статической и динамической восприимчивостей, найти ширину бинодальной области, а также представить особенности гидродинамической моды, ответственной за эволюцию макроструктуры упорядоченной фазы. Однако при этом совершенно выпадают результаты, достижимые в рамках подхода Мазенко [18–21], например временная зависимость характерного размера домена. Очевидно, это связано с тем, что неэргодическая теория [24] представляет некую альтернативу полевому подходу [18].

Как уже указывалось, основу предлагаемого обзора составляет суперсимметричная теория, впервые предложенная для описания термодинамических систем в [25]. Такая теория позволяет представить эффекты памяти и потери эргодичности [26, 27] и поэтому является естественным (и, по нашему мнению, единственным) способом полного описания эволюции неустойчивой термо-

динамической системы. В ее рамках начальная стадия характеризуется наличием скрытой симметрии (суперсимметрии) стохастической системы [26], означающей, что различие между динамическими и квазистатическими флуктуациями отсутствует и эргодичность не нарушена. Очевидно, именно такое поведение отвечает стадии, предшествующей зарождению фазы. На поздних стадиях указанная эквивалентность между флуктуациями отсутствует, и система приобретает гетерофазный характер с нарушенной эргодичностью. Иными словами, реализуется стадия роста и коалесценции выделений новой фазы.

Работа построена следующим образом. Раздел 2 посвящен исследованию проблемы формирования макроструктуры новой фазы на основе микроскопического описания или, иными словами, установлению связи между микро- и макроуровнями фазового превращения. Поскольку последнее может протекать по двум возможным сценариям, то в разделе 2.1 исследуется непрерывный (спинодальный) механизм, а в разделе 2.2 — прерывистый (бинодальный). В первом из них развита полевая теория для случаев несохраняющегося и сохраняющегося параметров порядка. Последовательно изложены методы описания пространственно-временной корреляции поля параметра порядка, развитые Каном, Куком, Лангером и Мазенко. Показано, что соответствующий коррелятор 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 параметров порядка, а также для процесса коалесценции. Подробно излагается развитая Мазенко полевая схема, позволяющая последовательным образом представить указанные особенности. Показано, что в ее рамках важную роль играет наличие резкой межфазной границы.

Раздел 2.2 начинается с изложения схемы, позволяющей представить критический зародыш фазы как солитонное решение полевого уравнения. Показано, что при росте амплитуды гомогенной флуктуации параметра порядка происходит ее замедление в движении как целого и в бинодальной области образуется пара "кинк-антикинк", представляющая зародыш. Вторая половина раздела 2.2 посвящена краткому описанию поведения ансамбля выделений в процессе образования новой фазы типа распада твердого раствора. Выписана функция стационарного распределения по размерам выделений, указаны характерные размеры и времена эволюции дисперсной системы. Проведено сравнение двух возможных механизмов коалесценции — за счет диффузии атомов от малых выделений к большим и за счет движения выделения как целого.

Основное место в обзоре занимает раздел 3, посвященный построению суперсимметричной схемы описания процесса релаксации неравновесной термодинамической системы. В разделе 3.1 выписаны исходные соотношения, позволяющие сформулировать суперсимметричное представление задачи об эволюции неустойчивой термодинамической системы. Ее описание основывается на уравнении Ланжевена, производящий функционал которого удобно записать в рамках стандартной полевой формулировки как интеграл по вспомогательному

бозевскому полю ϕ и сопряженной паре гравитационных полей $\bar{\psi}, \psi$. Эти поля отвечают гомогенным и гетерофазным флуктуациям параметра порядка η , суперпозиция которого с составляющими $\bar{\psi}, \psi, \phi = \phi + \dot{\eta}/2\Theta$, где Θ — обобщенная температура, образует суперполе Φ . Оказывается, оно устроено таким образом, что флуктуация $d\eta \propto \bar{\psi}$ наблюдаемого поля параметра порядка возникает за счет зарождения или уничтожения гетерофазной флуктуации, тогда как возникновение самой этой флуктуации $d\bar{\psi} \propto \dot{\eta}/2\Theta + \phi$ обусловлено ненулевой скоростью упорядочения $\dot{\eta}$ и полем ϕ гомогенных флуктуаций; зарождение последних, в свою очередь, обеспечивается распадом гетерофазных флуктуаций: $d\phi \propto -\bar{\psi}$. Таким образом, в сравнении с [17] введенные компоненты суперполя получают ясную физическую трактовку. С формальной точки зрения суперсимметричный подход позволяет стандартным образом сформулировать лагранжиев метод исследования неравновесной системы. В частности, ее стохастический функционал записывается в виде континуального интеграла по начальному и конечному распределениям поля параметра порядка от квазигибсовского функционала вероятности их реализации. Эффективный термодинамический потенциал $\Omega\{\eta\}$, стоящий в показателе экспоненты этого функционала, подчиняется условиям суперсимметрии $\Omega = 0$, $\delta\Omega/\delta\eta = 0$. В заключении раздела 3.1 приведены данные, позволяющие в рамках гриновской техники представить начальную и конечную стадии эволюции системы, разделение на которые связывается с потерей суперсимметрии.

Исследование начальной стадии, на которой благодаря отсутствию порядка нет различия в поведении системы относительно гомогенных и гетерофазных флуктуаций, посвящен раздел 3.2. Для построения суперсимметричной диаграммной техники выписано действие, в котором фигурируют следующие члены: линейное слагаемое, обусловленное внешним полем, способствующим выделению одного из типов доменов; квадратичные слагаемые, первое из которых имеет обычный гармонический вид, второе связано с пространственной неоднородностью и третье — с замороженным беспорядком, возрастающим с увеличением скорости закалки (последнее проявляется только на поздней стадии); наконец, нелинейные слагаемые, обусловленные взаимодействием между различными компонентами суперполя и его ангармоническим самодействием (при исследовании спектра времен релаксации в разделе 3.2 оно представляется стандартной моделью Φ^4 , а при рассмотрении действия внешнего поля в разделе 3.4 — нелинейным маятником). Найдено выражение для парного коррелятора свободного суперполя, из вида которого установлена суперсимметричная структура полного суперкоррелятора. Оказывается, что в релаксирующих системах последний раскладывается по трем базисным операторам суперпространства полей. Соответствующие компоненты суперкоррелятора дают запаздывающую и опережающую функции Грина, связанные с корреляцией полей η и ϕ , и структурный фактор, представляющий авторрелятор поля упорядочения η . Подобным образом раскладывается и собственно энергетическая часть, в результате чего суперсимметричное уравнение Дайсона сводится к трем соотношениям между ее компонентами, с одной стороны, и компонентами затравочного и точно-го суперкорреляторов, с другой. Замыкание этих уравне-

ний осуществляется в рамках диаграммного подхода, позволяющего выразить компоненты собственно энергетической части через составляющие суперкоррелятора. В результате определено время релаксации суперсимметричной системы.

С усилением флюктуаций важное значение приобретают эффекты нелинейности, приводящие к нарушению суперсимметрии (раздел 3.3). В энергетическом представлении это проявляется в появлении бесконечно высоких барьеров, отделяющих области суперпространства с разрешенными значениями полей $\psi, \bar{\psi}$ от областей с $\eta \neq 0, \varphi \neq 0$. Это означает, что вследствие разделения областей разрешенных значений псевдофермievских и псевдобозеевских составляющих суперполя временные изменения каждой из них становятся когерентными: так, изменение пробного поля φ будет сказываться на изменении параметра порядка η даже в бесконечно удаленный момент времени $t = \infty$. Иными словами, появляется неэргодичность, характеризуемая параметром $\Delta = \langle \eta(\infty)\varphi(0) \rangle$, значение которого определяет разность между изотермической и адиабатической восприимчивостями. Когерентность в изменении самого параметра порядка, которая характеризуется параметром памяти Эдвардса–Андерсона $q = \langle \eta(\infty)\eta(0) \rangle$, появляется лишь с разделением псевдобозеевских компонент φ, η . Это обеспечивается возникновением барьеров между областями их разрешенных значений за счет замороженного беспорядка, обусловленного конечным значением скорости закалки \dot{T} .

С учетом указанных эффектов неэргодичности и памяти в разделе 3.3 переписаны уравнения для функций Грина и структурного фактора. Из условия их самосогласования при нулевой частоте найдены алгебраические уравнения, определяющие значения Δ, q и восприимчивости в зависимости от \dot{T} и внешних условий. В частности, получено выражение через параметры межатомного взаимодействия для критической скорости закалки $|\dot{T}|_c$, обеспечивающей полную фиксацию системы в неупорядоченном состоянии (при закалке из жидкости она сводится к стеклованию). Оказалось, что параметр памяти q не зависит от условий выдержки и степенным образом растет с увеличением $|\dot{T}|$. В свою очередь, параметр неэргодичности $\Delta \neq 0$ в области, расположенной вблизи спинодали T_s и сжимающейся при увеличении скорости закалки $|\dot{T}|$. Здесь величина Δ нарастает при $T \rightarrow T_s$ и уменьшении $|\dot{T}|$. Эффективное время релаксации неравновесной системы уменьшается с приближением к точке потери эргодичности и при спадании скорости закалки $|\dot{T}|$.

Раздел 3.4 посвящен исследованию влияния внешнего поля H , ориентирующего домены упорядоченной фазы в заданном направлении (в системах типа упорядочивающихся сплавов роль такого направления играет фиксированная фаза концентрационной волны [16]). Показано, что в суперсимметричном представлении данная задача эквивалентна решению стационарного уравнения Шредингера, гамильтониан которого представляет собой квадрат суперзаряда. Решение факторизованного уравнения позволяет в рамках квазиклассического приближения найти полевую зависимость $j_0(H)$ средней скорости переориентации доменов: при малых значениях H она имеет линейный характер, а с приближением к предельному значению поля анизотропии H_0 спадает до нуля; температурная зависимость $j_0(T)$ имеет максимум в

промежуточной области $T \sim H$ и спадает до нуля на границах. Замечательная особенность системы доменов во внешнем поле состоит в том, что включение поля H приводит к нарушению суперсимметрии и флюктуационно-диссипационной теоремы, устанавливающей пропорциональность коррелятора флюктуаций скорости переориентации доменов и обобщенной восприимчивости $\partial j_0 / \partial H$. Именно это обстоятельство является причиной возникновения неустойчивости системы доменов при значениях H , превосходящих характерное поле анизотропии H_0 .

В заключении раздела 3.4 исследуется процесс коалесценции, где наличие поля H связано не с внешними причинами, а с лапласовским давлением, обусловленным кривизной межфазной поверхности (так называемое диффузионное взаимодействие [12]). Стационарное значение H определяется из условия компенсации микроскопического диффузионного потока j и макропотока j_0 , описывающего перестройку гетерофазной системы выделений. В рамках линейной аппроксимации $j \propto H$ показано, что стационарный поток коалесценции приобретает ненулевые значения при температуре, отделенной от спинодали областью, ширина которой сужается с ростом поверхностного натяжения и течением времени, уменьшающим величину пересыщения лимитирующим компонентом.

В разделе 3.5 интерпретируются полученные результаты суперсимметричной теории. Показано, что новому структурному уровню следует сопоставлять отвечающую ему интенсивность шума. В отличие от исходного микроскопического уровня, макроскопический шум отсчитывается не от нуля температуры, а от точки спинодали и ввиду большого пространственно-временного масштаба имеет в относительных единицах гораздо меньшее значение. Такое распределение шума приводит к картине, согласно которой макроскопический уровень образуется в области, расположенной вблизи спинодали. Ширина этой области уменьшается с ростом скорости закалки. Отсюда следует, что замораживание системы в неупорядоченном эргодическом состоянии (при охлаждении из жидкости оно сводится к стеклованию) обеспечивается при скоростях закалки, превышающих некоторое критическое значение, которое тем меньше, чем больше межатомное взаимодействие и чем более ангарамоничным является потенциальный рельеф.

В заключении раздела 3.5 рассматривается пространственно-временной характер поведения системы. Сначала на основе формализма, развитого в разделе 3.3, редуцируется вид функции Грина двухуровневой системы, для которой затем вычисляется время релаксации на макроуровне. Оказывается, что оно растет с удалением от точки зарождения нового уровня и с увеличением скорости закалки. Вид частотно-волновой зависимости гриновской функции позволяет представить известные асимптотики зависимости $L(t)$ размера домена от времени для случаев сохраняющегося и несохраняющегося параметров порядка, а также процесса коалесценции. Соответственно использование флюктуационно-диссипационной теоремы дает особенности структурного фактора на макроуровне.

Разделы 3.6, 3.7 объединены в том смысле, что в них рассматривается квазистатический фазовый переход, реализуемый в условиях, когда скорость закалки $|\dot{T}| \rightarrow \infty$. В разделе 3.6, посвященном совместному

рассмотрению гомогенных и гетерофазных флуктуаций, показано, что в рамках суперсимметричного подхода задача сводится к самосогласованному исследованию смеси невзаимодействующих ферми- и бозе-газов. Определены термодинамические особенности, обусловленные каждым типом флуктуаций, а также корреляционные функции пространственного распределения параметра порядка и межфазных границ. Показано, что совместное рассмотрение обоих типов флуктуаций позволяет избавиться от нефизических расходимостей в коротковолновом пределе и приводит к возрастанию скачка теплоемкости в точке превращения. Найденный структурный фактор обладает чертами, присущими как гетерофазной, так и однородной системам: в длинноволновом пределе он сводится к закону Порода, отражающему наличие границ раздела, а в коротковолновом — к распределению Ориштейна–Цернике, описывающему распределение гомогенных флуктуаций.

Отличительная особенность раздела 3.7 состоит в том, что здесь развита изначальная схема Ландау, которая, однако, кроме конденсатной компоненты параметра порядка содержит флуктуационную и учитывает наличие границ раздела. Если в разделах 3.2–3.6 совместное рассмотрение указанных компонент достигалось в рамках корреляционной техники, то раздел 3.7 посвящен исследованию пространственно-временной зависимости самих компонент суперполя, а не его моментов. Использование вариационного принципа приводит здесь к двум парам зацепляющихся уравнений для бозеевых и фермиевых компонент. Оказывается, что если в качестве первых используются конденсатная компонента η и флуктуационная ϕ , то одно уравнение из первой пары приобретает характер связи (т.е. выражает ϕ через η), а другое содержит производную $\dot{\eta}$ второго порядка по времени. Симметризация этой пары достигается при переходе от компоненты ϕ к полю $\varphi = \phi - \dot{\eta}/2T$, представляющему огибающую линию флуктуаций обобщенной силы. Показано, что в переменных η, φ оба уравнения приобретают вид уравнений Ландау–Халатникова, причем для компоненты η вклад в обобщенную силу дает компонента φ , а для самой φ — слагаемое $\psi\bar{\psi}\eta$, обусловленное взаимодействием бозеевой и фермиевой составляющих. Уравнения второй пары (для фермиевых компонент $\psi, \bar{\psi}$) изначально имеют вид взаимно сопряженных дифференциальных уравнений первого порядка. Стандартное комбинирование этих соотношений приводит к уравнению непрерывности для величины $\rho \propto \psi\bar{\psi}$, представляющей плотность антифазных границ.

Исследование полученных уравнений показывает, что в отсутствие внешних полей границы, как и следовало ожидать, однородно распределены в пространстве, а их плотность не изменяется со временем. Уравнения для бозеевых компонент сводятся к теории Ландау только в простейшем случае однородного стационарного состояния. Для однородного неравновесного состояния временная зависимость $\eta(t)$ имеет вид фермиевой ступеньки, представляющей спинодальную кинетику упорядочения. В неоднородном состоянии ($\rho \neq 0$) зависимость $\eta(t)$ приобретает инстанционный вид, отвечающий процессу переориентации доменов упорядоченной фазы. Уникальность суперсимметричного подхода состоит в том, что он позволяет не только представить кинкуюю особенность, описывающую антифазную границу, но и найти ее толщину и размер домена в зависимости от

плотности границ. Иными словами, суперсимметричная схема содержит механизм спонтанного нарушения трансляционной инвариантности, связанный с выпадением конденсата фермиевых полей $\psi, \bar{\psi}$. В заключении раздела 3.7 в рамках подхода, аналогичного суперсимметричной квантовой механике, найдены выражения для энергии зарождения фазы и коэффициента поверхностного натяжения.

Раздел 4 посвящен исследованию термодинамических систем, значительно удаленных от равновесия. Их отличие от релаксирующих систем состоит в том, что уравнение движения содержит не только первую производную по времени, но и вторую. В соответствии с этим базис операторов, по которым раскладывается произвольный суперкоррелятор, расширяется от трех операторов (3.25) до шести (4.6). Согласно рассмотрению, проведенному в разделе 4.1, такое расширение позволяет уже в рамках линейного приближения учесть как диссипативный, так и реактивный режимы эволюции системы. В линейном приближении найдена пространственно-временная зависимость суперкоррелятора, компоненты которого дают известные гидродинамические выражения для структурного фактора и восприимчивости (раздел 4.1). Во втором порядке теории возмущений получены явные выражения для суперсимметричных компонент собственно энергетической части пропагатора суперполя (раздел 4.2). В приближении среднего поля и во втором порядке теории возмущений найдены шесть уравнений для определения пространственно-временной зависимости корреляторов различных компонент параметра порядка (раздел 4.3). Показано, что с ростом степени неравновесности системы наблюдается переход от диссипативного режима поведения к реактивному. В первом порядке по ангармонизму и в пренебрежении межатомным взаимодействием найдена критическая степень возбуждения системы и значение ангармонизма, необходимое для обеспечения реактивного режима поведения.

В заключении содержится краткий обзор результатов, достижение которых возможно лишь в рамках суперсимметричного подхода.

2. Механизмы образования и эволюции новой фазы

Пусть фазовое превращение характеризуется комплексным параметром порядка

$$\Psi = \eta \exp(i\varphi) \quad (2.1)$$

с модулем η и фазой φ . Из всех возможных сценариев течения фазового перехода ограничимся исследованием простейшего, в ходе которого система резко переводится из области существования неупорядоченной фазы ($\eta = 0$) в область фазовой диаграммы, где равновесное значение $\Psi_0 = \eta_0 \exp(i\varphi_0)$ параметра (2.1) отлично от нуля. Задача состоит в описании процесса пространственно-временной эволюции системы, представляющей зависимостью $\Psi(\mathbf{r}, t)$ при переходе из неравновесного неупорядоченного состояния в равновесное [28].

Как известно [15], возможны два механизма такой эволюции. Если система переведена в спинодальную область фазовой диаграммы, где упорядоченное и неупорядоченное состояния не разделены энергетическим

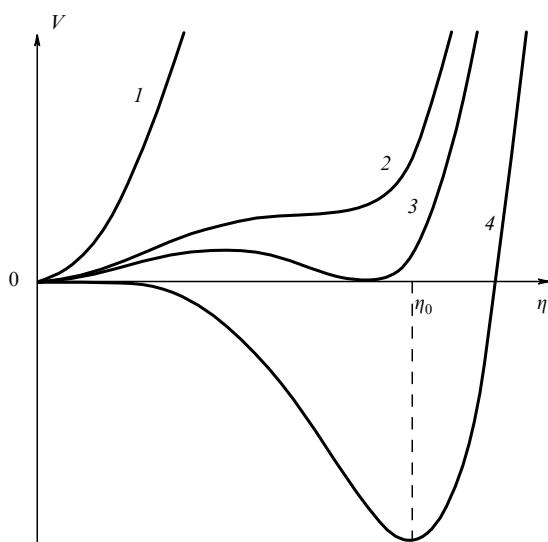


Рис. 1. Зависимость синергетического потенциала от параметра порядка при различных степенях возбуждения системы

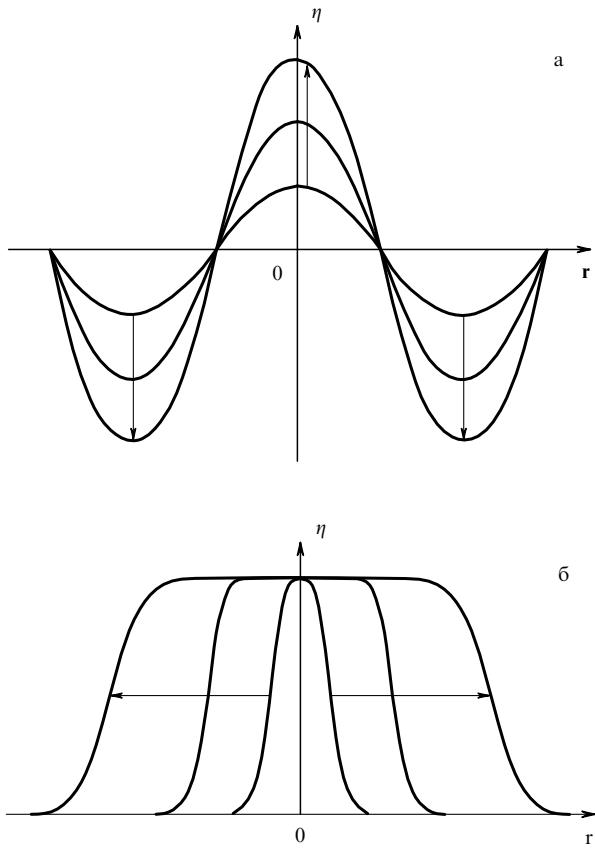


Рис. 2. Динамические (а) и квазистатические (б) флюктуации параметра порядка (стрелки указывают направление изменения формы флюктуации при ее нарастании) [15]

барьером (кривая 4 на рис. 1), то образование упорядоченной фазы протекает через стадию усиления динамических (гомогенных) флюктуаций параметра порядка (2.1). Они представляют суперпозицию пространственных волн $\psi_k(t)$, плавно нарастающих со временем по амплитуде $\eta_k(t) \equiv |\psi_k(t)|$, отвечающей данной длине волны $\lambda = 2\pi/k$, \mathbf{k} — волновой вектор (рис. 2а). Совершенно

отличное поведение обнаруживают квазистатические (гетерофазные) флюктуации (рис. 2б) в бинодальной области фазовой диаграммы. Наличие энергетического барьера между состояниями фаз $\eta = 0$ и $\eta = \eta_0$ (кривая 3 на рис. 1) приводит здесь к тому, что амплитуда параметра порядка остается практически постоянной, а флюктуация развивается за счет изменения фазы $\varphi(\mathbf{r}, t)$ при росте характерного размера выделения $R(t)$.

Естественно, что указанная разница в природе флюктуаций обусловливает и принципиально различающиеся сценарии образования фазы. Спинодальный механизм, отвечающий стабилизации гомогенных флюктуаций, описан в разделе 2.1. Классический механизм зарождения и роста новой фазы посредством стабилизации гетерофазных флюктуаций исследован в разделе 2.2. Поскольку он реализуется в бинодальной области диаграммы, то далее для краткости обозначен как бинодальный.

2.1. Спинодальный механизм

Рассматриваемая задача сводится к описанию релаксации неравновесной неупорядоченной фазы к равновесному упорядоченному состоянию. Соответствующий диссипативный процесс представляется уравнением Ланжевена [29]

$$\dot{\Psi} = -\gamma \frac{\delta \Phi}{\delta \Psi} + \zeta, \quad (2.2)$$

где точка означает дифференцирование по времени, первое слагаемое в правой части, первоначально предложенное Ландау и Халатниковым [30], описывает детерминированный вклад в среде с кинетическим коэффициентом γ , второе слагаемое $\zeta = \zeta(\mathbf{r}, t)$ носит стохастический (флюктуационный) характер. Это означает, что при усреднении по статистическому ансамблю первый момент $\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0$, а второй может быть ненулевым. В простейшем случае так называемого белого шума пространственно-временной фурье-образ $\langle |\zeta_{\mathbf{k}}(\omega)|^2 \rangle$ второго момента не зависит от волнового вектора \mathbf{k} и частоты ω . Согласно флюктуационно-диссипационной теореме в классическом пределе для флюктуаций $\delta\psi_{\mathbf{k}}(\omega) = \psi_{\mathbf{k}}(\omega) - \langle \psi_{\mathbf{k}}(\omega) \rangle$ параметра порядка имеем $\langle |\delta\psi_{\mathbf{k}}(\omega)|^2 \rangle = (2T/\omega) \text{Im } \chi_{\mathbf{k}}(\omega)$, где $\chi_{\mathbf{k}}(\omega)$ — восприимчивость. В случае несохраняющейся величины $\psi_{\mathbf{k}}(\omega)$ в пределе $\mathbf{k}, \omega \rightarrow 0$ выражение $\omega^{-1} \text{Im } \chi_{\mathbf{k}}(\omega)$ принимает значение τ^{-2} , где τ — соответствующее время релаксации [16]. В результате интенсивность флюктуаций белого шума определяется равенством

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t)\zeta(\mathbf{0}, 0) \rangle = 2T\gamma\delta(\mathbf{r})\delta(t), \quad (2.3)$$

где в соответствии с видом уравнения (2.2) учтена связь $\zeta(\mathbf{r}, t) = \tau^{-1}\delta\Psi(\mathbf{r}, t)$. Физический смысл условия (2.3) состоит в том, что флюктуации $\zeta(\mathbf{r}, t)$ скорости изменения параметра порядка осуществляются совершенно хаотическим образом — с нулевыми значениями пространственного и временного масштабов корреляции. В среде с памятью реализуется режим цветного шума, в котором δ -функции в правой части (2.3) размываются в пики, ширины которых определяют указанные масштабы корреляции.

Выражение для детерминированной силы в уравнении (2.2) определяется видом зависимости $\Phi\{\Psi(\mathbf{r}, t)\}$ функционала термодинамического потенциала Ландау

от пространственно-временного распределения параметра порядка. Воспользуемся стандартным разложением Гинзбурга–Ландау (Ψ^4 -модель)

$$\Phi = \left\{ \left(\frac{A}{2} |\Psi|^2 + \frac{B}{4} |\Psi|^4 + \frac{\beta}{2} |\nabla \Psi|^2 \right) d\mathbf{r} \right\}, \quad (2.4)$$

где значение термодинамического потенциала отсчитывается от неупорядоченной фазы, A, B, β — параметры разложения, определяемые положением системы на фазовой диаграмме, $\nabla = \partial/\partial \mathbf{r}$. Подстановка (2.4) в (2.2) дает временезависимое уравнение Гинзбурга–Ландау (в безразмерном виде)

$$\dot{\Psi} = \Psi \left(1 - |\Psi|^2 \right) + \nabla^2 \Psi + \zeta, \quad (2.5)$$

где величины $\Psi, \zeta, \mathbf{r}, t$ измерены в единицах $\Psi_0 = (|A|/B)^{1/2}, \zeta_0 = \gamma|A|\Psi_0, \xi = (\beta/|A|)^{1/2}, \tau = (\gamma|A|)^{-1}$ соответственно. При учете не только диссипативного, но и динамического слагаемого, обусловленного вкладом кинетической энергии $\rho |\dot{\Psi}|^2/2$, в левой части (2.5) появляется слагаемое $(\xi/vt)^2 \Psi$, где $v = (\beta/\rho)^{1/2}$ — характерная скорость, ρ — эффективная плотность. Вводя вместо обычной координаты \mathbf{r} бегущую $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - vt$, где скорость $\mathbf{v} = v\mathbf{r}/r$ определяет смещение зависимости $\Psi(\mathbf{r}, t)$ как целого, всегда можно избавиться от данного слагаемого. Это означает, что, определяя решение уравнения (2.5), следует иметь в виду возможность его смещения со скоростью \mathbf{v} , задаваемой внешними условиями.

Уравнения (2.2), (2.5) применимы к случаю несохраняющегося параметра порядка типа намагниченности, поляризации, дальнего порядка в сплавах и т.д. Совершенно отличная ситуация имеет место в случае сохраняющегося параметра порядка типа концентрации в распадающемся сплаве [16]. Здесь вместо уравнения Ланжевена (2.2) следует исходить из стохастического уравнения непрерывности:

$$\dot{\Psi} + \nabla \mathbf{j} = \zeta, \quad (2.6)$$

где поток \mathbf{j} выражается через химический потенциал $\mu = \delta\Phi/\delta\Psi$ соотношением Онзагера

$$\mathbf{j} = -M\nabla\mu, \quad (2.7)$$

где $M > 0$ — кинетический коэффициент (подвижность). В результате исходное уравнение движения, заменяющее (2.2), принимает вид

$$\dot{\Psi} = \nabla \left(M\nabla \frac{\delta\Phi}{\delta\Psi} \right) + \zeta. \quad (2.8)$$

Таким образом, условие сохранения параметра порядка приводит к появлению двух дополнительных производных по координате в определении детерминированной силы и к изменению ее знака. Если подвижность M не зависит от \mathbf{r} , то уравнению (2.8) можно придать вид

$$\dot{\Psi} = -\hat{\gamma} \frac{\delta\Phi}{\delta\Psi} + \zeta, \quad (2.9)$$

напоминающий вид (2.2), где введен оператор кинетического коэффициента $\hat{\gamma} = -M\nabla^2$, сводящийся в случае несохраняющегося параметра порядка к множителю γ .

В безразмерных величинах стохастическое уравнение движения записывается в универсальной форме

$$\dot{\Psi} = \hat{\Gamma} [(1 - |\Psi|^2) + \nabla^2] \Psi + \zeta, \quad \hat{\Gamma} = (-\nabla^2)^n, \quad (2.10)$$

где $n = 0$ и 1 для несохраняющегося и сохраняющегося параметров соответственно. Как и следовало ожидать, при $n = 0$ выражение (2.10) сводится к (2.5). В более сложном случае $n = 1$ перед всеми детерминированными слагаемыми правой части появляется оператор $-\nabla^2$. Аналогичным образом изменяется и правая часть условия (2.3): для сохраняющегося параметра порядка кинетический коэффициент γ заменяется оператором $\hat{\gamma} = -M\nabla^2$, где $M = D/T$ — подвижность атомов в процессе диффузии, характеризуемой коэффициентом D .

На начальной стадии распада решение уравнения (2.10) удобно искать в виде ряда Фурье

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(t) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), \quad (2.11)$$

отвечающего суперпозиции гомогенных флуктуаций, амплитуды которых изменяются со временем по закону

$$\psi_{\mathbf{k}}(t) = \psi_{\mathbf{k}} \exp[\alpha(\mathbf{k})t], \quad (2.12)$$

характеризуемому инкрементом $\alpha(\mathbf{k})$. При малых временах распада, когда флуктуации настолько малы, что $|\psi_{\mathbf{k}}(t)| \ll 1$, уравнение движения можно линеаризовать. В результате флуктуации, отвечающие различным \mathbf{k} , становятся независимыми, а инкремент принимает вид

$$\alpha(\mathbf{k}) = \mathbf{k}^{2n} (1 - \mathbf{k}^2), \quad n = 0; 1. \quad (2.13)$$

Таким образом, в длинноволновом пределе, ограниченном (в обычных единицах) обратной корреляционной длиной ξ^{-1} , инкремент $\alpha(\mathbf{k}) > 0$ и согласно (2.12) все флуктуации плавно нарастают по амплитуде. Характерно, что для несохраняющегося параметра ($n = 0$) максимальная скорость нарастания достигается при распаде по всему объему образца ($\mathbf{k} \rightarrow 0$), тогда как условие сохранения $n = 1$ приводит к подавлению предельно длинноволновых составляющих (здесь инкремент (2.13) достигает максимума при $\mathbf{k}^2 = 1/2$).

Изложенная линеаризованная теория Кана с сотрудниками [1–4] неудовлетворительна в двух отношениях: она не учитывает, во-первых, стохастический характер распада (опущено слагаемое ζ в (2.10)) и, во-вторых, взаимодействие флуктуаций (нелинейность). Первое ограничение было снято Куком [6], который заметил, что для коррелятора $C_{\mathbf{k}}(t) = \langle |\psi_{\mathbf{k}}(t)|^2 \rangle$ линеаризованное уравнение Кана имеет вид $\dot{C}_{\mathbf{k}}(t) = 2\alpha(\mathbf{k})C_{\mathbf{k}}(t)$. Сравнив левые части этого уравнения и условия нормировки шума (2.3), нетрудно заметить, что для учета стохастичности следует ввести слагаемое $2T\Gamma(\mathbf{k})$, где $\Gamma(\mathbf{k}) = \gamma$ для несохраняющегося и $\Gamma(\mathbf{k}) = M\mathbf{k}^2$ для сохраняющегося параметров порядка. Таким образом, начальная стадия спинодального распада описывается уравнением

$$\dot{C}_{\mathbf{k}}(t) = 2\alpha(\mathbf{k})C_{\mathbf{k}}(t) + 2T\Gamma(\mathbf{k}). \quad (2.14)$$

Здесь неоднородность обусловлена наличием шума. Решение имеет вид

$$C_{\mathbf{k}}(t) = C_{\mathbf{k}}(\infty) + [C_{\mathbf{k}}(0) - C_{\mathbf{k}}(\infty)] \exp[2\alpha(\mathbf{k})t], \quad (2.15)$$

где конечное значение равно

$$C_{\mathbf{k}}(\infty) = -\frac{T\Gamma(\mathbf{k})}{\alpha(\mathbf{k})}, \quad (2.16)$$

а величина $C_{\mathbf{k}}(0)$ задается начальными условиями. Недостаток теории Кука [6] проявляется в том, что при подстановке в (2.16) инкремента (2.13) получается формула типа Орнштейна–Цернике $C_{\mathbf{k}}(\infty) \propto (-1 + k^2)^{-1}$, в которой, однако, перед единицей стоит обратный знак. Поскольку это слагаемое отвечает низшей степени $|\Psi|^2$ в (2.4), при которой стоит отрицательный коэффициент A , то очевидно, что для получения правильного знака следует учесть нелинейные положительные поправки высших степеней.

Впервые такая попытка была предпринята Лангером с сотрудниками [7, 8], которые для полного описания эволюции системы исследовали не только уравнение движения параметра порядка $\Psi(\mathbf{r}, t)$, но и его стохастическую природу, отражаемую изменяющимся со временем функционалом распределения $P\{\Psi(\mathbf{r}, t)\}$. Учет взаимодействия флуктуаций в приближении среднего поля [16] для разложения (2.4) приводит к изменению слагаемого 1 в (2.13) на $[1 - C(t)]$, где $C(t) \equiv C(\mathbf{r} = 0, t)$. Таким образом, введение нелинейности означает учет отрицательной обратной связи, уменьшающей скорость нарастания флуктуаций. Однако поскольку всегда $C(t) \leq 1$, то данное обстоятельство не дает изменения знака низшей степени в инкременте (2.13), которое могло бы привести коррелятор (2.16) к виду Орнштейна–Цернике. Оказалось [7, 8], что такое обращение знака можно объяснить лишь в том случае, если предположить, что с течением времени распределение $P\{\Psi(\mathbf{r}, t)\}$ изменяет свой вид, как показано на рис. 3, — на начальной стадии распада реализуется одномодовый режим, характеризуемый центральным пиком, который трансформируется затем в два симметричных максимума, центрированных на

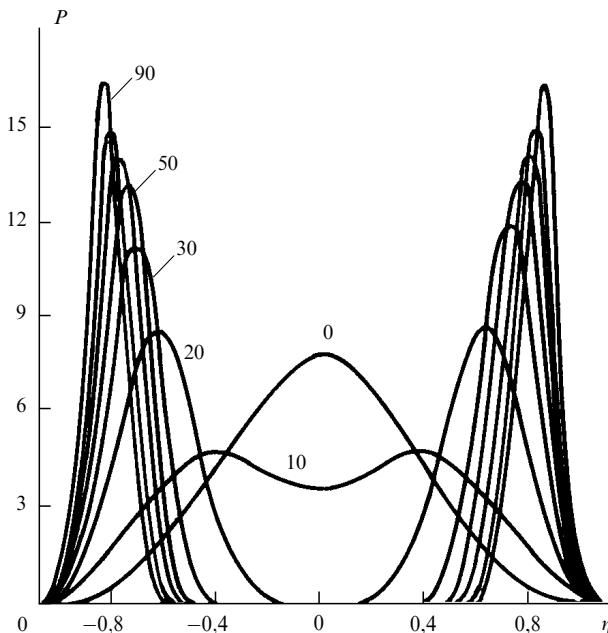


Рис. 3. Изменение вида функции распределения параметра порядка со временем (указано в относительных единицах цифрами у кривых) [18]

конечных значениях параметра порядка $\Psi \leq \Psi_0$, где Ψ_0 — равновесное значение.

Физический смысл указанной трансформации зависимости $P\{\Psi(\mathbf{r}, t)\}$ состоит в том, что процесс распада разбивается на две стадии. На ранней реализуется центральный пик, ширина которого характеризует обратную корреляционную длину ξ^{-1} . При этом среднее значение параметра порядка $\eta \equiv \langle \Psi \rangle = 0$, а отличны от нуля лишь флуктуации $\phi(\mathbf{r}, t)$, интенсивность которых согласно (2.3) характеризуется коррелятором

$$\tilde{C}_{\mathbf{k}=0}(\omega = 0) \equiv \langle |\phi_{\mathbf{k}=0}(\omega = 0)|^2 \rangle = 2T\chi\tau, \quad (2.17)$$

где $\chi = |A|^{-1}$ — восприимчивость, $\tau = (\gamma|A|)^{-1}$ — время релаксации. Образование двух максимумов, центрированных на конечных значениях $\pm\Psi(\mathbf{r}, t)$, означает появление на поздней стадии ($t \gg \tau$) ненулевых средних $\eta = \langle \Psi \rangle$. В результате полное поле $\Psi(\mathbf{r}, t)$ разбивается на конденсатную часть $\eta(\mathbf{r}, t)$ и флуктуационную $\phi(\mathbf{r}, t)$:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \eta(\mathbf{r}, t) + \phi(\mathbf{r}, t). \quad (2.18)$$

Соответственно коррелятор $C_{\mathbf{k}} = \langle |\Psi_{\mathbf{k}}|^2 \rangle$ имеет вид¹

$$C_{\mathbf{k}} = \eta_0^2 C_{\mathbf{k}}^0 + \tilde{C}_{\mathbf{k}}; \quad C_{\mathbf{k}}^0 = \eta_0^{-2} \langle |\eta_{\mathbf{k}}|^2 \rangle, \quad \tilde{C}_{\mathbf{k}} = \langle |\phi_{\mathbf{k}}|^2 \rangle. \quad (2.19)$$

Конденсатная составляющая $C_{\mathbf{k}}^0$ представляет узкий пик около точки $\mathbf{k} = 0$, ширина которого определяется обратным размером домена. В \mathbf{r} -представлении $C^0(\mathbf{r}, t) = \eta_0^{-2} \langle \eta(\mathbf{r}, t) \eta(\mathbf{0}, t) \rangle$, где параметр порядка определяется равенством [31]

$$\eta(\mathbf{r}, t) = \eta_0 \left(1 - \frac{3}{2} \langle \phi^2(\mathbf{r}, t) \rangle \right), \quad \eta_0^2 = \frac{|A|}{B}. \quad (2.20)$$

Флуктуационная часть коррелятора записывается в модифицированной форме Орнштейна–Цернике

$$\tilde{C}_{\mathbf{k}} = \frac{2T\chi}{(\tilde{\Sigma}_{\mathbf{k}} - 1) + \xi^2 \mathbf{k}^2}, \quad (2.21)$$

где собственно энергетическая часть

$$\tilde{\Sigma}_{\mathbf{k}} = 3 \frac{\eta^2 + \langle \phi^2 \rangle}{\eta_0^2} - 18 \frac{B}{T} \left(\frac{\eta}{\eta_0} \right)^2 \tilde{P}_{\mathbf{k}} \quad (2.22)$$

определяется поляризатором

$$\tilde{P}_{\mathbf{k}} = \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d} \tilde{C}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \tilde{C}_{\mathbf{k}'}. \quad (2.23)$$

Здесь d — размерность пространства. Как видно из (2.19)–(2.23), с течением времени средний параметр

¹ Характерная особенность рассматриваемой неравновесной системы состоит в нарушении свойства однородности времени и пространства. Это отражается в том, что коррелятор

$$C(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; t_2, t_1) = \langle \psi(\mathbf{r}_2, t_2) \psi(\mathbf{r}_1, t_1) \rangle \quad (2.24)$$

зависит не только от разностей $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, t_2 - t_1$, но и от самих значений $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t_1, t_2$. Нам, однако, понадобятся далее только одновременные корреляторы пространственно однородной системы:

$$C(\mathbf{r}; t) = \langle \psi(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{0}, t) \rangle. \quad (2.25)$$

порядка η возрастает, а интенсивность флюктуаций \tilde{C}_k , наоборот, спадает. Действительно, рост $\eta(t)$ приводит к увеличению собственно энергетической части (2.22), что с момента $\tilde{\Sigma}_k(t) = 1$ восстанавливает правильный вид зависимости Орнштейна–Цернике в (2.21), а затем обуславливает уменьшение интенсивности шума $\tilde{C}_k(t)$. Отсюда также видно, что момент времени t_0 , разделяющий раннюю и позднюю стадии распада, задается условием

$$\tilde{\Sigma}_k(t) = 1. \quad (2.26)$$

Поскольку оба знака $\pm\eta$ параметра порядка равновероятны, то на поздней стадии весь объем образца разбивается на домены размером $\sim L$, намного превышающим корреляционную длину ξ , значение которой характеризует распределение параметра порядка внутри домена.

Таким образом, пространственное распределение $\Psi(\mathbf{r})$ параметра порядка характеризуется двумя масштабами L , ξ , первый из которых определяет неоднородность средней составляющей $\eta(\mathbf{r})$, а второй — флюктуационной компоненты $\phi(\mathbf{r})$. На поздней стадии распада ($t \gg t_0$) эти составляющие становятся практически независимыми, и их пространственная корреляция характеризуется распределением типа Орнштейна–Цернике. Однако, если для коротковолновой флюктуационной компоненты реализуется зависимость (2.21), имеющая конечную высоту максимума, то для длинноволновой максимум должен при $t \rightarrow \infty$ неограниченно возрастать. Физически это обусловлено проявлением дискретной атомной структуры на микроскопических расстояниях $\sim \xi$, в связи с чем закон сохранения импульса не выполняется и мода Голдстоуна с боголюбовской особенностью k^{-2} не реализуется. Совершенно противоположная ситуация имеет место на макроскопических расстояниях $\sim L$ — наличие моды Голдстоуна отвечает здесь отсутствию энергетического барьера, препятствующего росту размера доменов $L(t) \rightarrow \infty$. Однако из (2.21) видно, что поскольку при $t > t_0$ имеем $\tilde{\Sigma}_k(t) > 1$, то боголюбовская особенность для составляющей C_k^0 коррелятора C_k может реализоваться, только если соответствующая собственно энергетическая часть Σ_k^0 меньше флюктуационной $\tilde{\Sigma}_k$.

Для установления соотношения между этими составляющими учтем, что после линеаризации (2.22) получаем связь $\tilde{\Sigma}_k = 3C_k$. Поскольку знаменатель в (2.21) представляет согласно (2.16) инкремент $\alpha(k)$, взятый с обратным знаком, то оказывается, что мы получили перенормировку величины $\alpha(k=0)$ в 3 раза большую, чем в [7, 8]. Это связано с тем, что в первом случае определялась величина $\tilde{\Sigma}_k$, а во втором — составляющая Σ_k^0 . Таким образом, можно предположить, что флюктуационная и конденсатная компоненты связаны равенством

$$\tilde{\Sigma}_k = 3\Sigma_k^0, \quad (2.27)$$

помеченным в основу работы [18].

Благодаря соотношению (2.27) нарастание флюктуаций с течением времени обеспечивает при $t = t_0$ равенство (2.26), но никогда не приводит к его выполнению для конденсатной компоненты $\Sigma_k^0(t)$, рост которой при $t \rightarrow \infty$ ограничен условием $\Sigma_k^0(t) \leq 1$. С учетом данного

обстоятельства введем определение характерных длин

$$\tilde{\xi} = \xi(\tilde{\Sigma} - 1)^{-1/2}, \quad (2.28a)$$

$$L = \xi(1 - \Sigma^0)^{-1/2}, \quad (2.28b)$$

где величина $\tilde{\Sigma}$ — максимальное значение собственно энергетической части $\tilde{\Sigma}_k$ при больших значениях \mathbf{k} , а Σ^0 — то же для Σ_k^0 при малых \mathbf{k} . Расходимость перенормированной корреляционной длины $\tilde{\xi}$ при $t = t_0$ означает, что определения (2.28a), (2.28b) применимы лишь на стадии распада ($t \gg t_0$). Поскольку при $t \rightarrow \infty$ имеем $\Sigma^0(t) \rightarrow 1$, $\tilde{\Sigma}(t) \rightarrow 3$, то для размера домена получаем $L(t) \rightarrow \infty$, а перенормировка корреляционной длины сводится к множителю $\tilde{\xi}/\xi = 2^{-1/2}$ и является практически несущественной.

Таким образом, изложенная схема дает правильные предельные соотношения на поздних стадиях распада: $\tilde{\xi}(t) \approx 2^{-1/2}\xi$, $L(t) \rightarrow \infty$. Для определения вида зависимости $L(t)$ достаточно воспользоваться следующими качественными соображениями. В случае несохраняющегося параметра порядка скорость изменения размера домена $\dot{L}(t)$ пропорциональна лапласовской силе, обусловленной кривизной поверхности домена $\sim L^{-1}$:

$$\frac{\dot{L}}{a} = \gamma \frac{a}{L} (\sigma a^2), \quad \gamma \sim \frac{D}{Ta^2}. \quad (2.29)$$

Здесь γ — кинетический коэффициент, связанный с коэффициентом диффузии D соотношением Эйнштейна–Смолуховского (a — межатомное расстояние, T — температура), σ — коэффициент поверхностного натяжения, определяющий интенсивность лапласовской силы. Интегрируя (2.29), получаем асимптотическое соотношение для несохраняющегося параметра порядка

$$L^2 = L_0^2 + D_b t, \quad D_b \sim \frac{\sigma a^2}{T} D, \quad (2.30)$$

где L_0 — начальное значение размера домена, D_b — эффективный коэффициент диффузии доменной границы.

Случай сохраняющегося параметра порядка сложнее. Здесь следует различать две стадии распада: начальную, когда ограничения, связанные с условием сохранения, не проявляются в масштабах всего образца, и стадию коалесценции, на которой в каждом домене размером L сформировались выделения фазы величиной $R < L$ и дальнейший их рост идет за счет объединения доменов, которое обеспечивается "поеданием" мелких выделений крупными. На первой стадии, как видно из уравнения движения (2.10), условие сохранения добавляет две степени производной по координате в выражении для обобщенной силы. Следовательно, можно полагать, что и в уравнении типа (2.29) для размера домена появится множитель L^{-2} в правой части. В результате получаем зависимость $L^4 \propto t$. На стадии коалесценции основную роль играют не границы доменов, а поверхность выделений. Согласно работе [12] скорость \dot{R} изменения размера выделений пропорциональна потоку $j = D|\nabla\Psi| \approx \approx D\eta_0(R)/R \approx DR_c/R^2$, где D — коэффициент диффузии, $\eta_0(R) \approx R_c/R$ — равновесное значение параметра порядка на границе выделения размера R [12], $R_c = 2\sigma\Omega/\eta_0 T$ — критический радиус выделения, Ω —

атомный объем, η_0 — равновесное значение параметра порядка в гетерофазной системе выделений. Отсюда сразу видно, что на стадии коалесценции

$$R^3 = R_0^3 + 3DR_{ct}t, \quad (2.31)$$

где R_0 — начальный радиус выделения. Отметим, что понижение степени зависимости $L^p \propto t$ от 4 до 3 связано с тем, что на стадии, предшествующей коалесценции, скорость \dot{L} пропорциональна дивергенции потока \mathbf{j} , тогда как при коалесценции реализуется прямая связь $\dot{L} \propto \dot{R} \propto j$.

Таким образом, временная зависимость макроскопического масштаба системы на поздней стадии спинодального распада характеризуется асимптотикой

$$L^p \propto t, \quad (2.32)$$

где отсчет производится от начального значения L_0^p . Показатель p пробегает значения 2, 3, 4 соответственно для случаев несохраняющегося параметра порядка, процесса коалесценции и предшествующей ему стадии для сохраняющегося параметра.

Изложенные соображения представляют лишь качественную сторону явления. Они имеют наводящий характер при построении полевой теории [18, 19], позволяющей полностью исследовать картину спинодального распада. Она представляется исходным коррелятором $C(\mathbf{r}, t)$ поля $\Psi(\mathbf{r}, t)$ и его составляющими $C^0(\mathbf{r}, t)$, $\tilde{C}(\mathbf{r}, t)$, описывающими конденсатную $\eta(\mathbf{r}, t)$ и флукутирующую $\phi(\mathbf{r}, t)$ компоненты параметра порядка (2.18). Однако поскольку величина η , принимающая в равновесии значения $\pm\eta_0$, носит изинговский характер, то ее нельзя использовать как переменное поле в континуальном интеграле, на рассмотрении которого основана полевая схема. Изначальной причиной такой ситуации является нарушение эргодичности системы, обусловленное образованием доменов с различными знаками равновесного параметра порядка $\pm\eta_0$. В результате фазовое пространство системы разбивается на две изолированные области, по которым невозможно одновременно выполнить континуальное интегрирование по полю $\eta(\mathbf{r}, t)$. Изложим технический прием [19], позволяющий обойти указанные особенности.

Он основан на том наблюдении, что потеря эргодичности обусловлена наличием хорошо выраженных, тонких доменных границ, вблизи которых пространственное распределение параметра порядка вдоль оси l , перпендикулярной границе, можно аппроксимировать кинковой зависимостью $\eta(l) = \tanh(l/\xi)$, где толщина $\xi < \zeta$ бесконечно мала. Таким образом, в пределе $\xi \rightarrow 0$ плавное изменение координаты l отвечает скачкообразному изменению параметра порядка при переходе из одной области фазового пространства в другую. Поэтому Мазенко [19] предложил вместо изинговского поля $\eta(\mathbf{r}, t)$ ввести вспомогательное поле $l(\mathbf{r}, t)$, связанное с $\eta(\mathbf{r}, t)$ следующим образом:

$$\eta = \tanh l = \int_0^\infty \frac{\sin(lz)}{\sinh(\pi z/2)} dz, \quad (2.33)$$

где второе равенство дает интегральное представление функции $\tanh l$. Его использование удобно тем, что

позволяет легко выполнить усреднение по полю l , распределение по которому предполагается простейшим из нетривиальных, т.е. гауссовым. Так, для коррелятора $C^0(\mathbf{r}, t) = \eta_0^{-2}\langle\eta(\mathbf{r}, t)\eta(\mathbf{0}, t)\rangle$, взятого в совпадающие моменты времени t , получаем выражение

$$C^0(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty \int_0^\infty dz_1 dz_2 \frac{\exp[-\Lambda(t)(z_1^2 + z_2^2)/2]}{\sinh(\pi z_1/2) \sinh(\pi z_2/2)} \times \times \sin[\Lambda(\mathbf{r}, t)z_1 z_2] \quad (2.34)$$

через коррелятор $\Lambda(\mathbf{r}, t) = \langle l(\mathbf{r}, t)l(\mathbf{0}, t)\rangle$ вспомогательного поля. Характер этой связи удобно проследить для одноточечных корреляторов $\Lambda(t) \equiv \Lambda(\mathbf{r} = \mathbf{0}, t)$, $C^0(t) \equiv C^0(\mathbf{r} = \mathbf{0}, t)$ при больших временах, когда значение $\Lambda(t)$ велико, и (2.34) дает

$$C^0(t) \approx 1 - \left[\frac{2}{\pi\Lambda(t)} \right]^{1/2}. \quad (2.35)$$

Наличие границ толщиной ξ на расстоянии L означает, что равновесное значение $\pm\eta_0$ реализуется в областях размером $\sim (L - \xi)$, приходящихся на домен размером $\sim L$. Поэтому в d -мерном пространстве одноточечный конденсатный коррелятор имеет оценку $C^0(t) = \eta_0^{-2}\langle\eta^2(\mathbf{r}, t)\rangle \sim [(L - \xi)/L]^d \approx 1 - d\xi/L$ [19]. Подставляя ее в (2.35), находим предельное соотношение $\Lambda(t) \sim (L/d\xi)^2 \propto L^2(t)$. Таким образом, бесконечно возрастающий при $t \rightarrow \infty$ коррелятор $\Lambda(t)$ играет роль параметра эволюции системы (физического времени).

Перейдем теперь к нахождению уравнений для основных корреляторов задачи $C^0(\mathbf{r}, t)$, $\tilde{C}(\mathbf{r}, t)$. Для первого из уравнения (2.10) имеем

$$\left\langle \eta(2) \left\{ \frac{\partial\eta(1)}{\partial t_1} - \hat{\Gamma}(1)[\eta(1) - \eta^3(1) + \nabla_1^2\eta(1)] \right\} \right\rangle = 0. \quad (2.36)$$

Здесь аргументы $i = 1, 2$ означают наборы \mathbf{r}_i , t_i , оператор $\hat{\Gamma} = (-\nabla^2)^n$, $n = 0$ и 1 для несохраняющегося и сохраняющегося параметров порядка. Вводя коррелятор высшего ранга

$$K(1, 2) = \langle [\eta(1) - \eta^3(1)]\eta(2) \rangle, \quad (2.37)$$

получаем исходное уравнение в виде

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - \hat{\Gamma}(\mathbf{r})\nabla^2 \right] C^0(\mathbf{r}, t) - \hat{\Gamma}(\mathbf{r})K(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (2.38)$$

где $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ и приняты совпадающие времена $t_1 = t_2 \equiv t > t_0$. Дважды дифференцируя (2.33) по l , легко получить соотношение

$$2K(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial C^0(\mathbf{r}, t)}{\partial \Lambda(t)} \Big|_{\Lambda(\mathbf{r}, t)}, \quad (2.39)$$

где конденсатный коррелятор дается равенством (2.34). Физический смысл этого равенства состоит в том, что если в качестве временного параметра эволюции взять монотонно возрастающую величину $\Lambda(t) \sim L^2(t)$, то высший коррелятор (2.37) определяет производную от конденсатного $C^0(\mathbf{r}, t)$ по параметру эволюции. Кроме

того, можно ввести производную

$$B(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial C^0(\mathbf{r}, t)}{\partial A(\mathbf{r}, t)} \Big|_{A(t)}, \quad (2.40)$$

взятую по пространственно-временной зависимости вспомогательного коррелятора $A(\mathbf{r}, t)$. В результате соотношения (2.38)–(2.40) дают уравнения для вспомогательного коррелятора:

$$B(\mathbf{r}, t) \dot{A}(\mathbf{r}, t) = 2K(\mathbf{r}, t) \dot{A}(t) + \widehat{\Gamma}(\mathbf{r}) [\nabla^2 C^0(\mathbf{r}, t) + K(\mathbf{r}, t)]. \quad (2.41)$$

Соотношения (2.34), (2.39)–(2.41) представляют замкнутую систему интегродифференциальных уравнений, описывающих эволюцию системы. В общем случае они могут быть решены только численно [19], однако на поздних стадиях распада возможно и аналитическое рассмотрение. Действительно, если при $t \rightarrow \infty$ отношение $A(\mathbf{r}, t)/A(t)$ становится независимым от времени, то нетрудно видеть, что связь корреляторов C^0, A можно свести к простой зависимости

$$A(\mathbf{r}, t) = A(t) \sin\left(\frac{\pi}{2} C^0(\mathbf{r}, t)\right). \quad (2.42)$$

Тогда производные (2.39), (2.40) принимают вид

$$\begin{aligned} K(\mathbf{r}, t) &= [\pi A(t)]^{-1} \tan\left(\frac{\pi}{2} C^0(\mathbf{r}, t)\right), \\ B(\mathbf{r}, t) &= \frac{2}{\pi A(t)} \left[\cos\left(\frac{\pi}{2} C^0(\mathbf{r}, t)\right) \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

По сути дела, соотношения (2.42), (2.43) представляют простейшую аппроксимацию связи конденсатного и вспомогательного корреляторов на поздней стадии распада. Подставляя их в (2.38), находим основное уравнение полевой теории [19]

$$\dot{C}^0(\mathbf{r}, t) = \widehat{\Gamma}(\mathbf{r}) \left\{ \nabla^2 C^0(\mathbf{r}, t) + L^{-2} \tan\left[\frac{\pi}{2} C^0(\mathbf{r}, t)\right] \right\}, \quad (2.44)$$

где в согласии с предельным соотношением (2.35) введен характерный масштаб

$$L \equiv (\pi A)^{1/2} = \sqrt{2}(1 - C^0)^{-1}. \quad (2.45)$$

В случае несохраняющегося параметра порядка, где $\widehat{\Gamma}(\mathbf{r}) = 1$, (2.44) напоминает диффузионное уравнение, в котором, однако, ввиду расходности тангенса при $C^0(\mathbf{r}, t) \rightarrow 1$ рост доменов не приводит к исчезновению неоднородного слагаемого.

Будем искать решение в скейлинговом виде

$$C^0(\mathbf{r}, t) = F(\mathbf{x}(t)), \quad \mathbf{x}(t) = \frac{\mathbf{r}}{L(t)}. \quad (2.46)$$

Подстановка (2.46) в (2.44) дает

$$-\mu \mathbf{x} \nabla_x F(\mathbf{x}) = (-\nabla_x)^n \left\{ \nabla_x^2 F(\mathbf{x}) + \tan\left[\frac{\pi}{2} F(\mathbf{x})\right] \right\}, \quad (2.47)$$

где обозначено

$$\mu = L^{2n+1} \dot{L}. \quad (2.48)$$

Скейлинговое решение (2.46) допустимо лишь в том случае, если величина μ в (2.48) является постоянной. Тогда определение (2.48) приводит к зависимости (2.32), где, однако, выпадает значение $p = 3$, отвечающее процессу коалесценции. Причина будет выяснена ниже.

На малых расстояниях ($r \ll L$) конденсатный коррелятор имеет вид

$$C^0(\mathbf{r}, t) \approx 1 - \alpha \frac{r}{L(t)}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2}{\pi(d-1)}}, \quad (2.49)$$

где d — размерность системы. В фурье-представлении соотношение (2.49) отвечает закону Порода [32] $C_{\mathbf{k}}^0(t) \propto (kL)^{-(d+1)}$, обусловленному наличием антифазных границ. Действительно, связь зависимости (2.49) с наличием границ легко видеть [19], если принять одномерное ступенчатое распределение параметра порядка $\eta(r) = \eta_0 \text{sign}(r - r_0)$, где r_0 — координата границы. Тогда, усредняя по ее возможным значениям, находим соотношение

$$C^0(r) \equiv \frac{\eta_0^{-2}}{2L} \int_{-L}^{+L} \eta(r) \eta(0) dr_0 = 1 - \frac{|r|}{L}, \quad (2.50)$$

вид которого совпадает с (2.49).

На макроскопических расстояниях $r \gg L$ вид коррелятора $C^0(\mathbf{r}, t) = F(\mathbf{x})$, $x = r/L(t) \gg 1$ определяется наличием закона сохранения. В его отсутствии ($n = 0$) из (2.47) получаем

$$F \propto x^{-(d-\pi/2\mu)} \exp\left(-\frac{\mu x^2}{2}\right). \quad (2.51)$$

Соответственно для сохраняющегося параметра порядка ($n = 1$)

$$F \propto x^{-2d/3} \exp\left(-\frac{3}{8} \mu^{1/3} x^{4/3}\right) \cos\left(\frac{3^{3/2} \mu^{1/3}}{8} x^{4/3} + \varphi_0\right), \quad (2.52)$$

где φ_0 — начальная фаза. Характерно, что в первом случае имеем монотонное спадание корреляции значений $\pm \eta_0$ в разных доменах, тогда как во втором оно кроме того осциллирует.

Обсудим теперь вопрос о применимости уравнения (2.44) для описания процесса коалесценции [19]. При этом следует иметь в виду прежде всего, что при переходе от уравнения (2.10) для полного параметра порядка Ψ к уравнению (2.36) для его конденсатной составляющей η мы полностью пренебрели корреляцией с флуктуационной составляющей ϕ . Это допустимо в скейлинговом режиме, когда радиус выделения R пропорционален размеру L приходящейся на него области (именно такая ситуация имеет место на стадии распада, предшествующей коалесценции, когда показатель p в зависимости (2.32) равен 4). Переход к режиму коалесценции характеризуется, как известно [33], установлением когерентного режима в диффузионном потоке (диффузионное взаимодействие). Это означает, что компоненты η, ϕ в разбиении параметра порядка (2.18) перестают быть независимыми. В результате в уравнении (2.44) появляется слагаемое $\Pi(\mathbf{r}, t)$, описывающее влияние стохастического процесса диффузии на упорядочение. Вид этого

слагаемого можно установить, если учесть, что при подстановке скейлинговой зависимости (2.46) левая часть (2.44) преобразуется следующим образом:

$$\dot{C}^0(\mathbf{r}, t) = \dot{x} \nabla_x F(x) = -\frac{\dot{L}}{L} \mathbf{r} \nabla C^0(\mathbf{r}, t).$$

Следовательно, можно ожидать, что новое слагаемое в виде

$$\Pi(\mathbf{r}, t) = -z(t) \mathbf{r} \nabla C^0(\mathbf{r}, t), \quad z(t) = z_0 L^{-p}(t), \quad (2.53)$$

будет давать соизмеримый вклад на поздних стадиях распада.

Для установления значения показателя p следует обратиться к уравнению для флюктуационного коррелятора $\tilde{C}(\mathbf{r}, t) = \langle \phi(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{0}, t) \rangle$, связь которого с конденсатной составляющей $C^0(\mathbf{r}, t)$ отражается наличием слагаемого $-\Pi(\mathbf{r}, t)$ противоположного знака. В сравнении с (2.44) уравнение для $\tilde{C}(\mathbf{r}, t)$ обладает еще одним отличием, обусловленным различием флюктуационной и конденсатной собственно энергетических частей (см. (2.27)). Как было выяснено выше, это приводит к тому, что согласно (2.28а), (2.28б) при бесконечно возрастающем размере домена L корреляционная длина стремится к конечному пределу $\xi = 2^{-1/2}\zeta$. Следовательно, вместо лапласиана ∇^2 в (2.44) уравнение для диффузионной компоненты $\tilde{C}(\mathbf{r}, t)$ должно содержать разность $\nabla^2 - \tilde{k}^2$, где $\tilde{k} = 2\sqrt{2}/\xi$ — граничное значение волнового вектора. В результате уравнения, заменяющие (2.44) при описании коалесценции, записываются в виде [19]

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \nabla^4 + \frac{z_0}{L^p} \mathbf{r} \nabla \right) C^0(\mathbf{r}, t) = -\frac{\nabla^2}{L^2} \tan \left[\frac{\pi}{2} C^0(\mathbf{r}, t) \right], \quad (2.54)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \nabla^2 (\nabla^2 - \tilde{k}^2) \right] \tilde{C}(\mathbf{r}, t) = \frac{z_0}{L^p} \mathbf{r} \nabla C^0(\mathbf{r}, t). \quad (2.55)$$

В скейлинговом режиме конденсатная составляющая имеет вид (2.46), а для флюктуационной принимаем

$$\tilde{C}(\mathbf{r}, t) = L^{-y} G(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} = \frac{\mathbf{r}}{L(t)}, \quad (2.56)$$

где $G(x)$ — некоторая функция, показатель y подлежит определению. Подставляя (2.46), (2.56) в уравнение (2.55), видим, что при $p > 2$ (сохраняющийся параметр порядка) в левой части доминирует слагаемое с множителем \tilde{k}^2 , а само уравнение принимает вид

$$-\tilde{k}^2 L^{-2-y} \nabla_x^2 G(\mathbf{x}) = z_0 L^{-p} \mathbf{x} \nabla_x F(\mathbf{x}). \quad (2.57)$$

Отсюда следует связь

$$y = p - 2. \quad (2.58)$$

На стадии, предшествующей коалесценции, показатель $p = 4$ и согласно (2.58) $y = 2$. При этом члены уравнения (2.57) имеют порядок L^{-4} . На стадии коалесценции $p = 3$, $y = 1$ и (2.57) приобретает более низкий порядок малости L^{-3} . Таким образом, установление когерентного режима диффузии приводит к кроссоверу показателя p в (2.32) от большего значения 4 к меньшему 3. Данный вывод подтверждается результатами ренорм-группового исследования [11].

Укажем еще раз на то обстоятельство, что установление когерентного диффузионного режима обусловлено наличием границ выделений, размер которых R

не пропорционален размеру домена L (в теории [12] принимается также $(R/L)^d \ll 1$). Это видно из правой части уравнения (2.54) для конденсатного коррелятора. Действительно, в отсутствии резких границ выделений наиболее актуальны значения координаты $r \sim L$, при которых $1 - C^0(\mathbf{r}, t) \sim (r/L)^2$ и правая часть (2.54) имеет порядок L^{-4} . С появлением границ коррелятор приобретает неаналитический вид (2.49), в результате чего порядок нелинейного слагаемого в (2.54) понижается до L^{-3} . Именно это обстоятельство послужило причиной замены уравнения (2.44) на (2.54).

2.2. Бинодальный распад

Рассмотрим сначала, каким образом в однородной неравновесной системе, быстро переведенной в бинодальную область, гетерофазные флюктуации трансформируются в критический зародыш упорядоченной фазы [34]. Поскольку здесь реализуется фазовый переход первого рода, то в выражении (2.4) для термодинамического потенциала системы следует добавить слагаемое $(C/6)|\Psi|^6$ и принять коэффициенты A, C, β положительными, а B — отрицательным [16, 30]. В отличие от спинодального распада здесь в качестве масштаба изменения параметра порядка удобно принять величину $\eta_0 = (3|B|/4C)^{1/2}$. Тогда термодинамический потенциал, измеренный в единицах $\beta^{3/2} C^{-1/2}$, принимает вид

$$\Phi = \int \left\{ \varphi(\psi) + \frac{1}{2} |\nabla \psi|^2 \right\} d^3 r, \quad (2.59)$$

$$\varphi(\psi) = \frac{\Theta}{2} |\psi|^2 - \frac{1}{3} |\psi|^4 + \frac{1}{6} |\psi|^6, \quad (2.60)$$

где введен параметр $\Theta = 16AC/(3B)^2$, определяемый внешними условиями, а координата \mathbf{r} измерена в масштабе $\xi = (4/3)\sqrt{\rho C}|B|^{-1}$. Варьируя (2.59) по распределению $\psi(\mathbf{r})$, находим уравнение

$$\nabla^2 \psi = \left(\Theta - \frac{4}{3} |\psi|^2 + |\psi|^4 \right) \psi, \quad (2.61)$$

имеющее первый интеграл

$$\frac{1}{2} |\nabla \psi|^2 = \varphi(\psi), \quad (2.62)$$

где учтено, что ввиду граничных условий ($\nabla \psi = 0, \psi = 0$ при $r = \infty$) постоянная интегрирования равна нулю. Если в выражении (2.59) учесть кинетическую энергию плотностью $(1/2)|\dot{\psi}|^2$, где время измерено в единицах $(4/3)\sqrt{\rho C}|B|^{-1}$, ρ — эффективная плотность, то в левой части (2.61) появится слагаемое $-\ddot{\psi}$. Вводя координату $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - vt$, движущуюся со скоростью v , легко привести уравнение движения к прежнему виду (2.61), однако в правой части интеграла (2.62) появится член $-(v^2/2)|\psi|^2$, где скорость v измерена в единицах $(\beta/\rho)^{1/2}$. Интегрирование полученного выражения дает одномерное распределение параметра порядка для гетерофазной флюктуации [34]

$$|\psi(r)|^2 = \psi_m^2 \left\{ 1 + [1 - \psi_m^2(2 - \psi_m^2)^{-1}] \sinh^2(\zeta r') \right\}^{-1},$$

$$\zeta^2 = \psi_m^2(2 - \psi_m^2), \quad r' = r - vt, \quad (2.63)$$

где постоянная интегрирования ψ_m задает амплитуду солитона (2.63). Его вид (рис. 4) не зависит от скорости v

и параметра Θ , характеризующего внешние условия, а задается только амплитудой ψ_m начальной флюктуации. Из рис. 4 видно, что при фазовом переходе первого рода флюктуация параметра порядка приобретает характер гетерофазной (появляются ярко выраженные границы), как только амплитуда достигает максимального значения $\psi_m = 1$.

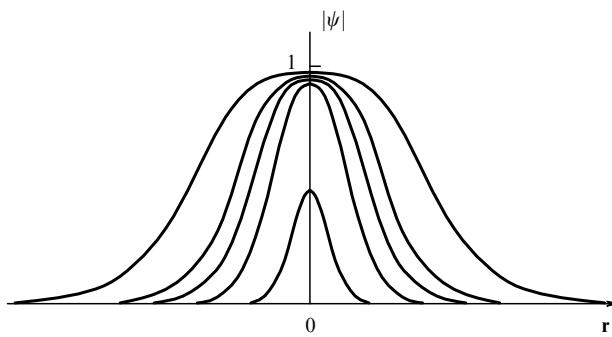


Рис. 4. Изменение профиля солитона (2.63) с ростом амплитуды [34]

Для выяснения условий, при которых это может происходить, подставим зависимость (2.63) в граничное условие

$$\varphi(\psi) - \frac{v^2}{2} |\psi|^2 = 0, \quad (2.64)$$

следующее из обобщения уравнения (2.62) на случай $v \neq 0$ (физически оно отвечает закону сохранения энергии солитона, движущегося со скоростью v). В результате получаем связь

$$\psi_m^2 = 1 - \sqrt{3(v^2 - \Theta) + 1} \quad (2.65)$$

между свободными параметрами задачи. Отсюда видно, что движение солитона приводит к уменьшению его амплитуды тем большему, чем выше скорость v . На рис. 5 приведена эта зависимость при различных значениях параметра Θ . Величина $\Theta = 1/3$ является граничной: при больших значениях Θ реализуются только движущиеся солитоны, в обратном случае ($\Theta < 1/3$) с ростом амплитуды ψ_m они могут останавливаться.

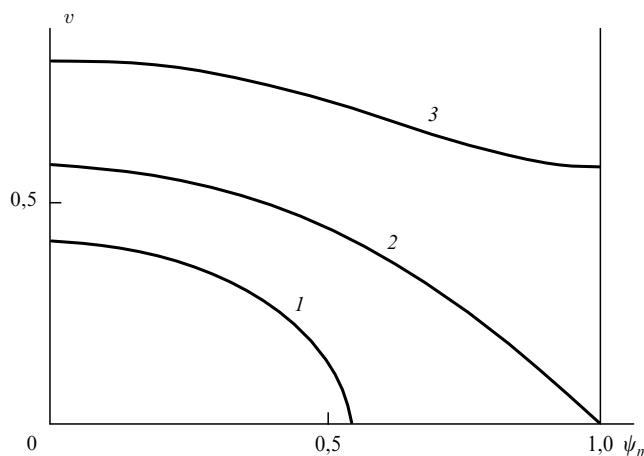


Рис. 5. Зависимость скорости движения солитона от его амплитуды: (1) $\Theta < 1/3$, (2) $\Theta = 1/3$, (3) $\Theta > 1/3$ [34]

Поскольку роль зародыша фазы может играть только покоящийся солитон, то физически это означает, что условие $\Theta = 1/3$ определяет линию бинодали, под которой реализуется классический механизм зарождения и роста.

На рис. 6 представлена найденная из (2.63) зависимость характерной ширины солитона R от амплитуды ψ_m . Видно, что солитон расплывается ($R \rightarrow \infty$) как при $\psi_m \rightarrow 0$, так и при $\psi_m \rightarrow 1$. Первый случай отвечает коллапсу гетерофазной флюктуации, а второй — переходу солитона в пару "кинк–антикинк". Очевидно, такой переход и представляет образование зародыша.

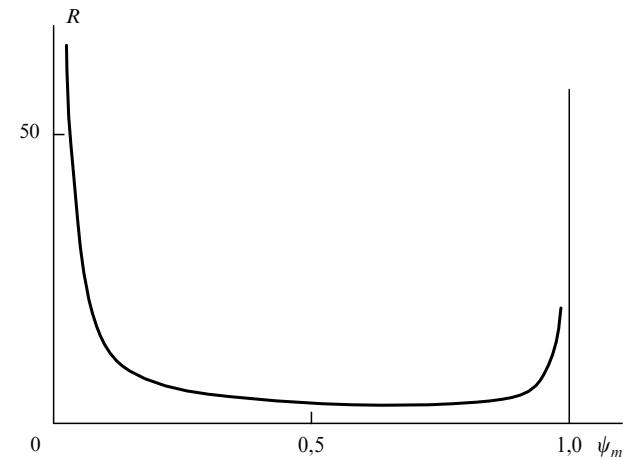


Рис. 6. Зависимость ширины солитона от амплитуды [34]

Учитывая закон сохранения энергии (2.62), нетрудно показать, что полная энергия, приходящаяся на один солитон, записывается как

$$\sigma = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\psi(r)) dr. \quad (2.66)$$

Интегрируя, получаем зависимость, вид которой показан на рис. 7. Характерно, что в бинодальной области ($\Theta < 1/3$) зависимость $\sigma(\psi_m)$ имеет барьер, отделяющий малые значения амплитуды от предельно допустимых.

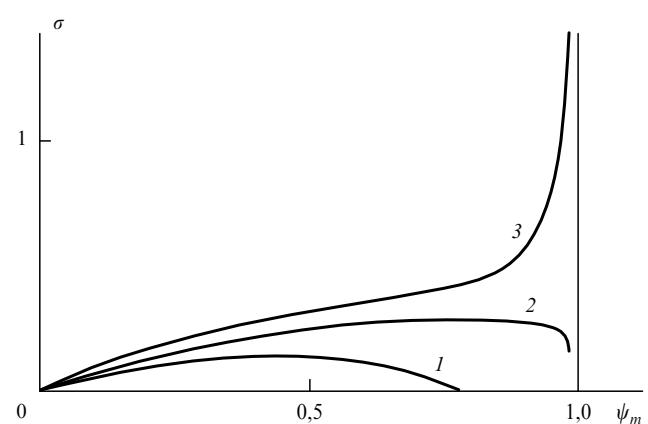


Рис. 7. Зависимость энергии солитона от амплитуды: (1) $\Theta < 1/3$, (2) $\Theta = 1/3$, (3) $\Theta > 1/3$ [34]

Над бинодалью рост амплитуды вблизи $\psi_m = 1$ приводит, как и следовало ожидать, к неограниченному увеличению энергии системы.

Картина зарождения выделений упорядоченной фазы при плавном понижении температуры представляется следующим образом. Над бинодалью максимальная амплитуда солитона $\psi_m = 0$, и из равенства (2.65) следует, что скорость солитона стремится к характерному значению $v_m = \Theta^{1/2}$ (в случае мартенситного превращения v_m представляет скорость звука). Таким образом, над бинодалью солитоны представляют волны упорядочения, т.е. динамические флуктуации, распространяющиеся со скоростью $\Theta^{1/2}$. При понижении температуры спадает параметр Θ , приводя к уменьшению этой скорости. В точке бинодали $\Theta = 1/3$ появляются гетерофазные флуктуации, скорость которых v намного меньше значения v_m тем в большей степени, чем больше амплитуда ψ_m . Согласно (2.65) эта связь выражается равенством

$$\left(\frac{v}{v_m}\right)^2 = \left(1 - \frac{\Theta_c}{\Theta}\right) + \frac{1}{3}(1 - \psi_m^2)^2, \quad (2.67)$$

где $v_m = \Theta^{1/2}$, $\Theta_c = 1/3$. Отсюда (см. также рис. 5) видно, что при $\psi_m \leq 1$, $\Theta \leq \Theta_c$ скорость солитона $v \ll v_m$. Иными словами, гетерофазная флуктуация получается вследствие остановки динамической волны упорядочения, происходящей при росте ее амплитуды.

Исследовав картину образования одного зародыша, перейдем к рассмотрению их ансамбля в процессе выпадения новой фазы. При этом для определенности будем иметь в виду распад пересыщенного твердого раствора, где роль параметра порядка играет отклонение концентрации от среднего значения. Как уже отмечалось, на первой стадии протекает флуктуационное образование зародышей, в процессе которого стабилизируются все выделения размером R больше начального критического значения R_{c0} , определяемого пересыщением $\Delta_0 = \bar{C} - C_\infty$ посредством равенств

$$R_{c0} = \frac{C_\infty}{\Delta_0} R_s, \quad R_s = \frac{2\sigma\Omega}{T}, \quad (2.68)$$

где σ — коэффициент поверхностного натяжения, Ω — атомный объем, T — температура в энергетических единицах, \bar{C} , C_∞ — средняя и равновесная концентрации избыточного компонента вблизи плоской границы раздела фаз ($R = \infty$). Равновесное распределение докритических зародышей задается функцией [30]

$$f_0(R) = f_0(R_{c0}) \exp\left[\frac{4\pi\sigma}{T}(R - R_{c0})^2\right],$$

$$f_0(R_{c0}) \propto \exp\left[-\frac{4\pi\sigma R_{c0}^2}{3T}\right]. \quad (2.69)$$

Критические зародыши образуются к моменту времени

$$t_0 = \frac{R_{c0}^3}{DR_s C_\infty} \ln \frac{4\pi DR_s R_{c0}}{\Omega v_a}, \quad (2.70)$$

где D — коэффициент диффузии, v_a — характерная скорость миграции атомов. В стационарных условиях число зародышей, прошедших в закритическую область за единицу времени в единичном объеме метастабильной

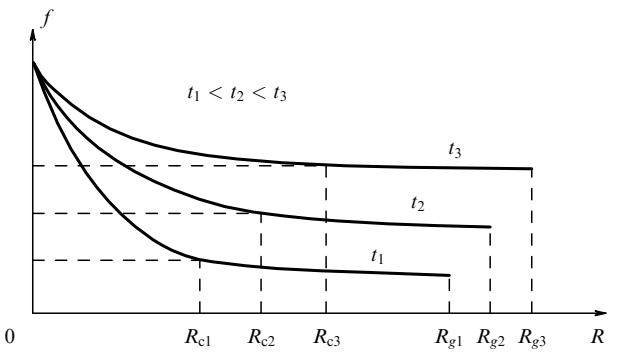


Рис. 8. Вид функции распределения размеров выделений на стадии, предшествующей коалесценции ($R_c \ll R_g$) [13]

фазы, выражается равенством [13]

$$j = \left(\frac{\sigma}{T}\right)^{1/2} \frac{D\Omega C_\infty}{2\pi R_{c0}^3} f_0(R_{c0}). \quad (2.71)$$

При значительном ($\Delta_0 \gg C_\infty$) начальном пересыщении дальнейший процесс распада складывается из трех стадий [13]. В течение первой, лежащей в интервале от t_0 до времени

$$t_1 \approx \frac{\Omega^2 v_a^2}{16\pi^2 D^3 R_s^2 \Delta_0} \exp\left(\frac{4\pi D R_s R_{c0}}{5\Omega v_a}\right), \quad (2.72)$$

переход зародышей в закритическую область, интенсивность которого характеризуется потоком (2.71), не сказывается существенно на пересыщении ($\Delta(t) \sim \Delta_0$) и критический радиус R_c слабо изменяется со временем:

$$\frac{R_{c0}}{R_c} = 1 - \left(\frac{t}{t_1}\right)^{5/2}. \quad (2.73)$$

При этом функция распределения $f(R, t)$ имеет вид, представленный на рис. 8, и является локально равновесной везде, кроме узкой окрестности максимального размера R_g , изменяющегося со скоростью [13]

$$\frac{dR_g}{dt} = D\Delta_0 \frac{R_g - R_{c0}}{R_g^2}. \quad (2.74)$$

С дальнейшим увеличением времени ($t > t_1$) содержание избыточного компонента в выделениях становится сравнимым с его содержанием в матрице и пересыщение начинает быстро спадать, а критический радиус R_c растет согласно равенству

$$R_c = R_{c0} \exp\left(\frac{At}{t_1}\right), \quad A \sim 1, \quad (2.75)$$

стремясь к медленно изменяющемуся значению R_g . При этом большинство выделений имеет размер $R > R_c$ и число их практически неизменно. Однако, начиная с момента времени порядка

$$t_2 = t_1 \ln \frac{64\pi^3 D^4 R_s^4 C_\infty t_1}{\Omega^3 v_a^3}, \quad (2.76)$$

условие $R_c \ll R_g$ нарушается и некоторые выделения переходят из закритической ($R > R_c$) области в подкри-

тическую ($R < R_c$). При этом начинается процесс коалесценции, в течение которого большие выделения "поедают" малые. Здесь $R_g = (3/2)R_c$, а критический радиус растет по закону [12]

$$R_c^3 = \frac{4}{9} D R_s C_\infty t. \quad (2.77)$$

Функция распределения выделений по размерам имеет куполообразный вид, максимум которого смещается со временем в сторону больших размеров. Подробное описание стадии коалесценции содержится в оригинальной работе [12]. Вид временной зависимости критического объема зародыша на всех стадиях роста выделений представлен на рис. 9.

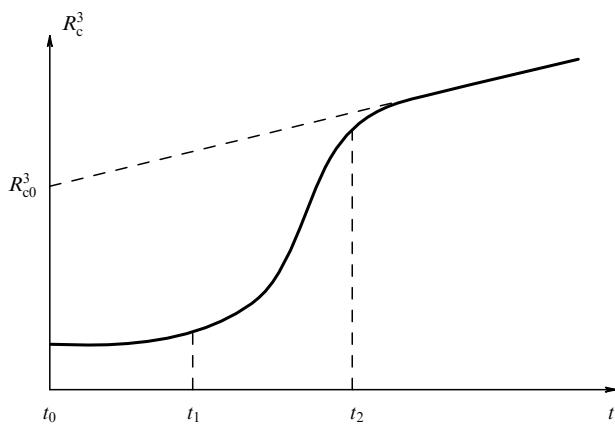


Рис. 9. Вид временной зависимости критического объема ($t_0 \div t_1$ — стадия слабого изменения пересыщения; $t_1 \div t_2$ — стадия истощения избыточного компонента; $t > t_2$ — коалесценция Лифшица–Слезова)

Механизм коалесценции по Лифшицу–Слезову, когда атомы недостающего компонента диффундируют поодиночке от малых выделений к большим, не является единственным возможным. Дисперсная система может коагулировать также за счет движения отдельных выделений в матрице. Это возможно в том случае, если атомы уходят из слоев решетки матрицы, находящихся по одну сторону включения, в новые слои по другую сторону. Имеют место три механизма диффузионного движения выделений. Первый связан с диффузионными потоками вакансий в матрице, второй — с переносом атомов матрицы через выделения, третий — с диффузией по поверхности раздела матрицы с выделениями. В первых двух случаях коэффициент диффузии выделений D_p имеет порядок $D(\Omega/R^3)$, где D — соответствующая величина для отдельных атомов, R — размер выделений; в случае поверхностной диффузии атомов с коэффициентом D_s имеем $D_p \sim D_s(\Omega^{4/3}/R^4)$. Таким образом, при характерном размере $R \sim 10 \div 10^2 \text{ \AA}$ имеем $D_p \leq 10^{-3}D$ при первом и втором механизмах и $D_p \leq 10^{-4}D_s$ — при третьем.

Время удвоения среднего объема включений τ определяется по порядку величины следующими выражениями [16]: на стадии роста выделений из раствора ($t_1 < t < t_2$) получаем оценку $\tau \sim t_1$, определяемую формулой (2.72); при коалесценции по Лифшицу–Слезову [12]

$$\tau \sim \frac{T}{\Omega D \sigma} R^3; \quad (2.78)$$

соответственно при движении, связанным с диффузией в матрице или выделении, имеем

$$\tau_v \sim 0,1 \frac{R^5}{\Omega D p}, \quad (2.79)$$

где p — объемная доля выделений; и, наконец, при движении включений, связанном с поверхностными диффузионными потоками,

$$\tau_s \sim \frac{R^6}{\Omega^{4/3} D_s p}. \quad (2.80)$$

Используя характерные для металлических сплавов значения $R \sim 10 \div 10^2 \text{ \AA}$, $\Omega \sim 10^{-23} \text{ см}^3$, $p \sim 10^{-2}$, $T \sim 10^{-13} \text{ эрг}$, $\sigma \sim 10 \text{ эрг/см}^2$, получаем $\tau_v/\tau \sim 10 \div 10^3$, $\tau_s/\tau \sim (10^3 \div 10^6)D/D_s$. Таким образом, при движении выделений, лимитируемом объемной диффузией вакансий, коагуляция по механизму Лифшица–Слезова проходит, как правило, более интенсивно, в то время как в случае поверхностной диффузии коагуляция за счет движения выделений может оказаться превалирующей (последнее имеет место при малых значениях $R^3(D/D_s)$, т.е. при малых размерах R и температурах T).

3. Использование суперсимметричного подхода для описания релаксации термодинамической системы

Разница подходов, описанных в разделе 2, наглядным образом отражается известными моделями гомогенных (динамических) и гетерофазных (квазистатических) флюктуаций. Из рис. 2 видно, что первые представляют изменяющиеся по амплитуде волны параметра порядка, вторые — зародыши новой фазы. Как уже отмечалось, гомогенные флюктуации являются хорошим представлением при описании спинодального механизма упорядочения, гетерофазные — для бинодального. Для дальнейшего принципиально важно, что гомогенные флюктуации, будучи волнами параметра порядка, отвечают коллективным возбуждениям термодинамической системы, а имеющие почти ступенчатую форму гетерофазные — одиночным. Поскольку реальное распределение параметра порядка в спинодальной области представляется суперпозицией гомогенных флюктуаций, то их ансамбль можно рассматривать как бозевский. Для гетерофазной же флюктуации выполняется своеобразное правило запрета — в данной точке (точнее сказать, физически малом объеме) либо она есть, либо ее нет. В этом смысле можно считать, что ансамбль гетерофазных флюктуаций является псевдофермиевским².

Указанные обстоятельства представляют основу излагаемого ниже суперсимметричного метода описания термодинамической системы.

² Отметим во избежание недоразумений, что в отличие от обычных квантовых систем типа фононов или электронной жидкости здесь рассматривается ансамбль классических объектов (выделений фазы). Поэтому формальное применение методов квантовой статистики к такой системе является не более чем удобным техническим приемом. В качестве precedента укажем микроскопическую теорию упорядочения атомов в твердых растворах [16].

3.1. Формулировка задачи

Пусть фазовое превращение характеризуется пространственно-временной зависимостью параметра порядка $\eta(\mathbf{r}, t)$, который может быть и комплексным. Из всех возможных сценариев течения фазового перехода ограничимся исследованием простейшего, в ходе которого система резко переводится из области существования неупорядоченной фазы ($\eta = 0$) в область фазовой диаграммы, где равновесное значение η_0 параметра порядка отлично от нуля. Тогда эволюция системы описывается уравнением Ланжевена, имеющим в рамках модели Гинзбурга–Ландау форму (2.10), которой удобно придать вид

$$\begin{aligned} \dot{\eta}(\mathbf{r}, t) &= f(\mathbf{r}, t) + \zeta(\mathbf{r}, t); \\ f &= \widehat{\Gamma}[\eta(1 - |\eta|^2) + \nabla^2 \eta], \quad \widehat{\Gamma} = (-\nabla^2)^n. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Здесь слагаемое f обусловлено детерминированной силой, ζ — флуктуациями, $n = 0$ и 1 для случаев несохраняющегося и сохраняющегося параметра порядка соответственно. Величина η в (3.1) и ниже измерена в единицах равновесного значения η_0 , а время, дифференцирование по которому обозначено точкой, отнесено к масштабу релаксации τ (последний определяется равенством $\tau = \chi/\gamma$ для несохраняющегося параметра, где χ — восприимчивость, γ — кинетический коэффициент, и $\tau = \chi\eta_0^2 T/D\zeta$ для сохраняющегося, где ζ — корреляционная длина, T — температура в энергетических единицах, D — коэффициент диффузии [16]). Флуктуационное слагаемое $\zeta(\mathbf{r}, t)$ принимается в простейшем виде белого шума, интенсивность которого определяется обобщением равенства (2.3):

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t)\zeta(\mathbf{0}, 0) \rangle = 2\Theta\widehat{\Gamma}\delta(\mathbf{r})\delta(t). \quad (3.2)$$

В согласии с (3.1) здесь величины ζ , \mathbf{r} , t измерены в единицах η_0/τ , ζ , τ соответственно, параметр интенсивности флуктуаций $\Theta = (\chi/\eta_0^2\zeta^3)T$ для несохраняющегося параметра и $\Theta = (\tau/\eta_0^2\zeta^2)D$ для сохраняющегося.

В рамках полевой формулировки воспользуемся методом стохастического производящего функционала [25]

$$\begin{aligned} Z\{u(\mathbf{r}, t)\} &= \left\langle \int \exp \left\{ \int u(\mathbf{r}, t)\eta(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} dt \right\} \times \right. \\ &\times \prod_{(\mathbf{r}, t)} \delta\{\dot{\eta}(\mathbf{r}, t) - f(\mathbf{r}, t) - \zeta(\mathbf{r}, t)\} \times \\ &\times \left. \text{Det} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial t} \right)_{t, t'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{\delta f(\mathbf{r}, t)}{\delta \eta(\mathbf{r}', t')} \delta(t - t') \right\} D\eta(\mathbf{r}, t) \right\rangle_\zeta, \end{aligned} \quad (3.3)$$

где $u(\mathbf{r}, t)$ — произвольное (пробное) поле, $(\partial/\partial t)_{t, t'}$ — оператор дифференцирования по времени, записанный в континуально-матричной форме, детерминант представляет якобиан перехода от поля $\zeta(\mathbf{r}, t)$ к $\eta(\mathbf{r}, t)$. Усреднение по шуму ζ производится с помощью гауссова интегрирования:

$$\langle \Phi \rangle_\zeta = \int \Phi \exp \left[-\frac{1}{4\Theta\widehat{\Gamma}} \int \zeta^2(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} dt \right] D\zeta(\mathbf{r}, t). \quad (3.4)$$

Вводя бозонное поле $\varphi(\mathbf{r}, t)$ и фермионную пару $\bar{\psi}(\mathbf{r}, t)$, представляющую грассмановы переменные со свойствами [35]

$$\begin{aligned} \{\bar{\psi}, \psi\} &= \{\psi, \psi\} = \{\bar{\psi}, \bar{\psi}\} = 0, \quad \psi^2 = \bar{\psi}^2 = 0; \\ \int d\psi &= \int d\bar{\psi} = 0, \quad \int \psi d\psi = \int \bar{\psi} d\bar{\psi} = 1, \end{aligned} \quad (3.5)$$

с использованием тождеств

$$\delta\{\eta\} = \int_{-i\infty}^{i\infty} \exp(-\varphi x) D\varphi, \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} \text{Det}(A)_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} &= \int_{t, t'} \exp \left\{ - \int \int \bar{\psi}(\mathbf{r}, t) A(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \times \right. \\ &\times \left. \psi(\mathbf{r}', t') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' dt dt' \right\} D\bar{\psi}(\mathbf{r}, t) D\psi(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (3.7)$$

для случая потенциальных сил $f(\mathbf{r}) = -\delta V/\delta\eta(\mathbf{r})$ приводим выражение (3.3) к виду функционального интеграла евклидовой теории поля [26]

$$\begin{aligned} Z\{u(\mathbf{r}, t)\} &= \int \exp \left\{ \int u(\mathbf{r}, t)\eta(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} dt \right\} \times \\ &\times \exp \left(-\frac{V\{\eta_f\} - V\{\eta_i\}}{2\Theta} \right) D\eta_f D\eta_i \times \\ &\times \int_{\eta_i}^{\eta_f} \exp \left(-\Theta^{-1} \int \mathcal{L} d\mathbf{r} dt \right) D\eta D\phi D\bar{\psi} D\psi \end{aligned} \quad (3.8)$$

с лагранжианом, задаваемым равенством

$$\mathcal{L} = -\phi^2 - \phi \frac{\delta V}{\delta \eta(\mathbf{r})} + \frac{\dot{\eta}^2}{4} + \bar{\psi}(\mathbf{r}) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\delta^2 V}{\delta \eta(\mathbf{r}) \delta \eta(\mathbf{r}')} \right) \psi(\mathbf{r}'). \quad (3.9)$$

При выводе выражений (3.8), (3.9) и везде, кроме ниже следующих равенств (3.67)–(3.73), вместо φ введена новая переменная $\phi = \varphi + \dot{\eta}/2\Theta$ и произведены замены $\Theta\phi$ на ϕ , $\Theta^{1/2}\bar{\psi}$ на $\bar{\psi}$ и $\Theta^{1/2}\psi$ на ψ . В (3.8) η_i , η_f представляют начальное и конечное распределения поля $\eta(\mathbf{r})$, $V\{\eta(\mathbf{r})\}$ — синергетический потенциал неравновесной системы. Замечательное свойство функционала (3.8) состоит в том, что благодаря потенциальности сил вся необратимость, присущая диссипативной системе, содержится во множителе $\exp\{-[V\{\eta_f\} - V\{\eta_i\}]/2\Theta\}$, содержащем граничные значения синергетического потенциала, но не зависящем от лагранжиана. Это позволяет ввести неравновесный аналог термодинамического потенциала

$$\begin{aligned} \Omega\{\eta(\mathbf{r}, t)\} &= \mathcal{F}\{\eta(\mathbf{r}, t)\} - \mathcal{R}\{\eta(\mathbf{r}, t)\}; \\ \mathcal{F} &= -\ln \int_{\eta_i}^{\eta_f} \exp \left(-\Theta^{-1} \int \mathcal{L} d\mathbf{r} dt \right) D\eta D\phi D\bar{\psi} D\psi, \\ 2\Theta\mathcal{R} &= V\{\eta_i\} - V\{\eta_f\}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

где \mathcal{F} играет роль свободной энергии, \mathcal{R} представляет производство энтропии.

Выражения (3.8), (3.10) позволяют сформулировать вариационный принцип потери эргодичности [26]. Действительно, поскольку для сильно неравновесной сис-

темы разность $V\{\eta_i\} - V\{\eta_f\}$ весьма велика, а интервал физически значимых величин $0 < \eta \leq 1$ ограничен, то существенный вклад в интеграл по η_i дает лишь малая область вблизи минимума функционала $\Omega\{\eta\}$. Однако чтобы значение статистической суммы

$$Z \equiv Z\{0\} = \int \exp(-\Omega\{\eta(\mathbf{r}, t)\}) D\eta_i D\eta_f \quad (3.11)$$

не расходилось, требуется, чтобы в точке $\eta = \eta_0$ минимума функционала $\Omega\{\eta\}$ выполнялось условие $\Omega\{\eta_0\} = 0$, отражающее наличие суперсимметрии. Таким образом, стационарное состояние определяется условиями

$$\frac{\delta\Omega}{\delta\eta(\mathbf{r}, t)} = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\eta(\mathbf{r}, t)} = \frac{f(\mathbf{r})}{2\Theta},$$

$$\Omega\{\eta(\mathbf{r}, t)\} = 0 \quad \text{или} \quad \mathcal{F}\{\eta(\mathbf{r}, t)\} = \mathcal{R}\{\eta(\mathbf{r}, t)\}, \quad (3.12)$$

где $f(\mathbf{r}) = -\delta V/\delta\eta(\mathbf{r})$ — сила, сопряженная параметру порядка. При одновременном выполнении этих условий неравновесная система будет находиться в эргодическом состоянии, вблизи которого динамические и квазистатические флуктуации не различаются. Очевидно, такая ситуация возможна лишь при малых амплитудах флуктуаций. С их нарастанием в течение времени выдержки неравновесной системы условие $\Omega\{\eta(\mathbf{r}, t)\} = 0$ нарушается, в результате чего возникает нестационарное неэргодическое состояние с нарушенной суперсимметрией. Физически это связано с тем, что формирование межфазной поверхности в результате выделения гетерофазных флуктуаций означает переход системы через минимальный барьер, отделяющий начальное состояние $\eta_i(\mathbf{r}, t) = 0$ от конечного $\eta_f(\mathbf{r}, t) = \eta_0 \neq 0$. Однако, поскольку при этом само однородное состояние η_0 не достигается, то дальнейшая эволюция неэргодической системы доменов упорядоченной фазы будет складываться как диффузия конфигурационной точки по рельефу зависимости $\Omega\{\eta(\mathbf{r}, t)\}$, наличие барьера на которой связано с обусловленным потерей эргодичности разделением пространства состояний на изолированные области метастабильных распределений $\eta(\mathbf{r}, t)$.

Для количественного исследования задачи введем суперполе [25]

$$\Phi = \eta + \bar{\chi}\psi + \bar{\psi}\chi + \bar{\chi}\bar{\chi}\phi \quad (3.13)$$

с грассмановыми координатами $\bar{\chi}, \chi$, удовлетворяющими правилам интегрирования типа (3.5). Нетрудно проверить, что в суперсимметричном представлении лагранжиан (3.9) принимает канонический вид

$$\mathcal{L} = \int [\Phi \bar{D}D\Phi + V(\Phi)] d\bar{\chi} d\chi, \quad (3.14)$$

где введены ковариантные суперпроизводные

$$D = \frac{\partial}{\partial\bar{\chi}} + \frac{\chi}{2} \frac{\partial}{\partial t}, \quad \bar{D} = \frac{\partial}{\partial\chi} + \frac{\bar{\chi}}{2} \frac{\partial}{\partial t}, \quad (3.15)$$

удовлетворяющие коммутационным соотношениям

$$\{\bar{D}, D\} = \frac{\partial}{\partial t}, \quad [\bar{D}, D]^2 = \frac{\partial^2}{\partial t^2}. \quad (3.16)$$

Операторы (3.15) представляют генераторы группы суперсимметрии по отношению к совместному сдвигу

по времени и грассмановой координате:

$$\begin{aligned} \exp(\bar{\varepsilon}D) : \bar{\chi} &\rightarrow \bar{\chi} + \bar{\varepsilon}, & t &\rightarrow t + \frac{\bar{\varepsilon}\chi}{2}; \\ \exp(\varepsilon\bar{D}) : \chi &\rightarrow \chi + \varepsilon, & t &\rightarrow t + \frac{\bar{\chi}\varepsilon}{2}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

При этом составляющие $\eta, \bar{\psi}, \psi, \phi$ суперполя (3.13) преобразуются следующим образом:

$$\begin{aligned} \exp(\bar{\varepsilon}D) : \delta\eta &= \bar{\varepsilon}\psi, \quad \delta\psi = 0, \quad \delta\bar{\psi} = \bar{\varepsilon}\left(\frac{\dot{\eta}}{2} + \phi\right), \quad \delta\phi = -\frac{\bar{\varepsilon}\dot{\psi}}{2}; \\ \exp(\varepsilon\bar{D}) : \delta\eta &= -\bar{\psi}\varepsilon, \quad \delta\bar{\psi} = 0, \quad \delta\psi = \left(\frac{\dot{\eta}}{2} - \phi\right)\varepsilon, \quad \delta\phi = -\frac{\dot{\bar{\psi}}\varepsilon}{2}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Характерная особенность этих преобразований состоит в том, что изменения полей η, ϕ коллективных переменных выражаются через поля $\bar{\psi}, \psi$ грассмановых переменных, которые, очевидно, отвечают одиночным образованиям в виде гетерофазных флуктуаций; разумеется, имеет место и обратная связь — между вариациями грассмановых переменных и коллективными. Физический смысл преобразований (3.18) состоит в следующем: флуктуация $\delta\eta$ поля параметра порядка возникает (исчезает) в результате зарождения (коллапса) предвыделений упорядоченной фазы, представляемых грассмановыми переменными $\bar{\psi}, \psi$. Флуктуации поля ϕ связаны со скоростью зародышеобразования (коллапса) выделений. В свою очередь флуктуации $\delta\bar{\psi}, \delta\psi$, представляющие зарождение и коллапс выделений фазы, обусловлены ненулевой скоростью упорядочения $\dot{\eta}$ и наличием поля флуктуаций ϕ . Принципиально важно, что согласно (3.15)–(3.18) суперсимметричные координаты $\bar{\chi}, \chi$ поля (3.13) связаны с изменением времени. Таким образом, можно полагать, что переход от реального поля параметра порядка $\eta(\mathbf{r}, t)$ к суперполю $\Phi(\bar{\chi}, \chi; \mathbf{r}, t)$ позволяет учесть (слабую) временную зависимость, связанную с неравновесным характером системы.

Проведенное рассмотрение показывает, что эволюция неустойчивой термодинамической системы складывается из двух стадий: на начальной системе остается суперсимметричной — нет различий между динамическими и квазистатическими флуктуациями; с появлением межфазных границ суперсимметрия исчезает, система становится неэргодичной и наступает заключительная стадия. Очевидно, в линейном режиме система всегда суперсимметрична. В бинодальной области начальная стадия представляет инкубационный период зарождения выделений, а в спинодальной предшествует формированию границ доменов (выделений). Найденное выше феноменологическое условие $\Omega = 0$ потери суперсимметрии не может быть конструктивно использовано, поскольку нам не известен вид зависимости $\Omega\{\eta(\mathbf{r}, t)\}$. Поэтому для описания системы следует воспользоваться микроскопическим подходом, основанным на технике корреляционных функций. При известном производящем функционале (3.3), (3.8) они вводятся следующим образом:

$$S(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \equiv \langle \eta^*(\mathbf{r}, t)\eta(\mathbf{r}', t') \rangle = \left. \frac{\delta^2 Z\{u(\mathbf{r}, t)\}}{\delta u^*(\mathbf{r}, t)\delta u(\mathbf{r}', t')} \right|_{u=0}. \quad (3.19)$$

Откладывая соответствующее изложение до следующего раздела, укажем, что в рамках гриновского подхода потеря суперсимметрии представляется выражениями (2.18)–(2.27).

3.2. Начальная стадия

С формальной точки зрения описание начальной стадии ($t < t_0$) состоит в определении спектра времен релаксации диссипативной системы в процессе перехода к стационарному суперсимметричному состоянию с термодинамическим потенциалом $\Omega = 0$. Для построения суперсимметричной диаграммной техники выделим в лагранжиане (3.14) взаимодействие

$$V(\Phi) = \frac{1}{2}(\nabla\Phi)^2 + \frac{1}{2}\Phi^2 - H\Phi + V_{\text{int}}(\Phi), \quad \nabla \equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}, \quad (3.20)$$

где, как и выше, использованы безразмерные величины. В отсутствие $V_{\text{int}}(\Phi)$ суперкоррелятор³

$$\hat{C}(z, z') = \langle \Phi(z)\Phi(z') \rangle, \quad z \equiv \{\mathbf{r}, t, \chi\}, \quad (3.21)$$

сводится к затравочному $\hat{C}^{(0)}(z, z')$. Для определения его вида воспользуемся принципом наименьшего действия, отвечающего лагранжиану (3.14). Получающееся уравнение Эйлера свободного поля имеет вид

$$\hat{L}\Phi = 0, \quad \hat{L} \equiv (1 - \nabla^2) + [\bar{D}, D]. \quad (3.22)$$

Тогда по определению затравочный суперкоррелятор подчиняется уравнению

$$\hat{L}(z)\hat{C}^{(0)}(z, z') = \delta(z - z'), \quad (3.23)$$

где введена суперсимметричная δ -функция

$$\delta(z) \equiv \delta(\mathbf{r}, t; \chi) = -\bar{\chi}\chi\delta(\mathbf{r})\delta(t). \quad (3.24)$$

Для решения (3.23) разложим все суперматрицы по трем базисным [27]

$$\begin{aligned} E(\chi, \chi') &= -(\bar{\chi} - \bar{\chi}')(\chi - \chi'), \\ P(\chi, \chi') &= -(\bar{\chi} - \bar{\chi}')(\chi + \chi'), \quad A(\chi, \chi') = 1. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Учитывая определение произведения произвольных суперматриц

$$A(\chi, \chi') = \int B(\chi, \chi'') C(\chi'', \chi') d\bar{\chi}'' d\chi'', \quad (3.26)$$

нетрудно видеть, что базисные операторы \hat{E} , \hat{P} , \hat{A} , отвечающие суперматрицам (3.25), обладают свойствами

$$\begin{aligned} \hat{E}^2 &= \hat{E}, \quad \hat{P}^2 = \hat{E}, \quad \hat{A}^2 = 0, \\ \hat{E}\hat{P} &= \hat{P}, \quad \hat{E}\hat{A} = \hat{A}, \quad \hat{A}\hat{P} = -\hat{P}\hat{A} = \hat{A} \end{aligned} \quad (3.27)$$

³ При его определении учитывается, что суперсреднее

$$\langle \Phi \rangle_s \equiv \int \langle \Phi \rangle d\bar{\chi} d\chi = \langle \phi \rangle = 0.$$

Отсюда становится очевидным флюктуационный характер суперкомпоненты ϕ , отвечающей коллективным возбуждениям.

и образуют, таким образом, замкнутый базис. Следовательно, технически удобнее все суперкорреляторы брать не в матричном, а в операторном представлении, раскладывая их по базису единичного супероператора \hat{E} , его квадратного корня \hat{P} и фермионной компоненты \hat{A} . Например, коррелятор (3.21) имеет вид

$$\hat{C} = C_0\hat{E} + C_1\hat{P} + S\hat{A}, \quad C_{\pm} \equiv C_0 \pm C_1. \quad (3.28)$$

Используя (3.13), (3.21), нетрудно найти, что компонента $S(\mathbf{r}, t)$ представляет структурный фактор $\langle \eta(\mathbf{r}, t)\eta(\mathbf{0}, 0) \rangle$, а выражение $C_{-}(\mathbf{r}, t) = -\langle \eta(\mathbf{r}_2, t_2)\varphi(\mathbf{r}_1, t_1) \rangle$, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$, $t = t_2 - t_1$, в котором момент включения пробного поля $\varphi(\mathbf{r}_1, t_1)$ предшествует появлению обусловленного им поля $\eta(\mathbf{r}_2, t_2)$ параметра порядка, приводит после преобразований Лапласа к запаздывающей функции Грина.

Возвращаясь к определению затравочного суперкоррелятора $\hat{C}^{(0)}$, учтем, что после перехода к матричному представлению коммутатора $[\bar{D}, D]$ в (3.22) и фурье-преобразования по пространству-времени линейный оператор $\hat{L} \equiv 1/\hat{C}^{(0)}$ в результате простых, но громоздких выкладок приводится к виду

$$\hat{L}_{\mathbf{k}}(\omega) = \Theta^{-1}(\tau_{\mathbf{k}}^{-1}\hat{E} + i\omega\hat{P} - 2\hat{A}), \quad (3.29)$$

где $\tau_{\mathbf{k}} = (1 + \mathbf{k}^2)^{-1}$ — диспергирующее время релаксации, измеренное в единицах τ (далее зависимость от волнового вектора \mathbf{k} будем для краткости опускать, полагая $\tau_{\mathbf{k}} = 1$). Тогда решение уравнения (3.23) дает разложение (3.28), в котором компоненты

$$C_{\pm}^{(0)}(\omega) = \frac{\Theta}{1 \pm i\omega}, \quad S^{(0)}(\omega) = \frac{2\Theta}{1 + \omega^2} \quad (3.30)$$

отвечают простейшему случаю дебаевской релаксации диссилирующей среды.

Для определения полного коррелятора (3.28) воспользуемся моделью Φ^4 -супертеории поля, в рамках которой составляющая действия

$$S_{\text{int}} = \int V_{\text{int}}(\Phi) d\mathbf{r} dt d\bar{\chi} d\chi, \quad (3.31)$$

определенная суперпотенциалом взаимодействия $V_{\text{int}}(\Phi)$ в (3.20), имеет вид

$$\begin{aligned} S_{\text{int}} &= \int \int V_{\text{int}}(t, t'; \chi, \chi') dt dt' d\bar{\chi} d\chi d\bar{\chi}' d\chi', \\ V_{\text{int}}(t, t'; \chi, \chi') &= \frac{1}{2} \int \int \Phi(\mathbf{r}, t; \bar{\chi}) \Phi(\mathbf{r}, t'; \bar{\chi}') \times \\ &\quad \times v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Phi(\mathbf{r}', t; \chi) \Phi(\mathbf{r}', t'; \chi') d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \end{aligned} \quad (3.32)$$

где $v(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — двухчастичный потенциал. Выделяя в нем слагаемое с самодействием

$$v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{2} v(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - w(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (3.33)$$

в приближении среднего суперполя принимаем расцепление

$$\begin{aligned} V_{\text{int}}(t, t'; \chi, \chi') &\rightarrow -U(t, \chi)\delta(t - t')(\bar{\chi} - \bar{\chi}')(\chi - \chi') + \\ &\quad + W(t, t'; \chi, \chi'); \\ U(t, \chi) &= -\frac{1}{4} \int v(\mathbf{r}) \Phi^4(\mathbf{r}, t; \chi) d\mathbf{r}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W(t, t'; \chi, \chi') &= -\frac{w}{\Theta} C(t - t'; \chi, \chi') \times \\ &\quad \times \int d\mathbf{r} \Phi(\mathbf{r}, t; \chi) \Phi(\mathbf{r}, t'; \chi'), \\ w &\equiv \int w(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad C(t; \chi, \chi') \equiv C_{k=0}(t; \chi, \chi'). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Тогда уравнение Дайсона принимает вид

$$\hat{C}^{-1} = \hat{L} - \hat{\Sigma} - \frac{2w}{\Theta^2} \hat{C}, \quad (3.35)$$

где опущена зависимость от частоты ω .

Подобно (3.28), удобно разложить по супербазису \hat{E} , \hat{P} , \hat{A} собственно энергетическую часть:

$$\hat{\Sigma} = \Sigma_0 \hat{E} + \Sigma_1 \hat{P} + \sigma \hat{A}, \quad \Sigma_{\pm} \equiv \Sigma_0 \pm \Sigma_1 \quad (3.36)$$

и суперматрицу $\hat{D} \equiv \hat{L} - \hat{\Sigma}$:

$$\hat{D} = D_0 \hat{E} + D_1 \hat{P} + D \hat{A}, \quad D_{\pm} \equiv D_0 \pm D_1. \quad (3.37)$$

Тогда из (3.28), (3.30), (3.35)–(3.37) получаются следующие соотношения для суперкомпонент корреляторов \hat{C} , \hat{D} [27]:

$$\begin{aligned} C_{\pm}^{-1} - D_{\pm} + \frac{2w}{\Theta^2} C_{\pm} &= 0; \quad S = -\frac{DC_- C_+}{1 - (2w/\Theta^2) C_+ C_-}, \\ C_0 &= \frac{D_0 C_+ C_-}{1 + (2w/\Theta^2) C_+ C_-}, \quad C_1 = -\frac{D_1 C_+ C_-}{1 - (2w/\Theta^2) C_+ C_-}; \\ D &\equiv -\frac{2}{\Theta} - \sigma, \quad D_{\pm} \equiv \Theta^{-1}(1 \pm i\omega) - \Sigma_{\pm}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Здесь использованы безразмерные величины и опущена зависимость от частоты и волнового вектора.

Система (3.38) представляет основные уравнения микроскопической Φ^4 -супертеории диссиликативной системы. В линейном режиме, когда $v = 0$, $w = 0$, они сводятся к формулам (3.30) дебаевского процесса релаксации. Учитывая, что характерная комбинация $C_+(\omega)C_-(\omega)$ принимает максимальное вещественное значение при $\omega = 0$, из (3.38) получаем, что точка потери устойчивости системы задается условием

$$\Theta_c^2 = 2wg^2, \quad g \equiv \lim_{\omega \rightarrow 0} C_{\pm}(\omega). \quad (3.39)$$

Для определения эффективного времени релаксации

$$\tau_0 = i\Theta \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\partial C_{\pm}^{-1}(\omega)}{\partial \omega} \quad (3.40)$$

в нелинейном режиме требуется замкнуть систему (3.38), выражая собственно энергетическую часть через корреляторы C_{\pm} , S . Согласно [36] вклад графиков первого и второго порядков по $v/\Theta \ll 1$ дает [27] (ср. с (2.24))

$$\begin{aligned} \Sigma_{\pm}(t) &= -\frac{3v}{\Theta} S(t=0)\delta(t) + 2\left(\frac{3v}{\Theta}\right)^2 C_{\pm}(t)S^2(t), \\ \sigma(t) &= \frac{2}{3}\left(\frac{3v}{\Theta}\right)^2 S^3(t). \end{aligned} \quad (3.41)$$

В суперсимметричном состоянии выполняется флуктуационно-диссиликативная теорема

$$S(\omega) = \frac{2}{\omega} \operatorname{Im} C_-(\omega), \quad \sigma(\omega) = \frac{2}{\omega} \operatorname{Im} \Sigma_-(\omega), \quad (3.42)$$

откуда с учетом спектрального представления следует

$$S(t \rightarrow 0) = C_-(\omega \rightarrow 0) = g,$$

$$\sigma(t \rightarrow 0) = \Sigma_-(\omega \rightarrow 0) = -\frac{3v}{\Theta} g + \frac{2}{3} \left(\frac{3v}{\Theta}\right)^2 g^3. \quad (3.43)$$

В результате выражение (3.40) для эффективного времени релаксации принимает в суперсимметричном состоянии вид

$$\tau_0^{-1} = 2\left(\frac{3v}{\Theta}\right)^2 g^4 = \frac{9}{2} \left(\frac{v}{w}\right)^2 \left(\frac{\Theta_c}{\Theta}\right)^2, \quad (3.44)$$

где второе равенство следует из определения (3.39) для величины Θ_c . Несмотря на рост значения $\tau_0(\Theta)$ с повышением интенсивности шума, в точке потери устойчивости Θ_c полученная величина τ_0 не расходится, как это имеет место для времени релаксации $\tau(\Theta)$ мягкой моды. Следовательно, рассматриваемая система не обладает бесконечно высокими барьерами, разделяющими суперкомпоненты поля (3.13). Именно данное обстоятельство является причиной эволюционного перехода (при $t = t_0$) из однородного суперсимметричного состояния в гетерофазное неэргодическое.

3.3. Поздняя стадия

Кроме указанной потери эргодичности, наступление поздней стадии, характеризуемой образованием пены доменов (выделений) упорядоченной фазы, отражается появлением еще одной, принципиально новой особенности эволюции неустойчивой системы — она обретает память. Формально это обусловлено разбиением пространства состояний на изолированные области, в связи с чем и на больших временах эволюция системы существенно зависит от ее предыстории (например, скорости закалки \dot{T}), обеспечивающей изначальное попадание конфигуративной точки в данную область. С физической точки зрения эффекты памяти выражаются в совершенно очевидной зависимости сценария эволюции неустойчивой системы от способа ее приготовления: так, при бесконечно быстрой закалке ($\dot{T} = -\infty$) домены настолько малы, что реализуется предельное состояние типа металлического стекла [37]; при реально достижимых значениях \dot{T} стекло будет иметь скорее поликристаллический характер с размером домена L , значение которого тем больше, чем меньше $|\dot{T}|$; наконец, при квазистатическом охлаждении ($\dot{T} \rightarrow 0$) упорядочение изначально реализуется в объеме единственного домена размером $L \rightarrow \infty$.

Таким образом, как и в стекле, для описания неустойчивой термодинамической системы требуется ввести параметр типа параметра Эдвардса–Андерсона, который, как известно, отражает наличие эффектов памяти [37, 38]. Следуя [27], легко показать, что их источником является случайный разброс поля $h(\mathbf{r}, t)$, сопряженного параметру порядка $\eta(\mathbf{r}, t)$. Если среднее по образцу $\bar{h}(\mathbf{r}, t) = 0$, а дисперсия $(\bar{h}^2(\mathbf{r}, t))^{1/2} \equiv h \neq 0$, то действие (3.32) приобретает "стrikционную" добавку второго

порядка [27]

$$S(h) = -\frac{h^2}{\Theta} \int \int dt dt' d\bar{\chi} d\chi d\bar{\chi}' d\chi' \times \\ \times \int d\mathbf{r} \Phi(\mathbf{r}, t; \chi) \Phi(\mathbf{r}, t'; \chi'). \quad (3.45)$$

Она приводит к появлению не зависящих от времени слагаемых в корреляторах $S(t)$, $\sigma(t)$ и $D(t)$, входящих в суперкорреляторы (3.28), (3.36), (3.37):

$$S(t) = q_0 + S_0(t), \quad \sigma(t) = \xi + \sigma_0(t), \\ D(t) = -\frac{2}{\Theta} \delta(t) - \sigma_0(t) - \left(\frac{h}{\Theta} \right)^2 - \xi. \quad (3.46)$$

Здесь функции $S_0(t)$, $\sigma_0(t)$ отвечают отсутствию дисперсии поля ($h = 0$); параметры q_0 , ξ , приобретающие ненулевые значения при $h \neq 0$, подлежат определению.

В результате появление эффектов памяти представляется следующим образом. С ростом скорости закалки $|\dot{T}|$ происходит замораживание беспорядка системы на микроскопических масштабах, приводящее к разбросу поля $h \propto |\dot{T}|^a$, где $a > 0$ — постоянная. В свою очередь, это обуславливает появление ненулевого параметра стеклования $q_0 \propto h^b \propto |\dot{T}|^{ab}$, $b > 0$. Поскольку $S(t \rightarrow \infty) \rightarrow q_0$, то условие $q_0 \neq 0$ означает, что даже на бесконечных временах система помнит свою предысторию.

Для определения параметра q_0 подставим (3.46) во второе равенство (3.38). Выделяя не зависящий от времени вклад, находим

$$\left(1 - \frac{2w}{\Theta^2} g^2 \right) q_0 = \left(\frac{h^2}{\Theta^2} + \xi \right) g^2. \quad (3.47)$$

Уравнения для C_{\pm} , S получаются заменой S на S_0 , σ на σ_0 в равенствах (3.38). Кроме того, здесь Σ_{\pm} , σ_0 следует вычислить с учетом q_0 , для чего S из (3.46) надо подставить в (3.41). В результате получаем

$$\begin{aligned} \Sigma_{-}(\omega) &= 2 \left(\frac{3v}{\Theta} \right)^2 q_0^2 C_{-}(\omega) + \Sigma_{-}^{(0)}(\omega), \\ \sigma_0(\omega) &= 2 \left(\frac{3v}{\Theta} \right)^2 q_0^2 S_0(\omega) + \sigma^{(0)}(\omega); \\ \Sigma_{-}^{(0)}(t) &= -\frac{3v}{\Theta} (g + q_0) \delta(t) + 2 \left(\frac{3v}{\Theta} \right)^2 \times \\ &\times C_{-}(t) S_0(t) (2q_0 + S_0(t)), \\ \sigma^{(0)}(t) &= 2 \left(\frac{3v}{\Theta} \right)^2 S_0^2(t) \left[q_0 + \frac{1}{3} S_0(t) \right]; \\ \xi &= \frac{2}{3} \left(\frac{3v}{\Theta} \right)^2 q_0^3. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Линейные по $C_{-}(\omega)$, $S_0(\omega)$ слагаемые в (3.48) выделены по той причине, что они должны быть опущены в уравнении Дайсона (3.35). С учетом указанных замен система (3.38) в ω -представлении сводится к виду

$$C_{\pm}^{-1} - D_{\pm}^{(0)} + 2 \left[\frac{w}{\Theta^2} + \left(\frac{3v}{\Theta} \right)^2 q_0^2 \right] C_{\pm} = 0;$$

$$\begin{aligned} \left\{ 1 + 2 \left[\frac{w}{\Theta^2} + \left(\frac{3v}{\Theta} \right)^2 q_0^2 \right] C_{+} C_{-} \right\} C_0 &= D_0^{(0)} C_{+} C_{-}, \\ \left\{ 1 - 2 \left[\frac{w}{\Theta^2} + \left(\frac{3v}{\Theta} \right)^2 q_0^2 \right] C_{+} C_{-} \right\} C_1 &= -D_1^{(0)} C_{+} C_{-}, \\ \left\{ 1 - 2 \left[\frac{w}{\Theta^2} + \left(\frac{3v}{\Theta} \right)^2 q_0^2 \right] C_{+} C_{-} \right\} S_0 &= -D^{(0)} C_{+} C_{-}; \\ D^{(0)} &\equiv -\frac{2}{\Theta} - \sigma^{(0)}, \\ D_{\pm}^{(0)} &\equiv \Theta^{-1} (1 \pm i\omega) - \Sigma_{\pm}^{(0)}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Как и на ранней стадии, выражения для $C_1(\omega)$, $S_0(\omega)$ обладают полюсом, который в отличие от (3.38) содержит параметр памяти q_0 . Подставляя в определяющее его уравнение (3.47) выражение (3.48) для ξ , находим

$$q_0 = 3^{-1/3} \left(\frac{h}{2v} \right)^{2/3}. \quad (3.50)$$

Таким образом, фиксируемый закалкой замороженный беспорядок $h \propto |\dot{T}|^a$ приводит к степенному нарастанию параметра памяти $q_0 \propto |\dot{T}|^{2a/3}$.

Если включение памяти отражается согласно (3.46) появлением долгоживущих автокорреляций $S(t) = \langle \eta(t) \eta(0) \rangle$ параметра порядка, то эффекты неэргодичности проявляются в поведении запаздывающей функции Грина $C_{-}(t) = -\vartheta(t) \langle \eta(t) \phi(0) \rangle$, определяющей отклик реального поля $\eta(\mathbf{r}, t)$ на пробное $\phi(\mathbf{r}, t)$ ($\vartheta(t) = 1$ при $t > 0$, $\vartheta(t) = 0$ при $t < 0$). Как и в (3.46), в пределе $t \rightarrow \infty$ появляются ненулевые слагаемые:

$$C_{-}(t) = C_{-0}(t) + \Delta, \quad \Sigma_{-}(t) = \Sigma_{-0}(t) + \rho, \quad (3.51)$$

где $G_{-0}(t)$, $\Sigma_{-0}(t)$ — эргодические составляющие, стремящиеся к нулю при $t \rightarrow \infty$; Δ , ρ — параметры неэргодичности, подлежащие определению. Поскольку $\Delta \cdot S_0 \approx 0$, уравнения (3.48), (3.49) остаются в силе, если заменить C_{\pm} на $C_{\pm}0$. Учитывая, что в пределе $t \rightarrow \infty$ полный коррелятор $C_{-}(t) = \Theta \chi_0$ сводится к изотермической восприимчивости χ_0 , а эргодическая составляющая $C_{-0}(t \rightarrow \infty) = g$ — к адабатической $\chi = g/\Theta$, из (3.51) приходим к равенству [39]

$$\frac{\Delta}{\Theta} = \chi_0 - \chi, \quad (3.52)$$

где в отличие от исходной термодинамической восприимчивости χ , использованной выше в качестве масштаба, изотермическая χ_0 не зависит от температуры, но сильно изменяется в зависимости от величины $h \propto |\dot{T}|^a$.

Для определения параметра Δ подставим удлиненные корреляторы (3.46), (3.51) в условие самосогласования (3.41). Тогда соотношения (3.48) дополняются равенством

$$\rho = 2 \left(\frac{3v}{\Theta} \right)^2 q_0^2 \Delta. \quad (3.53)$$

Выделяя в исходной системе уравнений (3.38) для коррелятора $S(\omega) = 2\pi q\delta(\omega) + S_0(\omega)$ сингулярные при $\omega = 0$ составляющие, с учетом (3.47), (3.52) находим уравнения

для величин χ_0 , q_0 :

$$q_0[1 - 2(w + 6v^2q_0^2)\chi_0^2] = h^2\chi_0^2, \quad (3.54)$$

$$2[w + (3vq_0)^2]\chi_0^2 = 1. \quad (3.55)$$

Для полного описания системы следует учесть, что нарушение эргодичности ($\Delta \neq 0$) приводит к появлению не только двух восприимчивостей — макроскопической $\chi_0 = (g + \Delta)/\Theta$ и микроскопической $\chi = g/\Theta$, но и двух параметров памяти — кроме макроскопического параметра Эдвардса–Андерсона q_0 должен появиться микроскопический q . Подобно (3.54), (3.55), но исходя уже не из полной системы (3.38), а из эргодической (3.49), для величин g , q находим

$$q\left\{1 - 2\left[\frac{w}{\Theta^2} + \frac{2}{3}\left(\frac{3v}{\Theta}\right)^2 q^2\right]g^2\right\} = \left(\frac{h}{\Theta}\right)^2 g^2; \quad (3.56)$$

$$2\left[\frac{w}{\Theta^2} + \left(\frac{3v}{\Theta}\right)^2 q^2\right]g^2 = 1. \quad (3.57)$$

Для замыкания системы (3.54)–(3.57) следует дополнить ее уравнениями

$$(\Theta^{-1} - \alpha_0) - 2\left[\frac{w}{\Theta^2} + \left(\frac{3v}{\Theta}\right)^2 q_0^2\right]\Delta - 2\frac{w}{\Theta^2}g = \frac{1}{g + \Delta}, \quad (3.58a)$$

$$(\Theta^{-1} - \alpha)g - 2\frac{w}{\Theta^2}g^2 = 1, \quad \alpha = \alpha(q); \quad (3.58b)$$

$$\alpha \equiv -\frac{3v}{\Theta}(q + g) + \frac{2}{3}\left(\frac{3v}{\Theta}\right)^2[(q + g)^3 - q^3], \quad (3.58b)$$

получающимися при самосогласовании выражений (3.38), (3.48), (3.49) для гриновских функций $C_{0\pm}(\omega)$ в пределе $\omega \rightarrow 0$. Как и в спиновых стеклах [38], выражения (3.54), (3.56), (3.58a)–(3.58b) представляют уравнения Шеррингтона–Киркпатрика для неравновесной системы, а равенства (3.55), (3.57) — условие потери эргодичности типа Альмейда–Таулесса. При этом буквы а, б у номеров формул отмечают макро- и микроуровни соответственно. Так, выражения (3.55), (3.57) определяют безщелевую моду восстановления суперсимметрии на макро- и микроуровнях.

Согласно (3.50), (3.52), (3.54), (3.56), (3.57) параметры макроуровня q_0 , χ_0 не зависят от температуры Θ , а характеристики микроуровня q , g — от замороженного беспорядка h . Таким образом, имеем

$$q(\Theta, h) = q_g(\Theta), \quad g(\Theta, h) = g_g(\Theta), \quad (3.59)$$

где q_g , g_g представляют значения величин q , g на линии потери эргодичности $h_0(\Theta)$, определяемой равенством (3.58б) (сами значения q_g , g_g задаются решением уравнений (3.56), (3.57)). Принимая зависимость $h_0(\Theta)$ известной, из (3.54)–(3.57) находим

$$q_0^3 = \frac{1}{3}\left(\frac{h}{2v}\right)^2, \quad \chi_0^{-2} = 2[w + (3vq_0)^2];$$

$$q^3 = q_g^3 = \frac{1}{3}\left(\frac{h_0}{2v}\right)^2, \quad g^{-2} = g_g^{-2} = 2\Theta^{-2}[w + (3vq_g)^2]. \quad (3.60)$$

Как показывает анализ полученных соотношений, характерная точка Θ_c , задаваемая условием $h_0(\Theta) = 0$, попадает в физическую область значений лишь при условии малости параметра $\zeta = 8w - 1 > 0$. Поскольку он определяет отношение силы взаимодействия к "силе одиночичного отталкивания", характеризуемой обратной термодинамической восприимчивостью χ^{-1} , то условие $\zeta \ll 1$, напоминающее ситуацию при переходах типа смещения [16], означает почти полную компенсацию указанных составляющих. В этом случае даже в отсутствие малости константы ангармонизма v параметром малости является ζ , а не w . Учитывая это, вблизи Θ_c получаем

$$\Theta_c = \frac{w^{1/2}}{3\sqrt{2}v} \zeta \approx \frac{\zeta}{12w}, \quad 0 < \zeta \equiv 8w - 1 \ll 1;$$

$$h_0 = \frac{v}{3\sqrt{2}} \left(\frac{\zeta|\varepsilon|}{v}\right)^{3/2}, \quad \varepsilon \equiv \frac{\Theta - \Theta_c}{\Theta_c};$$

$$q_0 = \left(\frac{h^2}{12v^2}\right)^{1/3}, \quad q = q_g = \left(\frac{h_0^2}{12v^2}\right)^{1/3} = \frac{\zeta|\varepsilon|}{6v}. \quad (3.61)$$

Соответственно для восприимчивостей и необратимого отклика около линии потери эргодичности $h_0(\Theta)$ из (3.60), (3.52) имеем

$$\chi_0 = \frac{1}{(2w)^{1/2}} \left[1 + \frac{(3vq_0)^2}{w}\right]^{-1/2} \approx 2 \left[1 - \zeta^2 |\varepsilon|^2 \left(\frac{h}{h_0}\right)^{4/3}\right],$$

$$\chi = \frac{1}{(2w)^{1/2}} \left[1 + \frac{(3vq)^2}{w}\right]^{-1/2} \approx 2(1 - \zeta^2 |\varepsilon|^2),$$

$$\frac{\Delta}{\Theta} \approx \frac{(3vq_g)^2}{(2w)^{3/2}} \left[1 - \left(\frac{h}{h_0}\right)^{4/3}\right] \approx 2\zeta^2 |\varepsilon|^2 \left[1 - \left(\frac{h}{h_0}\right)^{4/3}\right]. \quad (3.62)$$

Характерно, что в отсутствие закалки, когда $h \ll h_0$, реализуется слабая зависимость $\Delta/\Theta \propto |\varepsilon|^2$ параметра неэргодичности от температуры, а при сильном беспорядке ($h \leq h_0$) — линейное соотношение

$$\Delta \approx 2^{7/3} 3^{2/3} v^{1/3} \zeta (h_0^{2/3} - h^{2/3}) |\varepsilon| \propto |\varepsilon(h)|, \quad (3.63)$$

$$|\varepsilon(h)| \equiv \frac{\Theta}{\Theta_g(h)} - 1,$$

где $\Theta_g(h)$ — линия потери эргодичности, определяемая равенством

$$\Theta_g = \Theta_c - 2^{-1/6} 3^{-1/3} w^{1/2} \left(\frac{h}{v}\right)^{2/3}, \quad (3.64)$$

следующим из уравнения $h_0(\Theta) = h$ и (3.61).

3.4. Влияние поля

Как выяснено в предыдущем разделе, в отсутствие поля H , фиксирующего фазу параметра порядка, в различных доменах (выделениях) реализуются ее случайные значения, что, собственно, и обуславливает ненулевое значение параметра памяти q , представляющего замороженную дисперсию этой фазы по всему объему. Включение поля $H \neq 0$ приводит к появлению потока

$j_0 = \overline{\langle \eta(t) - \eta(0) \rangle} / t$, обусловленного ростом доменов с фазой, задаваемой полем H , и увеличением числа таких доменов (первое обстоятельство отражается обозначаемым угловыми скобками усреднением по статистическому ансамблю микроуровня, отвечающему данному домену, второе — обозначенным чертой усреднением по макроансамблю доменов). В результате образец приобретает макроскопическое значение параметра порядка

$$\overline{\langle \eta(t) \rangle} = \overline{\langle \eta(0) \rangle} + j_0(H)t, \quad (3.65)$$

плавно возрастающее со временем. Наиболее популярный пример такого рода — переориентация магнитных (электрических) доменов ферромагнетика (сегнетоэлектрика) во внешнем поле. Здесь роль фазы параметра порядка сводится к пространственной ориентации вектора намагниченности (поляризации) доменов. В распадающихся твердых растворах, к которым относятся и металлические стекла, роль поля H играет разность химических потенциалов компонентов сплава, изменение которой обеспечивается выбором концентрации и температуры [16, 40]. Возрастание макроскопического значения параметра порядка (3.65) обеспечивается синхронизацией фаз концентрационных волн. Такая ситуация имеет место в кристаллическом состоянии. В аморфизованном сплаве поле H сводится к усредненному по составу химическому потенциалу компонентов, а рост значения параметра порядка (3.65) обеспечивается синхронизацией волн распределения (средней по составу) плотности атомов.

Поскольку процесс переориентации доменов носит стохастический характер, действие поля H характеризуется не только потоком $j_0 = \langle \dot{\eta} \rangle$, но и дисперсией

$$D_0 = \frac{\overline{\langle [\eta(t) - \eta(0)] - j_0 t \rangle^2}}{2t}, \quad (3.66)$$

определенной разброс во времени изменения параметра порядка за счет диффузии на макроуровне. Величина D_0 указывает, насколько легко перестраиваются домены во внешнем поле.

Для определения полевых зависимостей $j_0(H)$, $D_0(H)$ воспользуемся гамильтоновым формализмом [26]. С этой целью произведем в (3.8) интегрирование по полно ϕ , введем мнимое время $\tau = it$ и возвратимся к исходным грассмановым полям $\Theta^{-1/2}\bar{\psi}$, $\Theta^{-1/2}\psi$ (см. после (3.9)). В результате лагранжиан (3.9) принимает вид

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{1}{4} \left[\left(\frac{d\eta(\mathbf{r})}{d\tau} \right)^2 - \left(\frac{\delta V}{\delta \eta(\mathbf{r})} \right)^2 \right] + \\ & + \Theta \bar{\psi}(\mathbf{r}) \left(-i \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\delta^2 V}{\delta \eta(\mathbf{r}) \delta \eta(\mathbf{r}')} \right) \psi(\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (3.67)$$

Соответственно для импульса, сопряженного полю $\eta(\mathbf{r})$, имеем $p \equiv \partial \mathcal{L} / \partial (\delta \eta / d\tau) = (1/2)d\eta/d\tau$, а для обобщенных импульсов $\pi = \partial \mathcal{L} / \partial (d\psi / d\tau)$; $\bar{\pi} = \partial \mathcal{L} / \partial (d\bar{\psi} / d\tau)$, отвечающих грассмановым полям, получаем связи $\pi = -i\Theta\bar{\psi}$, $\bar{\pi} = 0$. Тогда гамильтониан $\mathcal{H} = p d\eta/d\tau + \pi d\psi/d\tau + \bar{\pi} d\bar{\psi}/d\tau - \mathcal{L}$, отвечающий лагранжиану (3.67), приобретает вид

$$\mathcal{H} = p^2(\mathbf{r}) + \frac{1}{4} \left(\frac{\delta V}{\delta \eta(\mathbf{r})} \right)^2 - i\pi(\mathbf{r}) \frac{\delta^2 V}{\delta \eta(\mathbf{r}) \delta \eta(\mathbf{r}')} \psi(\mathbf{r}'). \quad (3.68)$$

Проведем теперь формальное квантование, в рамках которого, как видно из (3.8), роль постоянной Планка играет мощность шума Θ . Вводя канонические операторы

$$\hat{p} = -i\Theta \frac{\partial}{\partial \eta}, \quad \hat{\psi} = \frac{1}{2}(\hat{a}^{++}\hat{a}^-), \quad \hat{\pi} = i\Theta(\hat{a}^+ - \hat{a}^-), \quad (3.69)$$

где \hat{a}^\pm — фермиевские операторы рождения и уничтожения, приводим вторично квантованный гамильтониан к виду [26]

$$\hat{\mathcal{H}} = -\Theta^2 \frac{\delta^2}{\delta \eta^2(\mathbf{r})} + \frac{1}{4} \left(\frac{\delta V}{\delta \eta(\mathbf{r})} \right)^2 + \frac{\Theta}{2} \frac{\delta^2 V}{\delta \eta(\mathbf{r}) \delta \eta(\mathbf{r}')} [\hat{a}_\mathbf{r}^+, \hat{a}_{\mathbf{r}'}^-]. \quad (3.70)$$

Здесь наличие коммутатора отражает суперсимметрию, которая не позволяет сдвигать уровень отсчета энергии.

Следуя [41], легко показать, что условие сохранения числа фермионов $n = \int d\mathbf{r} \langle \hat{a}_\mathbf{r}^+ \hat{a}_\mathbf{r}^- \rangle$ приводит к распаду полного уравнения Шрёдингера, соответствующего гамильтониану (3.70), на совокупность независимых уравнений, каждое из которых отвечает заданному значению n . В частности, минимальному $n = 0$ и максимальному $n = N$ числам гетерофазных флуктуаций отвечают гамильтонианы

$$\hat{\mathcal{H}}_\mp = -\Theta^2 \frac{\delta^2}{\delta \eta^2(\mathbf{r})} + \frac{1}{4} \left(\frac{\delta V}{\delta \eta(\mathbf{r})} \right)^2 \mp \frac{\Theta}{2} \frac{\delta^2 V}{\delta \eta^2(\mathbf{r})}, \quad (3.71)$$

волновые функции которых удовлетворяют свойству $\hat{a}^\mp |\Psi_\mp\rangle = 0$. Соответствующие уравнения Шрёдингера определяют волновой функционал

$$\Psi_\mp\{\eta(\mathbf{r})\} \propto \exp\left(\frac{V_\mp\{\eta(\mathbf{r})\}}{2\Theta}\right) P_\mp\{\eta(\mathbf{r})\}, \quad (3.72)$$

в котором функционал $P_\mp\{\eta(\mathbf{r})\}$ распределения поля упорядочения удовлетворяет уравнениям Фоккера—Планка и Колмогорова. Нетрудно видеть, что этот функционал сводится к подынтегральному выражению в статистическом функционале (3.11).

Удобство гамильтонова формализма состоит в том, что выражение (3.70) можно представить в виде квадрата суперзаряда

$$\hat{Q} = \left(-\Theta \frac{\delta}{\delta \eta(\mathbf{r})} + \frac{1}{2} \frac{\delta V}{\delta \eta(\mathbf{r})} \right) \hat{a}_\mathbf{r}^- + \left(\Theta \frac{\delta}{\delta \eta(\mathbf{r})} + \frac{1}{2} \frac{\delta V}{\delta \eta(\mathbf{r})} \right) \hat{a}_\mathbf{r}^+. \quad (3.73)$$

Соответственно вместо уравнения Шрёдингера имеем

$$\hat{Q}\Psi = \Omega^{1/2}\Psi. \quad (3.74)$$

Отсюда, в частности, немедленно следует наличие суперсимметрии при $H = 0$. Действительно, тогда энергия $\Omega = 0$ и решение (3.72) уравнения (3.74) дает не зависящий от времени вероятностный функционал $P_\mp\{\eta(\mathbf{r})\}$. Очевидно, он отвечает стационарному состоянию, определяемому условиями (3.12), в которых энергия Ω играет роль термодинамического потенциала неравновесной системы.

При наличии внешнего поля H имеем $\Omega(H) \neq 0$, суперсимметрия нарушается и волновой функционал

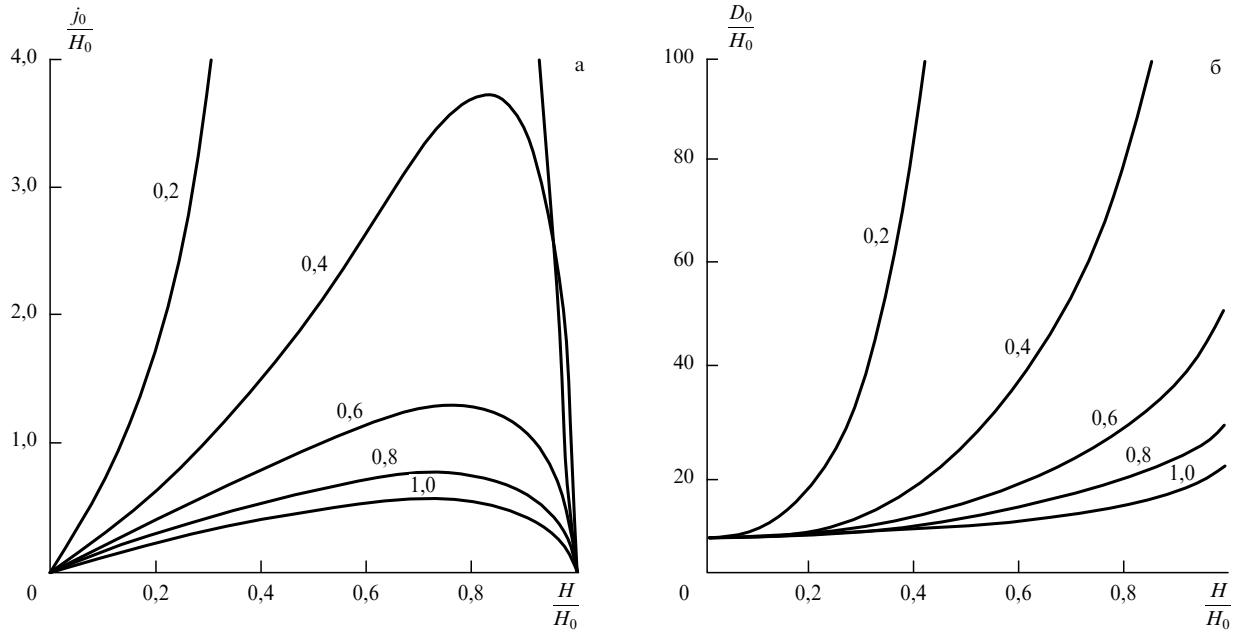


Рис. 10. Полевая зависимость скорости (а) и подвижности (б) переориентации доменов упорядоченной фазы во внешнем поле

(3.72) приобретает ненормируемый множитель $\exp(j_0 t)$, определяемый макропотоком $j_0(H)$. В результате приходится решать уравнение (3.74) с $\Omega \neq 0$. Такая задача рассмотрена в [26] применительно к нелинейному маятнику, отвечающему двухпараметрическому потенциалу

$$V\{\eta(\mathbf{r})\} = \int \{-H_0 \cos \eta(\mathbf{r}) - H[\eta(\mathbf{r}) - \pi]\} d\mathbf{r}, \quad (3.75)$$

где константа H_0 определяет поле анизотропии, препятствующее переориентации доменов. Квазиклассическое решение [26] уравнения (3.74) приводит к следующим выражениям для потока и коэффициента диффузии:

$$\begin{aligned} j_0 &= \frac{4\pi\Theta}{I^2(H)} \sinh \frac{\pi H}{\Theta}, \\ D_0 &= D_0^{(0)} + \frac{\Theta}{2} j_0 \frac{d \ln I(H)}{dH}, \quad D_0^{(0)} = \Theta \frac{\partial j_0}{\partial H}. \end{aligned} \quad (3.76)$$

Здесь интеграл $I(H)$ имеет вид

$$I(H) = \int_{\eta_1}^{\eta_1+2\pi} \exp\left\{\frac{V(\eta)}{\Theta}\right\} d\eta, \quad \sin \eta_1 = \frac{H}{H_0},$$

где $V(\eta)$ — подынтегральная функция в (3.75). Используя метод перевала, находим

$$\begin{aligned} I(H) &\approx \left(\frac{2\pi\Theta}{H_0}\right)^{1/2} \left(1 - \frac{H^2}{H_0^2}\right)^{-1/4} \times \\ &\times \exp\left\{\frac{H_0}{\Theta} \left[\left(1 - \frac{H^2}{H_0^2}\right)^{1/2} + \frac{H}{H_0} \arcsin \frac{H}{H_0} \right]\right\}. \end{aligned} \quad (3.77)$$

Подстановка этого выражения в (3.76) дает равенство

$$D_0 = j_0 \left(\pi \operatorname{ctanh} \frac{\pi H}{\Theta} + \frac{1}{2} \arcsin \frac{H}{H_0} + \frac{\Theta}{4} \frac{H}{H_0^2 - H^2} \right), \quad (3.78)$$

заменяющее флуктуационно-диссипационную теорему в неустойчивой системе.

Согласно второму равенству (3.76) эта теорема выполняется только в гипотетическом случае $I(H) = \text{const} \equiv I$, в котором коэффициент макродиффузии определяется выражением

$$D_0^{(0)} = \left(\frac{I}{2\pi}\right)^{-2} \Theta \cosh \frac{\pi H}{\Theta}. \quad (3.79)$$

Его характерная особенность состоит в конечном значении подвижности процесса переориентации доменов при любых реальных значениях поля $H < \infty$. В пределе $H \gg \Theta$ значение $D_0^{(0)}$ определяется, в основном, полем, а в обратном случае $H \ll \Theta$ пропорционально температуре Θ . Отметим, что если полевая зависимость $D_0^{(0)}(H)$ — монотонно возрастающая, то коэффициент $D_0^{(0)}(\Theta)$ убывает при $\Theta < \Theta^0$ и возрастает при $\Theta > \Theta^0$, где граничная температура $\Theta^0 = 2,619H$ задается интенсивностью поля. Таков же характер температурно-полевой зависимости потока, с тем лишь отличием, что при $H \rightarrow 0$ поток $j_0 \propto H$ стремится к нулю.

В действительности зависимость (3.77) не сводится к постоянной, и выражения типа (3.79), а также и флуктуационно-диссипационная теорема становятся неприменимыми. Как видно из (3.76), (3.78) и рис. 10, нарушение суперсимметрии при $H \neq 0$ приводит к добавкам, преубеждаемым только в пределе бесконечно слабой линейной составляющей потенциала (3.75) ($H \ll H_0$). С ростом поля до значений $H = H_0$ макропоток j_0 стремится к нулю, а коэффициент макродиффузии D_0 неограниченно возрастает. Таким образом, при $H = H_0$ система доменов теряет устойчивость. Это отвечает их мгновенной переориентации при возрастании поля до значений $H \geq H_0$, превышающих интенсивность поля анизотропии, фиксирующего значения фазы в каждом из доменов.

Очевидно, изложенная схема применима не только при наличии внешнего поля H , но и в том случае, когда оно возникает самопроизвольно в результате какого-

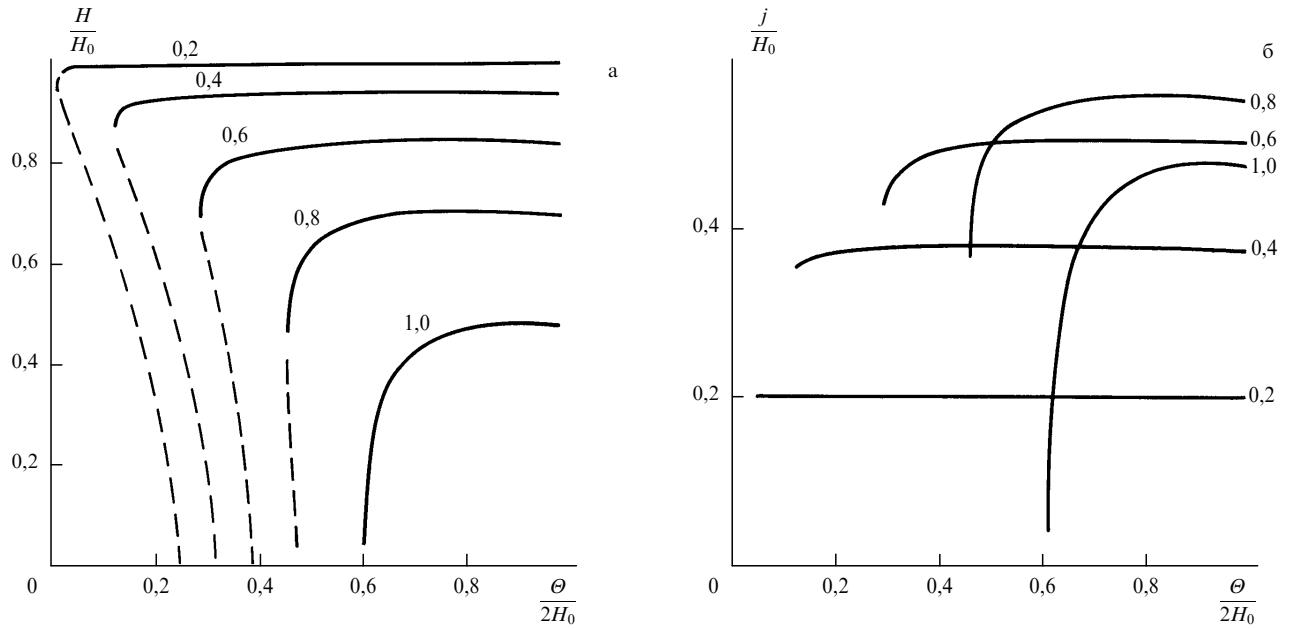


Рис. 11. Температурная зависимость поля диффузионного взаимодействия выделений (а) и соответствующего потока (б) в процессе коалесценции (цифры у кривых указывают значения параметра ρ)

либо коллективного эффекта в поведении ансамбля доменов. Такая ситуация наблюдается при установлении диффузионного взаимодействия между различными выделениями фазы в процессе коалесценции [12]. Изменчальной причиной этого взаимодействия является, как известно [16], лапласово давление $2\sigma/R$, обусловленное ненулевой кривизной $2/R$ межфазной поверхности (R — радиус сферического выделения, σ — коэффициент поверхностного натяжения). Это давление приводит, с одной стороны, к микропотоку [12]

$$j = \rho H; \quad \rho \equiv \left(\frac{R_{c0}}{R_c} \right)^3, \\ H \equiv \frac{R_c}{R} \left(1 - \frac{R_c}{R} \right), \quad R_c \equiv \frac{2\sigma\Omega C_\infty}{T\Delta}, \quad (3.80)$$

определенную интенсивность диффузии атомов недостающего компонента к выделению (здесь величина j выражена в единицах $R_c^2 D \Delta / R_{c0}^3$; D — коэффициент атомной диффузии, Δ — пересыщение лимитирующим компонентом относительно равновесного значения концентрации C_∞ , Ω — атомный объем, T — температура в энергетических единицах, R_c — критический радиус выделения, R_{c0} — его начальное значение). С другой стороны, на структурном уровне выделений поле H приводит, как видно из предыдущего, к макроскопическому потоку $j_0(H)$, определяемому первым равенством (3.76). Очевидно, двухуровневая система находится в стационарном состоянии, если на различных уровнях потоки j, j_0 уравновешивают друг друга. Получающееся условие самосогласования⁴ $j(H) = j_0(H)$ для поля H и

отвечающих ему потоков $j_0 = j = \rho H$ дает уравнение

$$\rho H = \frac{4\pi\Theta}{I^2(H, \Theta)} \sinh \frac{\pi H}{\Theta}. \quad (3.81)$$

Вид следующих из него зависимостей $H(\Theta), j(\Theta)$ приведен при различных значениях параметра ρ на рис. 11. Их характерная особенность состоит в отсутствии диффузионного взаимодействия H и соответствующего потока j в непосредственной окрестности точки $\Theta = 0$. С удалением от нее при $\Theta = \Theta_d$ скачкообразно возникает спонтанное поле H и диффузионный поток j , которые слабо возрастают в физически значимой области температуры $\Theta < 2H_0$. Как видно из рис. 12а, б с уменьшением параметра ρ спонтанное поле H возрастает, а соответствующий диффузионный поток j сначала возрастает, а при $\rho < 0,8$ спадает. При этом граничное значение температуры Θ_d , задаваемое уравнением

$$\frac{\Theta}{2H_0} \exp \left(\frac{2H_0}{\Theta} \right) = \frac{\pi}{\rho}, \quad (3.82)$$

спадает согласно зависимости, приведенной на рис. 12в. Поскольку критический радиус $R_c(t)$ со временем монотонно возрастает, его начальное значение R_{c0} удовлетворяет условию $R_{c0} < R_c$, так что параметр $\rho = (R_{c0}/R_c)^3$ всегда меньше единицы и спадает со временем. Благодаря этому, в частности, всегда выполняется условие $\rho < \pi/e = 1,156$ наличия решения уравнения (3.82). Но поскольку $\rho \propto (\Delta/\sigma)^3$, то из рис. 11 и рис. 12 видно, что рост поверхностного натяжения σ и падение пересыщения $\Delta(t)$ приводят к расширению температурного интервала коалесценции и усилению спонтанного поля H ; соответственно диффузионный поток j сначала возрастает, а затем спадает. Такое поведение должно проявляться с течением времени, приводящим к спаданию пересыщения $\Delta(t) \propto t^{-1/3}$ [12], а следовательно, и параметра $\rho \propto t^{-1}$.

⁴ По сути дела, на таком условии основывается и классическая теория коалесценции [12]. Однако там исследуется зависимость потоков j, j_0 от радиуса выделения R , в соответствии с чем равенства (3.80) дополняются определением $j_0 = dR/dt$, а условие самосогласования $j(R) = j_0(R)$ приводит к уравнению движения на макроуровне.

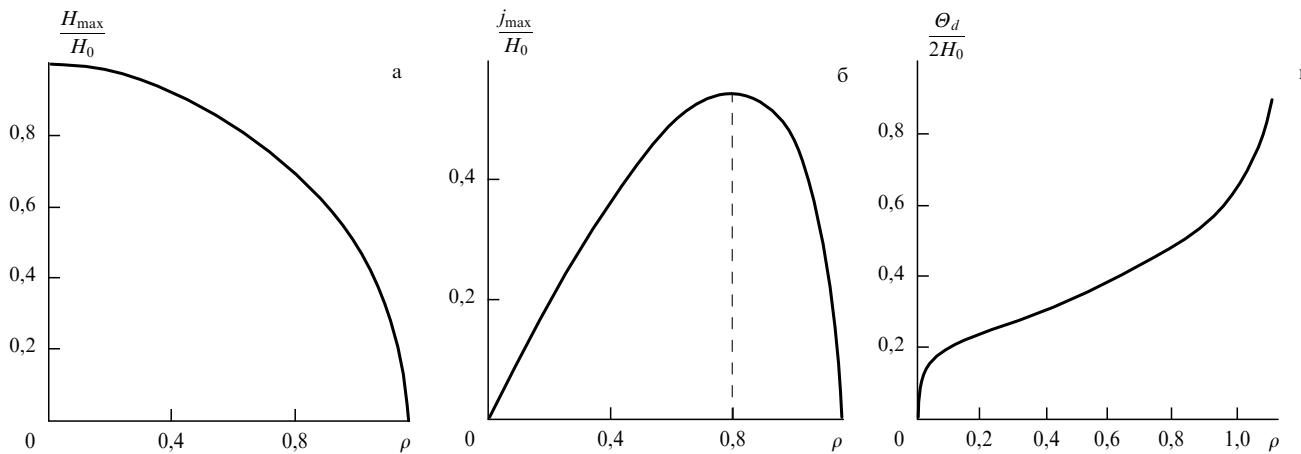


Рис. 12. Зависимость от степени пересыщения Δ и коэффициента поверхностного натяжения σ максимальных значений спонтанного поля (а) и спонтанного потока (б) и граничной температуры (в), характеризующих установление когерентного режима коалесценции (параметр $\rho \propto (\Delta/\sigma)^3$)

Полученный результат об отсутствии диффузионного взаимодействия (а следовательно, и коалесценции) в температурной области, прилегающей к точке $\Theta = 0$ (в разделе 3.5 показано, что она отвечает спинодали), представляется, на первый взгляд, совершенно неожиданным. Во всяком случае, в классической постановке [12] задачи о коалесценции считается, что этот процесс имеет место во всей области фазовой диаграммы вблизи линии фазового перехода первого рода, отвечающей кривой $C_\infty(T)$ в обозначениях (2.68). Однако из (3.81) нетрудно видеть, что с приближением к точке $\Theta = 0$ величина макропотока $j_0(H)$ в правой части равенства возрастает быстрее линейной зависимости $j = \rho H$ для микропотока. В результате ненулевое значение H диффузионного поля реализуется только при $\Theta > \Theta_d$, где граничное значение Θ_d задается условием (3.82). Физически это обусловлено критическим нарастанием гетерофазных флуктуаций вблизи спинодали. Недавно D. Beyens, Y. Jayalakshmi (Service de Physique de L'Etat Condense, C.E. Saclay) получили экспериментальные данные, подтверждающие приведенную картину: оказалось, что классический закон коалесценции $R \propto t^{1/3}$ наблюдается только вдали от спинодали, а в ее окрестности $R \propto t$.

3.5. Анализ пространственно-временного поведения релаксирующей системы

По сути дела, изложенный формализм представляет схему самосогласованного описания двух иерархически соподчиненных структурных уровней системы, претерпевающей фазовый переход первого рода. В рамках стандартного подхода (см. [16]) на микроскопическом уровне используется схема, согласно которой по заданному межатомному взаимодействию и температуре можно найти равновесное значение η_0 параметра порядка и соответствующую восприимчивость χ . В рамках нашего подхода характеристики микроуровня определяются параметром памяти $q = \eta_0^2$ и аддитивистской восприимчивостью χ , значения которых задаются равенствами (3.61), (3.62). Использование суперсимметричного подхода, представляющего как саму гидродинамическую моду упорядочения, так и ее пространственно-временную неоднородность, позволяет дополнить стандартное описание [16] характеристиками микроскопиче-

ского уровня, представляющего эволюцию крупномасштабной (доменной или гетерофазной) структуры упорядоченной фазы. Такими характеристиками являются параметр памяти q_0 , определяющий согласно (3.46) степень замороженности макроструктуры, и задаваемый первым равенством (3.51) параметр неэргодичности Δ , представляющий разность изотермической χ_0 и аддитивистской χ восприимчивостей (см. (3.52)). Согласно (3.61) параметр памяти q_0 определяется обусловленным закалкой $\dot{T} \neq 0$ замороженным беспорядком $h \propto |\dot{T}|^\alpha$ в разбросе микроскопических значений поля, сопряженного параметру порядка. Не обратимый отклик Δ согласно (3.62) определяется как замороженным беспорядком h , так и температурой ε . Поскольку параметр памяти q_0 может иметь ненулевые значения и для одноуровневой системы, то он представляется менее важной характеристикой, чем параметр неэргодичности Δ , который приобретает конечные значения только с появлением нескольких структурных уровней, которое нарушает суперсимметрию относительно гомогенных и гетерофазных флуктуаций. Иными словами, появление ненулевого параметра неэргодичности Δ указывает на образование нового структурного уровня, иерархически связанного с исходным микроскопическим.

Под действием поля, ориентирующего домены, или при его спонтанном включении в процессе коалесценции происходит перестройка макроструктуры упорядоченной фазы. Ее кинетика характеризуется макропотоком j_0 , определенным согласно (3.65), и коэффициентом макродиффузии (3.66). Использование модели нелинейного маятника в разделе 3.4 показывает, что полевая зависимость макропотока $j_0(H)$ имеет при $H \ll H_0$ линейный вид, затем выходит на насыщение и с приближением поля H к значению H_0 , характеризующему анизотропию, опять спадает до нуля (см. рис. 10). Подвижность в переориентации доменов при $H = 0$ обладает конечным значением $D_0 = 2\pi H_0 \exp(-2H_0/\Theta)$, имеющим обычный аррениусовский вид, а вблизи предела $H = H_0$ расходится как $(H_0 - H)^{-1/2}$. Как упоминалось в разделе 3.4, такой характер поведения полевых зависимостей $j_0(H)$, $D_0(H)$ отражает неустойчивость системы доменов относительно ориентирующего поля H : при превышении поля анизотропии ($H \geq H_0$) происходит их резкая переориентация в заданном направлении H . Характерно, что на-

блудающаяся при конечных значениях H потеря суперсимметрии приводит к нарушению флюктуационно-дисципационной теоремы (см. (3.76)).

При самопроизвольном включении поля H в процессе коалесценции [12] его самосогласованное значение определяется условием (3.80) компенсации микро- и макропотоков. Как видно из рис. 11, 12 и следующей из (3.80) зависимости $\rho \propto \sigma^{-3} t^{-1}$, с ростом поверхностного натяжения σ и течением времени t происходит расширение интервала коалесценции в область низких температур; максимальное значение спонтанного поля H при этом плавно возрастает до значения H_0 , а максимальный поток сначала увеличивается, а затем спадает до нуля.

Дальнейшее продвижение в физической интерпретации полученных данных требует детализации картины распределения шума Θ между микро- и макроуровнями. С этой целью учтем прежде всего, что в условии (3.2) появление макроуровня должно отражаться введением дополнительного усреднения по макроансамблю доменов. Кроме того, из полного стохастического потока ζ следует выделить макроскопическую составляющую $\zeta_0 = \langle \zeta \rangle$, не проявляющую стохастический характер на микроуровне. В результате коррелятор $\overline{\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \zeta(0, 0) \rangle}$, где угловые скобки и черта означают усреднение по микро- и макроансамблям, разделяется на макроскопическую составляющую $\overline{(\zeta(\mathbf{r}, t) - \zeta_0(\mathbf{r}, t))(\zeta(0, 0) - \zeta_0(0, 0))}$ и макроскопическую $\zeta_0(\mathbf{r}, t)\zeta_0(0, 0)$. Очевидно, как и в (3.2), уровень шума первой из них определяется величиной Θ . Что касается второй, то, поскольку основой макроструктуры является упорядоченная фаза, характеризуемая температурой спинодали Θ_s , можно полагать, что на отвечающем ей уровне интенсивность шума Θ_0 принимает вид⁵

$$\Theta_0 = \begin{cases} \Theta - \Theta_s & \text{при } \Theta > \Theta_s, \\ 2(\Theta_s - \Theta) & \text{при } \Theta < \Theta_s, \end{cases} \quad (3.83)$$

где появление множителя 2 при $\Theta < \Theta_s$ отражает обычный "закон двойки". Соответственно условие (3.2) расщепляется на равенства

$$\begin{aligned} \overline{(\zeta(\mathbf{r}, t) - \zeta_0(\mathbf{r}, t))(\zeta(0, 0) - \zeta_0(0, 0))} &= 2\Theta \hat{\Gamma} \delta(\mathbf{r}) \delta(t), \\ \overline{\zeta_0(\mathbf{r}, t)\zeta_0(0, 0)} &= 2\Theta_0 \delta(\mathbf{r}) \delta(t); \quad \zeta_0(\mathbf{r}, t) \equiv \langle \zeta(\mathbf{r}, t) \rangle. \end{aligned} \quad (3.84)$$

Здесь учтено, что на макроуровне нет условий для выполнения закона сохранения, в связи с чем $\hat{\Gamma}_0 = 1$. Отметим, что хотя на обоих уровнях реальные значения температур T и $T_0 = T - T_s$ могут оказаться соизмеримыми, безразмерные интенсивности шума Θ, Θ_0 таковы, что всегда $\Theta \gg \Theta_0$. Очевидно, это обстоятельство, отражающее ослабление флюктуаций при переходе от микро- к макроуровню, обусловлено возрастанием характерных пространственно-временных масштабов. Так, если в первом равенстве (3.84) их роль играют корреляционная длина ζ и время релаксации мягкой моды τ (см. после (3.2)), то во втором имеем характерный размер домена L (в случае коалесценции он представляет начальное значение R_{c0} критического радиуса) и макроскопическое время τ_0 .

Проведенное рассмотрение показывает, что в формулах (3.61)–(3.64), (3.76)–(3.82) для величин $\chi, q_0, \Delta, j_0, D_0$

⁵ В рамках развиваемого подхода такое допущение отражает иерархическую связь между микро- и макроуровнями.

под уровнем шума следует понимать эффективную температуру макроуровня (3.83). Например, выражения для характерных точек Θ_c, Θ_g и параметра неэргодичности Δ принимают вид

$$\begin{aligned} |\Theta_c - \Theta_s| &= \frac{\zeta}{cv}, \quad c = \begin{cases} 12, & \Theta > \Theta_s, \\ 24, & \Theta < \Theta_s; \end{cases} \\ |\Theta_g - \Theta_c| &= \frac{\zeta}{cv} \left(\frac{h}{h_c} \right)^{2/3}; \quad h_c = \frac{\zeta^{3/2}}{(18v)^{1/2}}; \\ \frac{\Delta}{\Theta_0} &= 2\zeta^2 |\varepsilon_0|^2 \left[1 - \left(\frac{h}{h_0} \right)^{4/3} \right], \\ h_0 &= h_c |\varepsilon_0|^{3/2}, \quad \varepsilon_0 = \frac{\Theta - \Theta_c}{\Theta_c - \Theta_s}. \end{aligned} \quad (3.85)$$

В формулах (3.76)–(3.82) для кинетических характеристик j_0, D_0 следует просто заменить Θ на Θ_0 . Характер поведения температурно-полевой зависимости $\Delta(\Theta_0, h)$ можно проследить на рис. 13.

При квазистатическом охлаждении ($h = 0$) система теряет эргодичность в точках $\Theta_c^{(\pm)}$, расположенных по обе стороны температуры спинодали Θ_s , в которой значение Δ/Θ_0 максимально. Таким образом, в согласии с результатом [42] теории связанных мод наличие макроуровня максимально проявляется вблизи температуры спинодали. Очевидно, этот факт отражает критическое усиление гетерофазных флюктуаций. Как уже упоминалось в разделе 3.3, для квазистатической системы зависимость $\Delta(\varepsilon_0)$ носит плавный характер. Исследование ситуации $h \ll h_c$ проводилось в работе [24], где, однако, использовался альтернативный данному метод свзанных мод, в рамках которого параметр ζ вовсе не мал. Оказывается, что при этом зависимость $\Delta(\varepsilon_0)$ имеет конечный разрыв в точке бинодали $\Theta_c^{(\pm)}$.

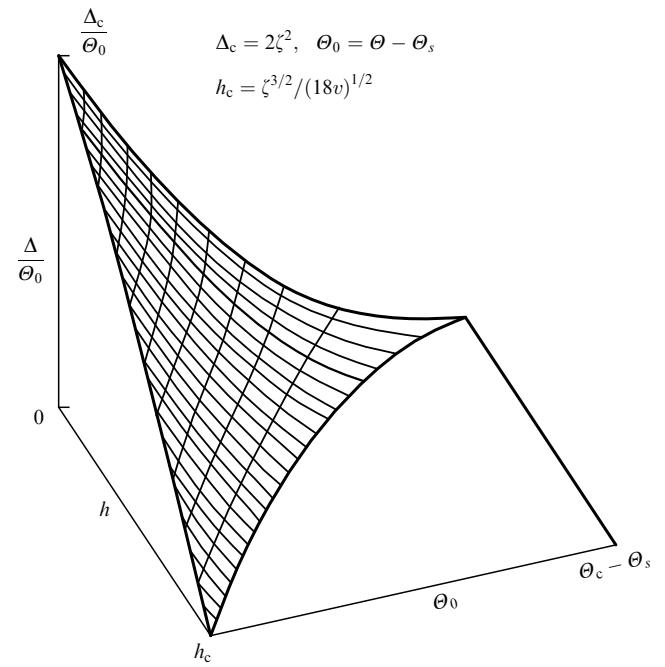


Рис. 13. Зависимость параметра неэргодичности Δ от интенсивности шума Θ_0 и закаленного беспорядка h

Если охлаждение производится со скоростью, обеспечивающей замороженный беспорядок $h \sim h_0$, то при всех температурах система приобретает макроскопическую память, характеризуемую параметром Эдвардса–Андерсона $q_0 \propto h^{2/3}$. Кроме того, происходит сужение области неэргодичности, граница которой Θ_g приближается к точке спинодали Θ_s согласно второму равенству (3.85). Как видно из соответствующей диаграммы потери эргодичности $h_0(\Theta_0)$ на рис. 13, с увеличением скорости закалки $|\dot{T}|$ при заданной температуре $\Theta_s < \Theta < \Theta_c$ можно обеспечить такой беспорядок $h > h_0$, при котором выполняется условие $\Delta = 0$. Это означает фиксацию лабильного неупорядоченного состояния относительно образования нового структурного уровня (при закалке из жидкости такая фиксация отвечает образованию аморфного состояния). Критическая скорость закалки, обеспечивающая указанный процесс аморфизации, определяется вторым равенством (3.85). Полагая $\Theta_g = \Theta_c$, находим критическое значение беспорядка

$$h_c = \frac{\zeta^{3/2}}{(18v)^{1/2}}, \quad (3.86)$$

обеспечивающее подавление фазового перехода (при закалке из жидкости — аморфизацию) во всей области температур.

Отсюда видно, что наиболее легко аморфизуются системы с большим ангармонизмом v и компенсацией параметра межатомного взаимодействия w по отношению к одиночественному отталкиванию. Используя феноменологическую связь $h = B|\dot{T}|^a$, где B, a — положительные константы, для критической скорости закалки из (3.86) получаем

$$|\dot{T}|_c = B^{1/a} \frac{(8w/A^2 - 1)^{3/2a}}{(18v)^{1/2a}}. \quad (3.87)$$

Здесь совершен переход к размерным величинам, в связи с чем в числителе появилась константа A , стоящая в разложении Ландау при квадратичном члене. Поскольку, как правило, параметры нелинейности $v^{1/2}, w^{1/2}$ всегда намного меньше эффективной жесткости пружинки A , моделирующей атомный потенциальный рельеф [16], то для снижения величины $|\dot{T}|_c$ следует подбирать системы с мягким, сильно ангармоничным потенциалом и значительным межатомным взаимодействием. Именно такая ситуация реализуется в легко аморфизующихся системах типа "металл–металлоид", где значительная разница в атомных радиусах компонент обеспечивает рост параметра ангармонизма v , а наличие сильной ковалентной связи — большое значение параметра взаимодействия w .

Рассмотрим теперь характер пространственно-временного поведения неэргодической системы с памятью. Как видно из определений (3.40), (3.51) и предельных соотношений (3.43), выражение для опережающей и запаздывающей функций Грина имеет с точностью до первых неисчезающих степеней частоты следующий вид:

$$C_{\pm}(\omega) = \Delta + g\Theta(\Theta \pm i\gamma\tau_0\omega)^{-1}, \quad \omega \ll 1. \quad (3.88)$$

Используя равенства (3.38)–(3.43), (3.46), (3.48), (3.49), (3.51), (3.53), (3.54), (3.56), для эффективного времени

релаксации находим

$$\begin{aligned} \tau_0^{-1} &= 2 \left(\frac{3v}{\Theta} \right)^2 g^2 (g^2 - q_0^2) \approx 2\zeta^2 (1 - |\varepsilon|)^{-2} \left[1 - \left(\frac{h}{h_0} \right)^{4/3} \right], \\ \varepsilon &= \frac{\Theta}{\Theta_s} - 1. \end{aligned} \quad (3.89)$$

Характерная особенность полученной зависимости состоит в спадании времени релаксации с удалением от точки спинодали Θ_s и уменьшением скорости закалки. Наличие выражения в квадратных скобках, стремящегося к нулю, отвечает расходимости величины $\tau_0(h)$ в пределе больших скоростей закалки, обеспечивающих беспорядок $h \geq h_0$. Это означает замораживание исходного неупорядоченного состояния ввиду появления памяти, обусловленной закалкой. Иными словами, реализуется процесс типа аморфизации.

Как упоминалось во введении, использованный метод позволяет не только описать эффекты памяти и неэргодичности, являющиеся характерными атрибутами неравновесной термодинамической системы, но и представить картину ее пространственно-временной эволюции. Принципиально важное преимущество изложенного суперсимметричного подхода состоит в том, что он описывает как стадию зарождения фазы, так и последующую стадию роста выделений. Если в рамках классической картины [43, 44] для их представления приходится прибегать к мало связанным моделям (см. гл. 4, 5 в [43]), то в нашем подходе указанные процессы представляют начальную и позднюю стадии единого процесса релаксации неравновесной системы. При этом само разделение стадий зарождения и роста обеспечивается потерей суперсимметрии, которая означает выделение гетерофазных флуктуаций на фоне гомогенных. Описание процесса зарождения фазы на начальной стадии требует исследования спектра собственных значений суперсимметричного гамильтонiana, отвечающего нулевому числу фермионов (см. раздел 3.4). С потерей суперсимметрии на поздней стадии выделяется псевдофермиевская компонента и для исследования процесса роста новой фазы требуется рассматривать только эту составляющую суперполя. В рамках обычного подхода такое выделение отвечает представлению гетерофазной системы стохастическим ансамблем движущихся межфазных границ [45]. Сложность картины роста новой фазы по сравнению с описанием процесса ее зарождения обусловлена тем, что задача о зарождении сводится к определению собственных значений, тогда как для описания стадии роста требуется исследовать также собственные функции (3.72).

Оставляя в стороне указанную общую постановку задачи, отметим, что вид временной зависимости $L(t)$ размера домена можно получить уже из соотношения (3.88), содержащего характерную комбинацию $gt\tau_0$. Действительно, как видно из (3.29), учет пространственной дисперсии дает стандартную зависимость Оринштейна–Цернике $\tau_k = \tau(1 + \xi^2 k^2)^{-1}$ (в размерных единицах) для времени релаксации на микроуровне (внутри домена). Согласно данным [18] при переходе на макроуровень, представляющий поведение самих доменов, τ_k трансформируется в боголюбовскую особенность $\tau_{0k} = \tau_0(\xi k)^{-2}$, $\tau_0 = \chi_0 T/D_b L$, где χ_0 — изотермическая восприимчивость, D_b — коэффициент диффузии гра-

ницы. Тогда, учитывая скейлинговые соотношения $k \sim L^{-1}$, $\omega \sim t^{-1}$, для несохраняющегося параметра порядка из условия $\Theta \sim g\tau_{0k}\omega$ соизмеримости слагаемых в знаменателе (3.88) сразу получаем $L^2 \propto t$ [5]. При выполнении закона сохранения перед Θ , как видно из (3.2), появляется дополнительный множитель k^2 , в соответствии с чем следует соотношение $L^4 \propto t$, имеющее место на стадии, предшествующей коалесценции. С ее наступлением устанавливается когерентный режим диффузионного взаимодействия [12], что означает появление эффективного поля, имеющего смысл спонтанного потока атомов \mathbf{j} , направленного от малых выделений к большим. В отличие от обычного диффузионного потока ζ , который, будучи пропорциональным градиенту химического потенциала, дает мощность коррелятора белого шума $\langle |\zeta_k|^2 \rangle = 2\Theta k^2$, пропорциональную второй степени волнового вектора, когерентный поток⁶ \mathbf{j}_k , не связанный с каким-либо градиентом, характеризуется коррелятором $\langle \zeta_k^* \mathbf{j}_k \rangle \propto k$. Добавляя его к обычному слагаемому Θ в знаменателе гриновской функции (3.88) и сравнивая со слагаемым $g\tau_{0k}\omega$, находим скейлинговую зависимость $L^3 \propto t$, присущую процессу коалесценции [12].

Представленные особенности гриновской функции (3.88) позволяют также интерпретировать характер крупномасштабных корреляций параметра порядка. Для его описания воспользуемся флюктуационно-диссириационной теоремой $S = (2/\omega) \operatorname{Im}(C_- - \Delta)$, которая после подстановки (3.88) дает

$$S_k(\omega) = \frac{2\Theta k g^2 \tau_{0k}}{\Theta_k^2 + (g\tau_{0k}\omega)^2}. \quad (3.90)$$

Отсюда с учетом указанных выше зависимостей τ_{0k} , Θ_k для структурного фактора $S_k \equiv S_k(\omega=0)$ получаем асимптотику $S_k \sim k^{-p}$, где $p = 2, 4, 3$ для случаев несохраняющегося и сохраняющегося параметров порядка и процесса коалесценции соответственно. В r -представлении d -мерного пространства такому поведению отвечает зависимость вида $S(r) \sim r^{p-d}$, описывающая характер корреляций на расстояниях $r \ll L$. Применимально к случаю сохраняющегося параметра порядка ($p = 4$) полученные асимптотики объясняют закон Порода [32], описывающий появление резких межфазных границ [20]. Для несохраняющегося параметра порядка ($p = 2$) имеем обычное поведение $S(r) \sim r^{-1}$, а в случае коалесценции ($p = 3$) корреляция параметра порядка слабо изменяется с расстоянием.

Нетрудно провести параллель между представленным методом анализа корреляционных функций и методом [19–21], основанным на рассмотрении уравнений движения (2.54), (2.55). Действительно, анализ [19–21] показывает (см. также раздел 2.1), что для каждого из рассмотренных случаев в указанных уравнениях доминируют члены порядка L^{-p} . В рамках нашего подхода это отвечает удержанию наибольшего слагаемого $\Theta_k \propto k^{p-2}$, $k \sim L^{-1}$, для интенсивности шума в выражении (3.88) для функции Грина. Разумеется, оба указанных подхода приводят к одинаковым результатам. Однако, поскольку содержащие Θ условия нормировки шума (3.84) являются в термодинамике неравно-

весной системы основополагающими, то основанный на анализе их вида подход представляется более предпочтительным.

3.6. Суперсимметричное представление флюктуаций параметра порядка

В стандартной теории фазовых переходов принимается, что флюктуации параметра порядка имеют гомогенный характер. Это позволяет представить их поле рядом Фурье, где основной вклад обеспечивается длинноволновыми компонентами, так что определение флюктуационных поправок сводится к вычислению простейших интегралов гауссова типа (см. [30]). В рамках такого подхода не учитывается, однако, что значительный вклад может быть связан не только с плавным изменением поля параметра порядка, но и с солитоноподобными образованиями типа антифазных границ. Иными словами, наряду с гомогенными флюктуациями следует учитывать и гетерогенную составляющую [28].

Настоящий раздел посвящен решению данной задачи [46]. Исходя из того факта, что количество гомогенных флюктуаций может нарастать неограниченно, а гетерогенная флюктуация типа кинка может реализоваться в данной точке только одна, представим их как бозевскую и фермиевскую составляющие единого суперполя [41].

Для построения теоретической схемы запишем уравнение Ланжевена [29] для поля несохраняющегося параметра порядка $\eta(\mathbf{r}, t)$ в виде (ср. с (2.2), (3.1))

$$\gamma^{-1} \dot{\eta} = -W(\eta) + \zeta, \quad (3.91)$$

где точка означает дифференцирование по времени, γ — кинетический коэффициент, $-W(\eta)$ — детерминистическая составляющая силы, сопряженной параметру порядка (она равна производной от термодинамического (синергетического) потенциала $V(\eta)$ по η : $W(\eta) = dV(\eta)/d\eta$); стохастическая компонента силы $\zeta(\mathbf{r}, t)$ принята в виде белого шума (ср. с (2.3), (3.2))

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{0}, 0) \rangle = 2 \frac{T}{\gamma} \delta(\mathbf{r}) \delta(t), \quad (3.92)$$

где T — температура в энергетических единицах, угловые скобки означают усреднение по гауссову распределению (см. (3.4)).

Роль наблюдаемой величины, определяемой в эксперименте, играет коррелятор

$$S(\mathbf{r}, t) = \langle \eta(\mathbf{r}, t) \eta(\mathbf{0}, t) \rangle. \quad (3.93)$$

В результате вычислений, описанных в разделе 3.4, получаем вторично квантованный гамильтониан (ср. с (3.70))

$$\hat{\mathcal{H}} = -T \frac{\delta^2}{\delta \eta^2} + \frac{1}{4T} W^2(\eta) + \frac{1}{2} W'(\eta) [\hat{a}^+, \hat{a}^-], \quad (3.94)$$

где штрих означает дифференцирование по η , \hat{a}^\pm — фермиевские операторы рождения–уничтожения.

В квадратичном приближении свободная энергия имеет вид

$$V = \frac{1}{2\chi} \int \eta^2(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int w(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \eta(\mathbf{r}) \eta(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \quad (3.95)$$

⁶ Его значение дается формулой (3.80).

где χ — восприимчивость, ядро $w(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ учитывает неоднородность. Переходя к фурье-трансформантам, получаем полный гамильтониан системы

$$\hat{H} \equiv \int \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}},$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}} = -T \left| \frac{\delta}{\delta \eta_{\mathbf{k}}} \right|^2 + \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2}{4T} |\eta_{\mathbf{k}}|^2 + \frac{1}{2} \varepsilon_{\mathbf{k}} [\hat{a}_{\mathbf{k}}^+, \hat{a}_{\mathbf{k}}^-]. \quad (3.96)$$

Здесь \mathbf{k} — волновой вектор, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \chi^{-1} + w_{\mathbf{k}}$ — затравочный спектр, в последнем слагаемом учтено условие симметрии $w_{\mathbf{k}} = w_{-\mathbf{k}}$.

Введем бозонные операторы вторичного квантования \hat{b}^{\pm} согласно равенству

$$\hat{b}^{\pm} = \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{4T} \right)^{1/2} \eta_{\mathbf{k}} \mp \left(\frac{T}{\varepsilon_{\mathbf{k}}} \right)^{1/2} \frac{\delta}{\delta \eta_{\mathbf{k}}}. \quad (3.97)$$

Тогда гамильтониан \hat{H} в (3.96) сводится к сумме двух составляющих:

$$\hat{H} = \hat{H}_a + \hat{H}_b,$$

$$\hat{H}_a = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \left(\hat{n}_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2} \right), \quad \hat{n}_{\mathbf{k}} = \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}}^-,$$

$$\hat{H}_b = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \left(\hat{v}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right), \quad \hat{v}_{\mathbf{k}} = \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}}^-. \quad (3.98)$$

Таким образом, поведение флюктуирующей системы представляется двумя равноправными слагаемыми \hat{H}_a , \hat{H}_b , первое из которых носит фермиевский характер (оператор $\hat{n}_{\mathbf{k}}$ принимает только значения $n_{\mathbf{k}} = 0, 1$), а второе — бозевский (оператор $\hat{v}_{\mathbf{k}}$ имеет собственные значения $v_{\mathbf{k}} = 0, 1, 2, \dots$). Очевидно, фермиевский вклад отвечает гетерофазным флюктуациям, солитонная природа которых отражается присущим фермionам правилом запрета. Соответственно бозонное слагаемое связано с обычными, гомогенными флюктуациями, число которых $v_{\mathbf{k}}$ в континуальном пределе $\mathbf{k} \rightarrow 0$ может принимать сколь угодно большие значения. Равноправный характер гетеро- и гомогенных флюктуаций отражается в том, что обе составляющие имеют одинаковый спектр $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ (в суперсимметричном представлении это означает сохранение суперсимметрии, выражаящейся в равноправии бозевской η и фермиевских $\psi, \bar{\psi}$ компонент). Принципиально важно, что нулевые энергии $E_{a,b}^{(0)} = \mp(1/2) \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}$ фермиевской и бозевской компонент, вычисленные по отдельности, расходятся, а при совместном учете в точности компенсируют друг друга. Этот факт указывает на то, что непротиворечивая картина может быть достигнута только при совместном рассмотрении обоих типов флюктуаций.

Определим их вклад в термодинамический потенциал [30]

$$\Omega_{\mathbf{k}} = -T \ln \sum_{n_{\mathbf{k}}} \left[\exp \left(\frac{\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{T} \right) \right]^{n_{\mathbf{k}}}, \quad (3.99)$$

отвечающий данному значению \mathbf{k} (μ — химический потенциал, определяемый условием сохранения полного числа флюктуаций). Элементарное суммирование по

значениям $n_{\mathbf{k}} = 0, 1$ дает для гетерофазных флюктуаций

$$\Omega_{\mathbf{k}}^{(a)} = -T \ln \left[1 + \exp \left(\frac{\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{T} \right) \right]. \quad (3.100)$$

В случае бозевской компоненты под $n_{\mathbf{k}}$ в (3.99) следует подразумевать $v_{\mathbf{k}} = 0, 1, 2, \dots$, и суммирование геометрической прогрессии дает

$$\Omega_{\mathbf{k}}^{(b)} = T \ln \left[1 - \exp \left(\frac{\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{T} \right) \right], \quad (3.101)$$

где в силу суперсимметрии взято то же значение химического потенциала μ , что и для фермионов.

В параболическом приближении закон дисперсии записывается в виде

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_0 + \beta \mathbf{k}^2, \quad (3.102)$$

где $\varepsilon_0 = \alpha(T - T_c)$ — "частота" мягкой моды, T_c — критическая температура, α, β — положительные константы. Кроме того, для несохраняющегося параметра порядка химический потенциал $\mu = 0$ [30]. В результате формулы (3.100), (3.101), взятые при $T = T_c$ и $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, дают

$$\Omega_0^{(a)} = -T \ln 2, \quad \Omega_0^{(b)} = -\infty. \quad (3.103)$$

Если результат, полученный для бозевского вклада, отвечает хорошо известному критическому нарастанию гомогенных флюктуаций, то первое равенство (3.103) означает скачок энтропии $\Delta s = \ln 2$, приходящейся на одну частицу, за счет гетерофазных флюктуаций.

Полный термодинамический потенциал флюктуаций $\Omega = \sum_{\mathbf{k}} (\Omega_{\mathbf{k}}^{(a)} + \Omega_{\mathbf{k}}^{(b)})$ имеет вид

$$\Omega = TV \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{2\pi^2} \ln \tanh \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{2T}, \quad (3.104)$$

где произведен переход от суммирования по \mathbf{k} к интегрированию, V — объем системы. Полученная формула принципиально отличается от обычно используемой (см., например, с. 524 в [30]) наличием функции \tanh . В области $\varepsilon_{\mathbf{k}} \ll T$, которая и дает основной вклад в термодинамические величины, наличие этой функции не сказывается, однако при больших $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ имеем $\ln \tanh(\varepsilon_{\mathbf{k}}/2T) \approx 0$, так что не требуется вводить верхний предел обрезания.

В общем случае аналитическое определение интеграла (3.104) не представляется возможным. Однако если интересоваться флюктуационной поправкой ΔC к теплоемкости, то двойное дифференцирование по температуре приводит к исчезновению логарифма, а условие $\varepsilon_{\mathbf{k}} \ll T$ позволяет аппроксимировать гиперболические функции их аргументами. В результате интеграл по \mathbf{k} становится аналитическим, и поправка ΔC выражается в виде

$$\Delta C = \frac{\alpha^{3/2} T_c^2 V}{2\pi^2 \beta^{3/2}} (T - T_c)^{-1/2}. \quad (3.105)$$

Как и в формуле Леванюка (см. с. 525 в [30]), здесь появляется большой сомножитель в знаменателе. Однако учет гетерофазных флюктуаций привел к повышению значения ΔC в $8/\pi \approx 2,55$ раз.

Рассмотрим теперь корреляционную функцию флуктуаций $S_{\mathbf{k}} = \langle |\eta_{\mathbf{k}}|^2 \rangle$. Определяя $\eta_{\mathbf{k}}$ из (3.97) и опуская аномальные средние $\langle \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\pm} \hat{b}_{-\mathbf{k}}^{\pm} \rangle$, на основе распределения Бозе $\langle \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}}^- \rangle = [\exp(\varepsilon_{\mathbf{k}}/T) - 1]^{-1}$ легко найти

$$S_{\mathbf{k}} = \frac{T}{\varepsilon_{\mathbf{k}}} \operatorname{ctanh} \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{2T}. \quad (3.106)$$

По аналогии с флюктуационно-диссипационной теоремой здесь наличие котангенса проявляется при малости энергии флуктуации $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ по сравнению с тепловой энергией T . В пределе $\varepsilon_{\mathbf{k}} \ll T$ имеем $S_{\mathbf{k}} = 2(T/\varepsilon_{\mathbf{k}})^2$, откуда с учетом (3.102) при $T = T_c$ следует зависимость Порода

$$S_{\mathbf{k}} = \frac{2T^2}{\beta^2 k^4}, \quad (3.107)$$

означающая аномальное нарастание флуктуаций в критической области. В обратном пределе $\varepsilon_{\mathbf{k}} \gg T$, отвечающем закритической области, получаем распределение Ориштейна–Цернике [30]

$$S_{\mathbf{k}} = \frac{T}{\alpha(T - T_c) + \beta k^2}. \quad (3.108)$$

Развитый метод позволяет также описать пространственное распределение границ, представляемое коррелятором фермионов

$$\langle \Delta \hat{n}(x) \Delta \hat{n}(0) \rangle = \bar{n} \delta(x) + \bar{n} g(x), \quad \Delta \hat{n}(x) = \Delta \hat{n}(x) - \bar{n}(x), \quad (3.109)$$

где x — координата, перпендикулярная границе, $\bar{n} = \langle \hat{n} \rangle$ — среднее число границ на единицу длины, $g(x)$ — корреляционная функция, подлежащая определению. Используя элементарные выкладки типа изложенных в § 117 книги [30], приходим к определению

$$g(x) = -\frac{1}{\bar{n}} \left| \int \frac{\exp(i k x)}{\exp[(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/T] + 1} \frac{dk}{2\pi} \right|^2. \quad (3.110)$$

Поскольку здесь принимается, что средняя плотность границ \bar{n} сохраняется, то в отличие от формул (3.103)–(3.108), где рассматривался процесс появления и исчезновения флуктуаций, химический потенциал $\mu \neq 0$. Более того, слабое влияние температуры на границу означает, что $\mu \gg T$, и распределение Ферми можно аппроксимировать ступенькой, принимающей значение 1 в интервале $[-k_F, k_F]$, где $k_F = \bar{n}/2\pi$ — граничное значение волнового вектора. Тогда элементарное вычисление интеграла в (3.110) дает

$$g(x) = -\frac{1}{\pi^2 \bar{n}} x^{-2} \sin^2(2\pi \bar{n} x). \quad (3.111)$$

Условие $g(x) < 0$ означает эффективное отталкивание границ, характеризуемое значением $g(0) = -4\bar{n}$.

3.7. Суперсимметричная теория фазового превращения

Хотя теория фазовых превращений представляется, на первый взгляд, как вполне устоявшаяся и в целом завершенная в своем построении область статистической физики, в действительности это не так. Не принимая во внимание такую проблему, как отсутствие точного решения трехмерной задачи Изинга, а также

отвлекаясь от весьма нетривиальных проблем, возникающих при описании конкретных ситуаций, укажем на отсутствие картины фазового превращения, которая позволила бы на основе единой схемы представить его основные особенности — связать конденсатную и флюктуационную составляющие параметра порядка [20, 21], дать единое представление стадий зарождения и роста [43, 44], исходя из микроскопической картины, описать эволюцию макроструктуры упорядоченной фазы [28] и т.д. По нашему мнению, единственным претендентом на роль схемы, позволяющей достичь всестороннего представления фазового превращения, является суперсимметричная теория поля, в которой роль бозонных компонент играют конденсатная η и флюктуационная ϕ составляющие параметра порядка, а фермиевые $\psi, \bar{\psi}$ представляют поведение межфазовых границ. Построение такой схемы будет произведено в данном разделе [47].

Исходный пункт суперсимметричного представления статистической системы — уравнение Ланжевена, которому удобно придать вид

$$\begin{aligned} \gamma^{-1} \dot{\eta} &= -V' + \beta \nabla \eta + \zeta; \\ V' &= \frac{dV}{d\eta}, \quad V = \frac{A}{2} \eta^2 + \frac{B}{4} \eta^4; \\ \langle \zeta(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{0}, 0) \rangle &= 2 \frac{T}{\gamma} \delta(\mathbf{r}) \delta(t). \end{aligned} \quad (3.112)$$

Здесь имеется в виду простейший случай однокомпонентного несохраняющегося параметра порядка η , точка означает дифференцирование по времени t , γ — кинетический коэффициент, определяющий затравочное времяя релаксации, β — параметр неоднородности, $\zeta = \zeta(\mathbf{r}, t)$ — поле флюктуаций обобщенной силы, полагаемое в виде белого шума, интенсивность которого определяется температурой T ; рассматривается фазовое превращение второго рода, для которого свободная энергия $V(\eta)$ отвечает η^4 -модели теории поля, определяемой параметрами $A \propto T - T_c$, $B(T) = \text{const} > 0$; T_c — критическая температура [30].

В рамках полевого подхода (см., например, [48]) удобно от стохастического уравнения (3.112) перейти к производящему функционалу, представляющему усредненный по шуму $\zeta(\mathbf{r}, t)$ фурье-образ по полю $\eta(\mathbf{r}, t)$ от δ -функции с аргументом, сводящимся к уравнению (3.112). Согласно схеме [25] (см. также [41]) далее удобно избавиться от δ -функции, разлагая ее в ряд Фурье по полю духов φ , произвести гауссово усреднение по шуму ζ , а также избавиться от якобиана, учитывающего переход от шума ζ к переменной η , введя интегрирование по гравссмановым полям $\psi, \bar{\psi}$ от соответствующего экспоненциального выражения (см. формулы (3.3)–(3.9)). Указанные компоненты образуют суперполе (ср. с (3.13))

$$\begin{aligned} \Phi &= \eta + T^{1/2} (\bar{\chi} \psi + \bar{\psi} \chi) + T \bar{\chi} \chi \phi, \\ \phi &= \varphi + \frac{\dot{\eta}}{2T}, \end{aligned} \quad (3.113)$$

где суперкоординаты $\bar{\chi}, \chi$ (как и сами суперкомпоненты $\bar{\psi}, \psi$) удовлетворяют обычным свойствам гравссмановых переменных (3.5). Суперсимметричный лагранжиан уравнения (3.112), получаемый в результате указанных

построений, имеет вид

$$\mathcal{L} = \gamma^{-1} \Phi \bar{D} D \Phi + \frac{\beta}{2} (\nabla \Phi)^2 + V(\Phi), \quad (3.114)$$

где операторы суперпроизводных D , \bar{D} определяются равенствами (3.15) и удовлетворяют перестановочным соотношениям (3.16). С учетом последних уравнение экстремума действия, отвечающего лагранжиану (3.114),

$$(\gamma^{-1} [\bar{D}, D] - \beta \nabla^2) \Phi + V'(\Phi) = 0,$$

$$V'(\Phi) \equiv \frac{dV(\Phi)}{d\Phi} = A\Phi + B\Phi^3 \quad (3.115)$$

приводит к системе

$$(2T\gamma)^{-1} \ddot{\eta} + [-\beta \nabla^2 + V''(\eta)] \phi = -6B\psi\bar{\psi}\eta, \quad (3.116a)$$

$$\phi = -\frac{\gamma}{2T} [-\beta \nabla^2 \eta + V'(\eta)], \quad (3.116b)$$

$$\psi + \gamma [-\beta \nabla^2 + V''(\eta)] \psi = 0, \quad (3.116b)$$

$$-\dot{\bar{\psi}} + \gamma [-\beta \nabla^2 + V''(\eta)] \bar{\psi} = 0, \quad (3.116g)$$

где

$$V''(\Phi) \equiv \frac{d^2V}{d\Phi^2} = A + 3B\Phi^2. \quad (3.117)$$

Общей особенностью уравнений (3.116a)–(3.116g) является нелинейное действие конденсатной составляющей η на все остальные компоненты суперполя (3.113). Характерно, что для η , ψ , $\bar{\psi}$ эта связь осуществляется через вторую производную $V''(\eta)$ потенциала Ландау $V(\eta)$, тогда как в уравнение (3.116b) для флюктуационной составляющей ϕ входит лишь первая $V'(\eta)$. С другой стороны, грассмановы компоненты ψ , $\bar{\psi}$ влияют только на конденсатную составляющую η , но не на флюктуационную ϕ . Аналогичным образом влияние флюктуационной компоненты ϕ оказывается только на конденсатной η .

Обращает на себя внимание также взаимная симметрия уравнений (3.116b), (3.116g) для грассмановых полей $\psi(\mathbf{r}, t)$, $\bar{\psi}(\mathbf{r}, t)$ — они получаются одно из другого обращением времени. Отсюда сразу следует важный вывод: если зависимость $\psi(t)$ описывает реальные процессы, протекающие в системе в ходе превращения, то сопряженное поле $\bar{\psi}(t)$ отвечает его обратному течению. Что касается уравнений для конденсатной и флюктуационной составляющих η , ϕ , то (3.116a) имеет (относительно временнй зависимости) второй порядок, а (3.116b) сводится к алгебраическому уравнению связи. Это отражает асимметрию системы относительно конденсатной и флюктуационной составляющих суперполя (как уже указывалось, она проявляется также в том, что уравнение связи (3.116b) содержит первую производную потенциала $V(\eta)$, а остальные — вторую).

Отметим, что уравнениям для бозевских компонент суперполя можно придать более симметричную форму, если с помощью второго равенства (3.113) перейти от флюктуационной составляющей ϕ к полю духов φ . Действительно, тогда равенство (3.116b) принимает вид

$$\gamma^{-1} \dot{\eta} = -V'(\eta) + \beta \nabla^2 \eta - 2 \frac{T}{\gamma} \varphi. \quad (3.118)$$

В отличие от исходного уравнения (3.112) полученное не содержит стохастических членов. Из сравнения (3.112) и (3.118) видно, что поле духов φ представляет огибающую линию флюктуаций ζ обобщенной силы. Дифференцируя (3.118) по времени и подставляя получающееся выражение для $\dot{\eta}$ в (3.116a), находим

$$\gamma^{-1} \dot{\varphi} = -[-\beta \nabla^2 + V''(\eta)] \varphi + 6B\psi\bar{\psi}\eta. \quad (3.119)$$

Система (3.118), (3.119), в которой первая производная $V'(\eta)$ входит уже в уравнение для конденсатной составляющей параметра порядка, имеет форму, подобную (3.116b), (3.116g). Однако в сравнении с грассмановыми полями здесь возникают дополнительные силы: согласно (3.118) на скорость изменения конденсатной составляющей η влияет кроме самосогласованного поля усредненное поле флюктуаций φ , скорость изменения которого определяется согласно (3.119) не только взаимодействием φ с η , но и внешним воздействием $\psi\bar{\psi}\eta$.

Приступая к решению уравнений (3.116a)–(3.116g), легко видеть, что наиболее простым образом описывается поведение грассмановых компонент. Действительно, умножая (3.116b) на $\bar{\psi}$ справа, а (3.116g) на ψ слева и вычитая полученные выражения друг из друга, приходим к уравнению непрерывности

$$\begin{aligned} \dot{\rho} + \nabla \mathbf{j} &= 0; \\ \rho &\equiv \gamma^{-1} \psi\bar{\psi}, \quad \mathbf{j} \equiv \beta [\psi \nabla \bar{\psi} - (\nabla \psi) \bar{\psi}]. \end{aligned} \quad (3.120)$$

Сравнивая с обычными квантовомеханическими выражениями (см., например, § 19 в [49]), видим, что в рамках данного подхода коэффициент β играет роль постоянной Планка⁷, а отсутствие мнимой единицы i в определении потока \mathbf{j} формально означает мнимость времени t . В однородном случае имеем $\nabla \psi = \nabla \bar{\psi} = 0$, и согласно (3.120) величина ρ не зависит от времени. Такая ситуация будет сохраняться и в неоднородном случае, если выполняется условие

$$\oint \mathbf{j} d\mathbf{S} = 0, \quad (3.121)$$

означающее, что поверхность S не охватывает топологические особенности полей $\psi(\mathbf{r})$, $\bar{\psi}(\mathbf{r})$, которые, по-видимому, отвечают источникам межфазных границ. В этом случае в уравнениях (3.116b), (3.116g) можно перейти к пространственным фурье-образам ($-\nabla^2$ заменяется квадратом волнового вектора \mathbf{k}^2), и формальное интегрирование приводит к выражению

$$\begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{k}}(t) \\ \bar{\psi}_{\mathbf{k}}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{0\mathbf{k}} \\ \bar{\psi}_{0\mathbf{k}} \end{pmatrix} \exp \left\{ \mp \gamma \int_{t_0}^t [(A + \beta \mathbf{k}^2) + 3B\eta_{\mathbf{k}}^2(t')] dt' \right\}, \quad (3.122)$$

⁷ В выражениях (3.120) для плотности ρ и потока \mathbf{j} множители γ , β разделены с тем, чтобы величина ρ была безразмерной, а размерность \mathbf{j} составляла см/с. 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 $\hat{\psi}\hat{\bar{\psi}} = \hat{n} - 1/2$ сводится к стандартному оператору числа фермионов $\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a}^-$.

где ψ_{0k} , $\bar{\psi}_{0k}$ — постоянные интегрирования, определяемые выбором начального момента времени t_0 . Полученное равенство выражает явным образом отмеченный выше факт о взаимной обратимости процессов, отвечающих временным зависимостям $\psi_k(t)$, $\bar{\psi}_k(t)$. Подставляя их в определение (3.120), находим равенство $\rho_k(t) = \gamma^{-1}\psi_{0k}\bar{\psi}_{0k} \equiv \rho_k(0)$, означающее неизменность плотности границ при условии (3.121).

Прежде чем приступить к решению уравнений для бозевских составляющих η , ϕ (или η , φ), покажем, что система (3.118), (3.119) приводит к уравнению для запаздывающей функции Грина $G(\mathbf{r}, t) = \langle \eta(\mathbf{r}, t)\phi(\mathbf{0}, 0) \rangle$, где $t > 0$, угловые скобки означают усреднение по флуктуациям параметра порядка. Действительно, умножая (3.118) на $\phi(\mathbf{0}, 0)$, а (3.119), где произведена замена $t \rightarrow -t$, на $\eta(\mathbf{0}, 0)$ и используя свойство однородности пространства-времени, после сложения полученных результатов и усреднения находим в приближении среднего поля

$$\begin{aligned} \left\{ \gamma^{-1} \frac{\partial}{\partial t} + [A + 3BS_0(\mathbf{r})] - \beta\nabla^2 \right\} G(\mathbf{r}, t) = \\ = -\frac{1}{2} \delta(\mathbf{r})\delta(t) + 3B(\gamma\rho(\mathbf{r}) - G_0(t))S(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (3.123)$$

Здесь введен автокоррелятор конденсатной составляющей $S(\mathbf{r}, t) = \langle \eta(\mathbf{r}, t)\eta(\mathbf{0}, 0) \rangle$, а $G_0(\mathbf{r}) \equiv G(t=0, \mathbf{r})$ и $S_0(\mathbf{r}) \equiv S(t=0, \mathbf{r})$ представляют начальные значения. Характерная особенность полученного уравнения состоит в обусловленной нелинейностью перенормировке параметра Ландау A (которая, очевидно, приводит к увеличению температуры превращения), а также в появлении нелинейного источника, связанного с наличием межфазных границ и самодействием поля параметра порядка. Для определения функции отклика G из (3.123) требуется знать поведение автокоррелятора S , уравнение для которого

$$\left\{ \gamma^{-1} \frac{\partial}{\partial t} + [A + 3BS_0(\mathbf{r})] - \beta\nabla^2 \right\} S(\mathbf{r}, t) = -2 \frac{T}{\gamma} G(-t) \quad (3.124)$$

получается подобно (3.123) после умножения (3.118) на $\eta(\mathbf{0}, 0)$ и усреднения. Однако удобнее начать рассмотрение с анализа исходных полевых уравнений (3.116а), (3.116б).

В стационарном однородном состоянии пространственно-временная зависимость пропадает, что, очевидно, означает невозможность реализации флуктуаций. Следовательно, в уравнениях (3.116а)–(3.116г) необходимо положить $\dot{\eta} = 0$, $\phi = 0$, $\dot{\psi} = \bar{\psi} = 0$, $\nabla\Phi = 0$. В результате приходим к обычным условиям равновесия $\Phi = 0$ либо $V'(\eta) = 0$. Первое из них отвечает исходной неравновесной фазе, а второе определяет равновесное значение параметра порядка $\eta_{00}^2 = -A/B$ в упорядоченной фазе. Таким образом, в стационарном упорядоченном состоянии компоненты суперполя (3.113) принимают значения

$$\eta_{00}^2 = -\frac{A}{B}, \quad \psi_{00} = \bar{\psi}_{00} = 0, \quad \phi_{00} = 0, \quad \varphi = 0. \quad (3.125)$$

Отсюда видно, что если в неупорядоченной фазе все суперкомпоненты совершенно равноправны, то упорядочение приводит к спонтанному нарушению суперсимметрии, состоящему в выделении конденсатной составляющей $\eta_{00} \neq 0$. Выпадение конденсата η_{00} сопровождается появлением самосогласованного поля $h = \chi\eta_{00}$, где $\chi = |2A|^{-1}$ — восприимчивость, что в свою очередь обуславливает добавку $-h\eta$ к лагранжиану (3.114). В результате стационарное значение флуктуационной компоненты ϕ в уравнениях (3.116а)–(3.116г) приобретает среднее значение $\langle \phi \rangle = -\chi\eta_{00}/2T|A|$. Соответственно становится ненулевым суперсреднее

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

что и означает нарушение суперсимметрии [41].

Рассмотрим, как развивается процесс упорядочения однородной системы во времени. При этом удобно исходить из уравнений (3.116а), (3.116б), где, как показал анализ соотношений (3.116в), (3.116г), величина $\psi\bar{\psi} = \gamma\rho$ является постоянной. Подставляя флуктуационную компоненту ϕ из (3.116б) в (3.116а), находим первый интеграл

$$\begin{aligned} \tau^2 \dot{y}^2 = y^2 (1 - y^2)^2 + \left(E - \frac{\rho}{\rho_c} y^2 \right); \\ y \equiv \frac{\eta}{\eta_{00}}, \quad \tau^{-1} \equiv \gamma|A|, \quad \rho_c \equiv \frac{|A|\eta_{00}^2}{12T}, \end{aligned} \quad (3.126)$$

где E — постоянная интегрирования, играющая роль начала отсчета энергии. Полагая его нулевым, видим, что характер решения уравнения (3.126) определяется плотностью грассманова поля ρ . В его отсутствие ($\rho = 0$) имеем

$$\eta^2 = \eta_{00}^2 \left[1 + \exp \left(-\frac{t - t_0}{\tau} \right) \right]^{-1}, \quad (3.127)$$

где t_0 — постоянная интегрирования. Очевидно, это решение описывает спинодальный механизм упорядочения: в исходном состоянии ($t \ll t_0$) имеем $\eta_0 = 0$, а в конечном ($t \gg t_0$) параметр порядка принимает равновесное значение η_{00} . Основное изменение зависимости $\eta(t)$ происходит на интервале τ вблизи точки $t = t_0$. Это означает, что τ играет роль времени релаксации, а t_0 представляет момент реализации фазового превращения. Из (3.127) видно, что при $t \gg t_0$ параметр порядка стремится к равновесному значению с временем релаксации τ , в обратном случае ($t \ll t_0$) наблюдается экспоненциальное спадание к нулевому значению с временем релаксации $\tau/2$. Поскольку в первом случае система приходит в упорядоченное состояние, а во втором — в неупорядоченное, то этот факт отражает известный "закон двойки".

При положительных значениях плотности ρ грассманова поля из (3.126) получаем

$$\begin{aligned} \eta^2 = \eta_{00}^2 \left(1 - \frac{\rho}{\rho_c} \right) \left[1 + \sqrt{\frac{\rho}{\rho_c}} \cosh \left(\frac{t - t_0}{\tau_{\text{ef}}} \right) \right]^{-1}, \\ \tau_{\text{ef}} \equiv \frac{\tau}{2} \left(1 - \frac{\rho}{\rho_c} \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (3.128)$$

Найденная зависимость представляет инстантон, ширина которого τ_{ef} неограниченно возрастает, а

высота $\eta(t_0)$ спадает до нуля при увеличении плотности $\rho \leq \rho_c$. 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 . Согласно последнему равенству (3.126) именно их отношение определяет критическое значение плотности границ ρ_c . Физический смысл зависимостей (3.128) состоит в том, что при повышении плотности границ ρ до критического значения ρ_c стационарное значение параметра порядка в домене спадает до нуля, а время переориентации τ_{ef} неограниченно возрастает. При $\rho \geq \rho_c$ барьер между ямами пропадает и реализуется неупорядоченное состояние стекольного типа.

Рассмотрим теперь пространственную картину стационарного распределения упорядоченной фазы в отсутствии флуктуаций ($\phi = 0$). При этом условие (3.116б) приводит к дифференциальному уравнению, одномерное решение которого имеет обычный кинквый вид

$$\eta_0(x) = \pm \eta_{00} \tanh \frac{x - x_0}{\sqrt{2}\xi}, \quad \xi^2 \equiv \beta|A|^{-1}. \quad (3.129)$$

Очевидно, полученное решение описывает плоскую антифазную границу между доменами, отвечающими значениям параметра порядка $\pm \eta_{00}$. При этом корреляционная длина ξ определяет толщину границы, а постоянная интегрирования x_0 — ее положение.

В отличие от обычной теории развивающийся подход позволяет самосогласованным образом установить макроскопический масштаб $L \gg \xi$, отвечающий размеру домена упорядоченной фазы. С этой целью учтем наличие флуктуаций $\phi \neq 0$. Подставляя их выражение (3.116б) в стационарное уравнение (3.116а) с $\ddot{\eta} = 0$, для пространственного фурье-образа $y_{\mathbf{q}} = \eta_{\mathbf{k}}/\eta_{00}$ в зависимости от безразмерного волнового вектора $\mathbf{q} = \xi \mathbf{k}$ находим

$$y_{\mathbf{q}}^2 = \frac{2}{3} \left\{ (1 - \mathbf{q}^2) + \frac{1}{2} \left[(1 - \mathbf{q}^2)^2 + \frac{3\rho}{\rho_c} \right]^{1/2} \right\}, \quad (3.130)$$

где знак перед квадратным корнем выбран таким образом, чтобы обеспечить условие $y_{\mathbf{q}} = 1$ при $\mathbf{q} = 0$, $\rho = 0$. Полученная зависимость $y_{\mathbf{q}}^2$ монотонно спадает от значения $y_0^2 = (2/3)[1 + (1/2)(1 + 3\rho/\rho_c)^{1/2}]$, отвечающего длинноволновому пределу $\mathbf{q} = 0$, до значения $y_{\mathbf{q}} = 0$ при $q_0^2 = 1 + (\rho/\rho_c)^{1/2}$. Очевидно, последнее значение определяет толщину границы $d = \xi/q_0$, а волновое число q_1 , при котором значение параметра порядка отвечает равновесному $y_{\mathbf{q}}^2 = 1$, задает размер домена $L = \xi/q_1$. С учетом (3.130) зависимость масштабов d, L от плотности границ $\rho \leq \rho_c$ принимает вид

$$d = \xi \left(1 + \sqrt{\frac{\rho}{\rho_c}} \right)^{-1/2}, \quad L = \xi \left(\sqrt{1 + \frac{\rho}{\rho_c}} - 1 \right)^{-1/2}. \quad (3.131)$$

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

Выше описано основное состояние суперсимметричной системы, задаваемое конденсатной составляющей (3.129) и нулевыми значениями

$$\phi_0 = 0, \quad \psi_0 = 0, \quad \bar{\psi}_0 = 0 \quad (3.132)$$

остальных компонент суперполя Φ_0 . Преимущество суперсимметричного подхода состоит в том, что он позволяет свести решение термодинамической задачи учета флуктуаций $\delta\Phi = \Phi - \Phi_0$ к стандартной квантовомеханической задаче на собственные значения.

Приступая к ее рассмотрению, разложим с точностью до квадратичных слагаемых по $\delta\Phi$ лагранжиан (3.114). Тогда в уравнении движения (3.115) $V'(\Phi)$ заменяется на $V''(\Phi)\delta\Phi$, и уравнения для компонент принимают вид

$$(2T\gamma)^{-1}\ddot{\eta} + (-\beta\nabla^2 + A + 3B\eta_0^2)\phi = 0, \quad (3.133a)$$

$$\frac{2T}{\gamma}\phi + (-\beta\nabla^2 + A + 3B\eta_0^2)\eta = 0, \quad (3.133b)$$

$$\gamma^{-1}\dot{\psi} + (-\beta\nabla^2 + A + 3B\eta_0^2)\psi = 0, \quad (3.133c)$$

$$-\gamma^{-1}\dot{\bar{\psi}} + (-\beta\nabla^2 + A + 3B\eta_0^2)\bar{\psi} = 0. \quad (3.133d)$$

Подставляя (3.133б) в (3.133а), получаем уравнение второго порядка, факторизация которого приводит к паре уравнений первого порядка:

$$\pm\gamma^{-1}\dot{\eta} + (-\beta\nabla^2 + A + 3B\eta_0^2)\eta = 0. \quad (3.134)$$

Их вид полностью совпадает с видом уравнений (3.133в), (3.133г) для грассмановых полей. Таким образом, если в системе (3.116а)–(3.116г), отвечающей ненарушенной симметрии, поведение компонент совершенно различается, то ее нарушение снимает это различие.

Подставляя в уравнения (3.134) зависимость (3.129), легко придать им вид уравнения Шрёдингера с мнимым временем:

$$\mp(2\gamma)^{-1}\dot{\eta} = \hat{H}_{-}\eta;$$

$$\hat{H}_{\pm} = \frac{1}{2}(\hat{p}^2 + W^2 \pm W'),$$

$$\hat{p} = -i\beta^{1/2}\nabla, \quad W = (2B)^{1/2}\eta_0, \quad W' = \beta^{1/2}\frac{dW}{dx}. \quad (3.135)$$

Гамильтониан \hat{H}_{\pm} имеет вид, присущий суперсимметричной квантовой механике с суперпотенциалом

$$W(x) = (2|A|)^{1/2} \tanh \frac{x - x_0}{\sqrt{2}\xi}. \quad (3.136)$$

Известно [41], что суперсимметричная система обладает уровнем энергии $E_0 = 0$, если супер势 $W(x)$ имеет различный знак на пределах $x \rightarrow \pm\infty$. Именно такой случай реализует кинк (3.136), в связи с чем можно заключить, что в системе имеется гольстоуновская мода восстановления симметрии, отвечающая движению антифазной границы (изменению координаты x_0). Характерно, что уже при наличии одной пары "кинк-антикинк" супер势 $W(x)$ имеет одинаковые пределы при $x \rightarrow \pm\infty$ и перемещение границ может привести к изменению энергии системы. Это связано с преодолением барьера при коллапсе (зарождении) антифазного

домена. Высота барьера определяется первым ненулевым уровнем

$$E_1 = \frac{3}{2} |A| \quad (3.137)$$

гамильтониана \hat{H}_- . Распределения конденсатной составляющей поля, отвечающие уровням E_0 , E_1 , имеют вид [43]

$$\begin{aligned} \eta'_0(x) &= \pm \frac{\eta_{00}}{\sqrt{2}\xi} \cosh^{-2} \frac{x-x_0}{\sqrt{2}\xi}, \\ \eta_1(x) &\propto \sinh \frac{x-x_0}{\sqrt{2}\xi} \cosh^{-2} \frac{x-x_0}{\sqrt{2}\xi}. \end{aligned} \quad (3.138)$$

Первое из них отвечает неоднородности пространства, обусловленной наличием кинка (3.129), второе — процессом переориентации доменов. Энергия такой переориентации имеет вид (3.137), а характерная энергия неоднородности (ср. с (2.66))

$$\sigma \equiv \beta \int (\eta'_0(x))^2 dx = \frac{4}{3\sqrt{2}} |A| \eta_{00}^2 \xi \quad (3.139)$$

представляет коэффициент поверхностного натяжения границы.

4. Суперсимметрическая теория сильно неравновесной термодинамической системы

Принципиально важная особенность открытых термодинамических систем состоит в том, что нарастание шума (флуктуаций), происходящее при удалении от состояния равновесия, может приводить к образованию упорядоченных структур [29, 50]. В однородном случае такие структуры характеризуются амплитудой соответствующей гидродинамической моды, представляющей параметр порядка, значение которого определяет плотность бозе-конденсата. Однако в случае хорошо развитой (гетерофазной) пространственной структуры требуется учитывать также и наличие резких межфазных (антифазных) границ [20, 21]. Это означает, что кроме параметра порядка η следует ввести дополнительную степень свободы ψ , поведение которой, хотя и связано с полем $\eta(\mathbf{r}, t)$, но должно рассматриваться равноправным самосогласованным образом. Кроме того, поскольку исходной причиной перестройки является усиление флуктуаций ϕ , то теория, претендующая на полное представление неравновесной термодинамической системы, должна содержать также и поле флуктуаций $\phi(\mathbf{r}, t)$.

В настоящем разделе излагается суперсимметричная схема [51], позволяющая в духе идеи [25] представить указанные степени свободы как компоненты суперполя (3.13). Как выяснено в разделе 3.1, псевдобозовские компоненты η , ϕ представляют конденсатную и флуктуационную составляющие параметра порядка, тогда как взаимно сопряженные грассмановы компоненты $\bar{\psi}$, ψ , удовлетворяющие свойствам (3.5), — поведение границ. Правомерность такого предположения подтверждена в разделах 3.6, 3.7 тем, что в простейших случаях развиваемая суперсимметричная схема приводит к результатам обычной теории фазовых переходов. Однако, как будет показано ниже, она дает полное описание произвольной термодинамической системы, не достижимое в рамках других подходов.

4.1. Линейное приближение

Как видно из предыдущего, построение суперсимметрической схемы основано на уравнении Ланжевена (3.1), связывающем скорость изменения параметра порядка, термодинамическую силу и поле флуктуаций. Технически удобнее работать не с самим уравнением Ланжевена, а с отвечающим ему производящим функционалом (3.8), имеющим вид континуального интеграла по компонентам суперполя η , ϕ , $\bar{\psi}$, ψ от экспоненты действия системы. Его лагранжиан принимает канонический вид (3.14) в представлении суперполя (3.13).

В рамках обычной вариационной процедуры соответствующее уравнение движения свободного поля имеет вид $\hat{L}\Phi = 0$, где оператор \hat{L} представляется в размерных переменных следующим образом (ср. с (3.22)):

$$\hat{L} = \Theta^{-1} \{ (1 - \xi^2 \nabla^2) + \tau [\overline{D}, D] \}. \quad (4.1)$$

Здесь квадратные скобки означают коммутатор, Θ — степень возбуждения системы (в равновесных системах она сводится к температуре), ξ — корреляционная длина, учитывающая микроскопическую неоднородность, $\nabla = \partial/\partial r$, τ — затравочное время релаксации, \overline{D} , D — ковариантные суперпроизводные (генераторы группы суперсимметрии), имеющие вид (3.15) и удовлетворяющие свойствам (3.16). Отсюда видно, что операторы \overline{D} , D можно ассоциировать с квадратным корнем из временной производной. Физически это означает, что развивающаяся схема позволяет описывать не только экспоненциально быструю (дебаевскую) релаксацию, но и замедленные процессы типа структурной релаксации стекла [38].

Прежде чем перейти к построению количественной теории, укажем, что оператор (4.1) описывает только процессы диссипации, отвечающие исходному уравнению Ланжевена. Это выражается в том, что коммутатор $[\overline{D}, D]$ содержит только первую степень производной $\partial/\partial t$. Однако совершенно ясно, что с ростом степени возбуждения Θ система может приобрести реактивный характер поведения, который, как известно [16], связан со вторыми производными $\partial^2/\partial t^2$. Как видно из второго равенства (3.16), учет такого поведения обеспечивается добавлением в (4.1) слагаемого, пропорционального $[\overline{D}, D]^2$. В результате исходный оператор уравнения движения принимает вид

$$\hat{L} = \Theta^{-1} \{ (1 - \xi^2 \nabla^2) + \tau [\overline{D}, D] + \omega_0^{-2} [\overline{D}, D]^2 \}, \quad (4.2)$$

где ω_0 — собственная частота системы (частота мягкой моды).

Поскольку роль наблюдаемых величин играют структурный фактор $S(\mathbf{r}, t) = \langle \eta(\mathbf{r}, t)\eta(\mathbf{0}, 0) \rangle$ и обобщенная восприимчивость $G(\mathbf{r}, t) = \vartheta(t)\langle \eta(\mathbf{r}, t)\phi(\mathbf{0}, 0) \rangle$, то далее следует определить вид уравнения движения для суперкоррелятора

$$\hat{C}(\mathbf{r}, t) = \langle \Phi(\mathbf{r}, t)\Phi(\mathbf{0}, 0) \rangle. \quad (4.3)$$

Ниже показано, что такая конструкция содержит в качестве компонент обе экспериментально измеримые функции $S(\mathbf{r}, t)$, $G(\mathbf{r}, t)$. Для начала ограничимся исследованием только свободного поля, отвечающего оператору (4.2), а далее рассмотрим самосогласованную Φ^4 -теорию. Имея в виду это обстоятельство, обозначим свободный суперкоррелятор $\hat{C}^{(0)}$, а его компоненты $S^{(0)}$, $G^{(0)}$.

Согласно определению имеем

$$\widehat{L}\widehat{C}^{(0)} = \widehat{\delta}, \quad (4.4)$$

где суперсимметрическая δ -функция представляется в виде (3.24). Используя в (4.4) равенства (3.15), (3.16) и (4.2), после фурье-преобразования по пространственно-временным компонентам находим

$$\begin{aligned} C_{\omega\mathbf{k}}^{(0)}(\chi, \chi') &= \frac{\Theta}{D_{\omega\mathbf{k}}} \left[2\tau - i\tau\omega(\bar{\chi}'\chi - \bar{\chi}\chi') - \right. \\ &\quad \left. - R_{\omega\mathbf{k}}(\bar{\chi} - \bar{\chi}')(\chi - \chi') - \frac{\tau}{2}\omega^2\bar{\chi}\chi\bar{\chi}'\chi' \right]; \quad (4.5) \\ D_{\omega\mathbf{k}} &\equiv R_{\omega\mathbf{k}}^2 + \tau^2\omega^2, \quad R_{\omega\mathbf{k}} \equiv (1 + \xi^2\mathbf{k}^2) - \frac{\omega^2}{\omega_0^2}. \end{aligned}$$

Характерная особенность суперсимметрической структуры полученного выражения состоит в том, что все слагаемые группируются по степеням 0, 2, 4 суперкоординат. В связи с этим суперкоррелятор (4.3) удобно разложить по базисным суперматрицам

$$\begin{aligned} B_{\pm}(\chi, \chi') &= -\tau^{-1}(\bar{\chi}\chi \pm \bar{\chi}'\chi'), \\ T_{\pm}(\chi, \chi') &= 1 \pm \tau^{-2}\bar{\chi}\chi\bar{\chi}'\chi', \\ F_{\pm}(\chi, \chi') &= \tau^{-1}(\bar{\chi}'\chi \pm \bar{\chi}\chi'). \end{aligned} \quad (4.6)$$

Тогда выражение (4.5) представляется в виде

$$\begin{aligned} C_{\omega\mathbf{k}}^{(0)} &= \frac{\Theta\tau}{D_{\omega\mathbf{k}}} \left\{ R_{\omega\mathbf{k}}\widehat{B}_{+} + \left[1 - \left(\frac{\omega\tau}{2} \right)^2 \right] \widehat{T}_{+} + \right. \\ &\quad \left. + \left[1 + \left(\frac{\omega\tau}{2} \right)^2 \right] \widehat{T}_{-} + R_{\omega\mathbf{k}}\widehat{F}_{+} - i\tau\omega\widehat{F}_{-} \right\}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

где супероператоры \widehat{B}_{\pm} , \widehat{T}_{\pm} , \widehat{F}_{\pm} имеют матричные элементы, определенные равенствами (4.6). Отметим, что затравочный коррелятор (4.7) не обладает "проекцией" на компоненту \widehat{B}_{-} .

Исследуем теперь свойства операторов \widehat{B}_{\pm} , \widehat{T}_{\pm} , \widehat{F}_{\pm} . Определяя произведение матриц (4.6) равенством типа

$$A(\chi, \chi') = \tau^{-1} \int B(\chi, \chi'') C(\chi'', \chi') d\bar{\chi}'' d\chi'', \quad (4.8)$$

нетрудно видеть, что отвечающие им операторы \widehat{B}_{\pm} , \widehat{T}_{\pm} , \widehat{F}_{\pm} удовлетворяют следующим ниже правилам умножения (табл. 1). Если суперполе (3.13) представить в виде вектора суперпространства $\Phi = (\eta \ \phi \ \bar{\psi} \ \psi)$, то действие

Таблица 1. Правила умножения базисных суперматриц

	\widehat{B}_{+}	\widehat{B}_{-}	\widehat{T}_{+}	\widehat{T}_{-}	\widehat{F}_{+}	\widehat{F}_{-}
\widehat{B}_{+}	\widehat{B}_{+}	\widehat{B}_{-}	\widehat{T}_{+}	\widehat{T}_{-}	0	0
\widehat{B}_{-}	\widehat{B}_{-}	\widehat{B}_{+}	$-\widehat{T}_{-}$	$-\widehat{T}_{+}$	0	0
\widehat{T}_{+}	\widehat{T}_{+}	\widehat{T}_{-}	\widehat{B}_{+}	\widehat{B}_{-}	0	0
\widehat{T}_{-}	\widehat{T}_{-}	\widehat{T}_{+}	$-\widehat{B}_{-}$	$-\widehat{B}_{+}$	0	0
\widehat{F}_{+}	0	0	0	0	\widehat{F}_{+}	\widehat{F}_{-}
\widehat{F}_{-}	0	0	0	0	\widehat{F}_{-}	\widehat{F}_{+}

базисных операторов определяется формулами

$$\begin{aligned} \widehat{B}_{+}\Phi &= \tau^{-1}(\eta \ \phi \ 0 \ 0), & \widehat{B}_{-}\Phi &= \tau^{-1}(-\eta \ \phi \ 0 \ 0); \\ \widehat{T}_{+}\Phi &= (-\phi \ -\tau^{-2}\eta \ 0 \ 0), & \widehat{T}_{-}\Phi &= (-\phi \ \tau^{-2}\eta \ 0 \ 0); \\ \widehat{F}_{+}\Phi &= \tau^{-1}(0 \ 0 \ \bar{\psi} \ \psi), & \widehat{F}_{-}\Phi &= \tau^{-1}(0 \ 0 \ -\bar{\psi} \ \psi). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Отсюда легко видеть, что базисные операторы могут быть записаны в виде матриц

$$\begin{aligned} \widehat{B}_{\pm} &= \tau^{-1} \begin{pmatrix} \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \widehat{T}_{\pm} &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ \mp\tau^{-2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \widehat{F}_{\pm} &= \tau^{-1} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Удобство представления (4.7) состоит в том, что по базисным матрицам (4.6) может быть разложен суперкоррелятор не только для свободного поля, но и в произвольном случае. Это связано с тем обстоятельством, что операторы \widehat{B}_{\pm} , \widehat{T}_{\pm} , \widehat{F}_{\pm} образуют полный базис: согласно таблице умножения произведение любой пары операторов выражается через них самих. Характерно, что квадраты бозевских операторов \widehat{B}_{\pm} , \widehat{T}_{\pm} сводятся к единичному бозевскому оператору \widehat{B}_{+} , тогда как квадраты фермиевских \widehat{F}_{\pm} дают единичный фермиевский \widehat{F}_{+} . С другой стороны, бозевская природа операторов \widehat{B}_{\pm} , \widehat{T}_{\pm} и фермиевская \widehat{F}_{\pm} выражаются в том, что произведения операторов разных групп сводятся к нулю. Разложение по суперкорреляторам типа (4.7) применялось впервые, по-видимому, в работе [27]. Однако там исследовался чисто диссипативный режим поведения спинового стекла, в связи с чем шестимерный базис редуцировался в трехмерный: $\widehat{E} = \widehat{B}_{+} + \widehat{F}_{+}$, $\widehat{P} = \widehat{B}_{-} + \widehat{F}_{-}$, $\widehat{A} = (1/2)(\widehat{T}_{+} + \widehat{T}_{-})$. Учет реактивного поведения в нашем случае приводит к тому, что три "диссипативных" оператора \widehat{E} , \widehat{P} , \widehat{A} расщепляются в шесть независимых \widehat{B}_{\pm} , \widehat{T}_{\pm} , \widehat{F}_{\pm} [51].

Для нахождения явных выражений экспериментально измеряемых корреляторов подставим в определение (4.3) координатное представление суперполя (3.13). Тогда с учетом (4.6) находим

$$\begin{aligned} \widehat{C}_{\omega\mathbf{k}}^{(0)} &= -\frac{\tau}{2}(\langle \eta_{\omega\mathbf{k}}\phi_{-\omega-\mathbf{k}} \rangle + \langle \phi_{\omega\mathbf{k}}\eta_{-\omega-\mathbf{k}} \rangle)\widehat{B}_{+} + \\ &\quad + \frac{\tau}{2}(\langle \eta_{\omega\mathbf{k}}\phi_{-\omega-\mathbf{k}} \rangle - \langle \phi_{\omega\mathbf{k}}\eta_{-\omega-\mathbf{k}} \rangle)\widehat{B}_{-} + \\ &\quad + \frac{1}{2}(\langle \eta_{\omega\mathbf{k}}\eta_{-\omega-\mathbf{k}} \rangle + \tau^2\langle \phi_{\omega\mathbf{k}}\phi_{-\omega-\mathbf{k}} \rangle)\widehat{T}_{+} + \\ &\quad + \frac{1}{2}(\langle \eta_{\omega\mathbf{k}}\eta_{-\omega-\mathbf{k}} \rangle - \tau^2\langle \phi_{\omega\mathbf{k}}\phi_{-\omega-\mathbf{k}} \rangle)\widehat{T}_{-} + \\ &\quad + \frac{\tau}{2}(\langle \psi_{\omega\mathbf{k}}\bar{\psi}_{-\omega-\mathbf{k}} \rangle - \langle \bar{\psi}_{\omega\mathbf{k}}\psi_{-\omega-\mathbf{k}} \rangle)\widehat{F}_{+} - \\ &\quad - \frac{\tau}{2}(\langle \psi_{\omega\mathbf{k}}\bar{\psi}_{-\omega-\mathbf{k}} \rangle + \langle \bar{\psi}_{\omega\mathbf{k}}\psi_{-\omega-\mathbf{k}} \rangle)\widehat{F}_{-}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Сравнивая множители при одинаковых базисных операторах в (4.7) и (4.11), для корреляторов

$$\begin{aligned} S_{\omega k} &= \langle \eta_{\omega k} \eta_{-\omega -k} \rangle, & \tilde{S}_{\omega k} &= \tau^2 \langle \phi_{\omega k} \phi_{-\omega -k} \rangle; \\ \chi'_{\omega k} &= \langle \eta_{\omega k} \phi_{-\omega -k} \rangle = \langle \phi_{\omega k} \eta_{-\omega -k} \rangle; \\ G_{\omega k}^- &= \langle \psi_{\omega k} \bar{\psi}_{-\omega -k} \rangle, & G_{\omega k}^+ &= \langle \bar{\psi}_{\omega k} \psi_{-\omega -k} \rangle \end{aligned} \quad (4.12)$$

находим выражения

$$\begin{aligned} S_{\omega k}^{(0)} &= 2 \frac{\Theta \tau}{D_{\omega k}}, & \tilde{S}_{\omega k}^{(0)} &= -\frac{1}{2} \frac{\Theta \tau}{D_{\omega k}} (\tau \omega)^2; \\ \chi'_{\omega k}^{(0)} &= \frac{1}{2} \left(G_{\omega k}^{(0)+} - G_{\omega k}^{(0)-} \right), & G_{\omega k}^{(0)\pm} &= \mp \frac{\Theta}{R_{\omega k} \pm i\tau\omega}, \end{aligned} \quad (4.13)$$

где индекс ⁽⁰⁾ указывает, что полученные выражения относятся к свободному полю.

Сравнивая формулы (4.13) с результатами стандартной теории фазовых переходов (см., например, [16]), нетрудно видеть, что первая сводится к обычному выражению для структурного фактора в гауссовом приближении. На первый взгляд представляется неожиданным то обстоятельство, что флюктуационно-диссилиционная теорема $S_{\omega k} = (2/\omega) \operatorname{Im} G_{\omega k}^-$ 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 $\langle \eta_{\omega k} \varphi_{-\omega -k} \rangle$ параметра порядка η на поле духов φ . Легко видеть, однако, что (по крайней мере) в рамках используемого приближения фермиевский автокоррелятор и функция отклика тождественно совпадают:

$$G_{\omega k}^- = \langle \eta_{\omega k} \varphi_{-\omega -k} \rangle. \quad (4.14)$$

Действительно, учитывая связь $\varphi = \phi - \dot{\eta}/2$ между полем духов φ и флюктуационной компонентой суперполя ϕ , из равенств (4.12), (4.13) получаем (4.14).

Полученный результат об эквивалентности автокоррелятора фермиевской компоненты суперполя и функции отклика конденсатной составляющей параметра порядка на действие флюктуационной компоненты (обе они носят бозевский характер) представляется основным в этом разделе.

Обсудим наконец вид (4.13) флюктуационного коррелятора $\tilde{S}_{\omega k}^{(0)}$. Если мнимая часть восприимчивости $\chi_{\omega k}^{\eta(0)}$ пропорциональна в гидродинамическом пределе $\omega, k \rightarrow 0$ лишь первой степени частоты, то $\tilde{S}_{\omega k}^{(0)} \propto \omega^2$ имеет вторую степень малости. Именно этим обстоятельством оправдывается тот факт, что в гидродинамическом приближении обычно допускается отсутствие корреляции флюктуаций.

4.2. Суперсимметричная диаграммная техника

Φ^4 -модели

Для построения суперсимметричной теории удобно воспользоваться стандартным полевым методом [48] производящего функционала (ср. с (3.8))

$$Z\{U(z)\} = \int \exp \left\{ \int U(z) \Phi(z) dz - \Theta^{-1} (S_0 + S') \right\} D\Phi(z). \quad (4.15)$$

Здесь Φ — суперполе (3.13), $D\Phi(z)$ означает континуальное интегрирование по четырем его компонентам, z —

набор аргументов из координаты \mathbf{r} , времени t и суперкоординаты χ , $U(z)$ — вспомогательное поле, $S_0 = S_0\{\Phi(z)\}$ — функционал действия свободного поля, слагаемое

$$S' = \frac{v}{4} \int \Phi^4(z) dz \quad (4.16)$$

представляет вклад, связанный с ангармонизмом $v(\mathbf{r}) = \text{const} \equiv v$, Θ — степень возбуждения, сводящаяся в равновесной системе к температуре (см. разделы 3.1, 3.2). В случае $U(z) = 0$ из (4.15) имеем нормировку $Z = 1$, а двукратное варьирование по вспомогательному полю $U(z)$ дает суперкоррелятор (4.3) (см. (3.19)).

Переходя к построению теории возмущений, проведем формальное разложение выражения (4.15) по степеням $-S'/\Theta$. В результате суперкоррелятор (4.3) записывается в виде суммы

$$C(z, z') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-v}{4\Theta} \right)^n \left\langle \Phi(z) \left(\int \Phi^4(z_1) dz_1 \right)^n \Phi(z') \right\rangle_0, \quad (4.17)$$

где усреднение

$$\langle \dots \rangle_0 \equiv \int \dots \exp \left\{ -\Theta^{-1} S_0 + \int U \Phi dz \right\} D\Phi \quad (4.18)$$

производится только по свободному полю. Поскольку интеграл (4.18) имеет гауссов характер, то в условиях ненарушенной суперсимметрии $\langle \Phi(z) \rangle_0 = 0$ и можно использовать теорему Вика:

$$\begin{aligned} \langle \Phi(z_1) \dots \Phi(z_n) \rangle_0 &= \\ &= \begin{cases} 0, & \text{если } n \text{ нечетно,} \\ \sum \langle \Phi(z_{p_1}) \Phi(z_{p_2}) \rangle_0 \dots \langle \Phi(z_{p_{n-1}}) \Phi(z_{p_n}) \rangle_0, & \text{если } n \text{ четно,} \end{cases} \end{aligned} \quad (4.19)$$

где суммирование проводится по всем возможным спариваниям сомножителей. Как и в обычном случае [36], использование теоремы Вика (4.19) позволяет представить суперкоррелятор (4.17) в виде разложения по степеням свободных суперкорреляторов $C^{(0)}(z, z') = \langle \Phi(z) \Phi(z') \rangle_0$. Дальнейшая задача состоит в определении коэффициентов такого разложения.

С этой целью сопоставим, как обычно, свободному суперкоррелятору $\hat{C}^{(0)}$ тонкую линию, полному \hat{C} — толстую, а ангармонизму $(-v/4\Theta)$ — точку. Как и в обычной диаграммной технике [36], считаем, что по внутренним переменным z_1, z_2, \dots, z_n производится интегрирование (внешние z, z' фиксированы). Кроме того, подобно обычному случаю, легко показать, что несвязанные диаграммы приводят к множителю $Z\{0\} = 1$, и, следовательно, их можно не учитывать. Собственно энергетическая часть $\hat{\Sigma}$, входящая в уравнение Дайсона $\hat{C}^{-1} = \hat{C}^{(0)-1} - \hat{\Sigma}$, имеет в двух первых порядках теории возмущений вид, представленный на рис. 14, где учтено, что в выражении $\hat{C}^{(0)} \hat{\Sigma} \hat{C}^{(0)}$ каждая точка должна иметь четыре хвоста. Записывая явным

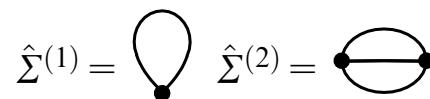


Рис. 14. Вклады в собственно энергетическую часть

образом выражения для коррелятора в первом порядке

$$C^{(1)}(z, z') = s_1 \left(-\frac{v}{4\Theta} \right) \int \langle \Phi(z) \Phi^4(z_1) \Phi(z') \rangle_0 dz_1, \quad (4.20)$$

видим, что первый сомножитель $\Phi(z)$ можно спарить четырьмя возможными способами с $\Phi^4(z_1)$. При этом для последнего сомножителя $\Phi(z')$ остаются три другие спаривания. В итоге коэффициент $s_1 = 4 \cdot 3/1! = 12$. Соответственно во втором порядке имеем

$$C^{(2)}(z, z') = s_2 \left(-\frac{v}{4\Theta} \right)^2 \int \int \langle \Phi(z) \Phi^4(z_1) \Phi^4(z_2) \Phi(z') \rangle_0 dz_1 dz_2. \quad (4.21)$$

Как видно из соответствующей диаграммы на рис. 14, здесь сомножители $\Phi(z)$, $\Phi(z')$ могут спариваться с сомножителями $\Phi^4(z_1)$, $\Phi^4(z_2)$ только от различных аргументов. Следовательно, число спариваний для первого из них равно 8, а для второго — 4. Кроме того, в оставшемся произведении $\Phi^3(z_1) \Phi^3(z_2)$ можно провести $3 \cdot 2 = 6$ дополнительных спариваний. В результате получаем $s_2 = (8 \cdot 4) \cdot (3 \cdot 2)/2! = 96$.

Таким образом, использование теоремы Вика (4.19) и уравнения Дайсона дает для вкладов, представленных на рис. 14, следующие выражения:

$$\begin{aligned} \Sigma^{(1)}(z, z') &= -3 \frac{v}{\Theta} C^{(0)}(z, z') \delta(z - z'), \\ \Sigma^{(2)}(z, z') &= 6 \left(\frac{v}{\Theta} \right)^2 (C^{(0)}(z, z'))^3. \end{aligned} \quad (4.22)$$

До настоящего момента наше рассмотрение не отличалось от стандартного [36], поскольку не раскрывалась суперсимметрическая структура корреляторов, и полученные формулы (4.22) имеют общий вид. Для нахождения явных выражений наблюдаемых корреляторов проведем разложение суперкорреляторов типа (4.11) по базисным матрицам суперпространства \widehat{B}_{\pm} , \widehat{T}_{\pm} , \widehat{F}_{\pm} (см. (4.6)). Для затравочного коррелятора $\widehat{C}^{(0)}$ оно имеет вид (4.7). Полный коррелятор представляется разложением

$$\widehat{C} = g_0 \widehat{B}_+ + g_1 \widehat{B}_- + S_0 \widehat{T}_+ + S_1 \widehat{T}_- + G_0 \widehat{F}_+ + G_1 \widehat{F}_-, \quad (4.23)$$

где для краткости опущены индексы частоты ω и волнового вектора \mathbf{k} . Как следует из анализа вида затравочного коррелятора (4.11), компоненты $g_{0,1}$ имеют смысл действительной и мнимой составляющих восприимчивости, $S_0 \pm S_1$ — автокорреляторы конденсатной и флюктуационной составляющих параметра порядка, $G_0 \pm G_1$ — опережающая и запаздывающая функции Грина фермиевской составляющей суперполя.

Для определения явного вида собственно энергетической части (4.22) подставим туда разложение (4.23) и учтем, что суперсимметричная δ -функция имеет вид (3.24) (при этом во избежание сверток по частоте и волновому вектору удобно вернуться к пространственно-временному представлению). Тогда с учетом определений (4.6) получаем

$$\begin{aligned} \widehat{\Sigma}^{(1)} &= -3 \frac{v}{\Theta} [(S_0 + S_1) \widehat{B}_+ + (g_0 - G_0) \widehat{T}_+ - \\ &- (g_0 - G_0) \widehat{T}_- + (S_0 + S_1) \widehat{F}_+] \delta(\mathbf{r}) \delta(t). \end{aligned} \quad (4.24)$$

Отметим, что, как и в затравочном корреляторе (4.7), здесь отсутствует бозевская составляющая \widehat{B}_- . Кроме того, выпадает также и фермиевская компонента \widehat{F}_- . Обе они появляются во втором порядке теории возмущений:

$$\begin{aligned} \widehat{\Sigma}^{(2)} &= 6 \left(\frac{v}{\Theta} \right)^2 \{ 3g_0(S_0 + S_1)^2 \widehat{B}_+ + 3g_1(S_0 + S_1)^2 \widehat{B}_- + \\ &+ \frac{1}{2}(S_0 + S_1)[(S_0 + S_1)^2 - 6(G_0^2 - G_1^2) + \\ &+ 3(S_0^2 - S_1^2) + 6(g_0^2 - g_1^2)] \widehat{T}_+ + \\ &+ \frac{1}{2}(S_0 + S_1)[(S_0 + S_1)^2 + 6(G_0^2 - G_1^2) - \\ &- 3(S_0^2 - S_1^2) - 6(g_0^2 - g_1^2)] \widehat{T}_- + \\ &+ 3G_0(S_0 + S_1)^2 \widehat{F}_+ + 3G_1(S_0 + S_1)^2 \widehat{F}_- \}. \end{aligned} \quad (4.25)$$

После подстановки в суперсимметричное уравнение Дайсона (3.35) полученные формулы дают самосогласованное описание произвольной термодинамической системы в рамках Φ^4 -модели. В явном виде уравнение (3.35) сводится к шести уравнениям, фигурирующим перед базисными матрицами. Для нахождения этих уравнений следует провести разложение типа (4.23) для суперсимметричной собственно энергетической части:

$$\widehat{\Sigma} = \sigma_0 \widehat{B}_+ + \sigma_1 \widehat{B}_- + E_0 \widehat{T}_+ + E_1 \widehat{T}_- + \Sigma_0 \widehat{F}_+ + \Sigma_1 \widehat{F}_-. \quad (4.26)$$

Используя равенства (4.24), (4.25), легко найти, что компоненты данного разложения имеют вид

$$\begin{aligned} \sigma_{\pm}(\mathbf{r}, t) &= -3 \frac{v}{\Theta} S_{\pm}(t=0) \delta(\mathbf{r}) \delta(t) + 18 \frac{v^2}{\Theta^2} S_{\pm}^2(\mathbf{r}, t) g_{\pm}(\mathbf{r}, t); \\ \Sigma_{\pm}(\mathbf{r}, t) &= -3 \frac{v}{\Theta} S_{\pm}(t=0) \delta(\mathbf{r}) \delta(t) + 18 \frac{v^2}{\Theta^2} S_{\pm}^2(\mathbf{r}, t) G_{\pm}(\mathbf{r}, t); \\ E_{\pm}(\mathbf{r}, t) &= 6 \frac{v^2}{\Theta^2} S_{\pm}^3(\mathbf{r}, t); \\ E_{-}(\mathbf{r}, t) &= -3 \frac{v}{\Theta} (g_0(\mathbf{r}, t) - G_0(\mathbf{r}, t)) \delta(\mathbf{r}) \delta(t) + \\ &+ 18 \frac{v^2}{\Theta^2} S_{-}(\mathbf{r}, t) [3g_{+}(\mathbf{r}, t) g_{-}(\mathbf{r}, t) + S_{+}(\mathbf{r}, t) S_{-}(\mathbf{r}, t) - \\ &- 3G_{+}(\mathbf{r}, t) G_{-}(\mathbf{r}, t)]. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Здесь величины с индексами \pm и 0, 1 связаны равенствами типа $\Sigma_{0,1} = (1/2)(\Sigma_{+} \pm \Sigma_{-})$. Равенства (4.27) записаны для системы, обладающей как диссипативным, так и реактивным режимами поведения. В частном случае чисто диссипативных систем они были впервые найдены в работе [27].

4.3. Самосогласованная Φ^4 -теория

Для построения самосогласованной схемы воспользуемся расцеплением (3.34). Тогда уравнение Дайсона принимает вид (3.35), где слагаемое $\widehat{D} = \widehat{C}^{(0)-1} - \widehat{\Sigma}$ представляется в виде следующего разложения (ср. с (3.37), (4.23)):

$$\widehat{D} = d_0 \widehat{B}_+ + d_1 \widehat{B}_- + A_0 \widehat{T}_+ + A_1 \widehat{T}_- + D_0 \widehat{F}_+ + D_1 \widehat{F}_-. \quad (4.28)$$

Здесь коэффициенты $d_{0,1}$, $A_{0,1}$, $D_{0,1}$ определены в рамках суперсимметричной диаграммной техники (см. раздел 4.2), которая отличается от обычной наличием нескольких типов пропагаторов и, как следствие, подсчетом коэффициентов перед соответствующими диаграммами. Используя (4.7), находим

$$\begin{aligned} d_{0,1} &= \frac{1}{2}(d_+ \pm d_-), \quad A_{0,1} = \frac{1}{2}(A_+ \pm A_-), \\ D_{0,1} &= \frac{1}{2}(D_+ \pm D_-); \\ d_\pm &= \frac{1}{\Theta\tau} \left[(1 + \xi^2 \mathbf{k}^2) - \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 \right] - \sigma_\pm; \\ A_+ &= -\frac{2}{\Theta\tau} - E_+, \quad A_- = \frac{\omega^2\tau}{2\Theta} - E_-; \\ D_\pm &= \frac{1}{\Theta\tau} \left\{ \left[(1 + \xi^2 \mathbf{k}^2) - \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 \right] \mp i\omega\tau \right\} - \Sigma_\pm, \end{aligned} \quad (4.29)$$

где σ_\pm , E_\pm , Σ_\pm определены равенствами (4.27).

Во всех предыдущих формулах фигурирует пространственно-временная зависимость. Для решения суперсимметричного уравнения Дайсона удобно перейти к соответствующим фурье-компонентам. Тогда подстановка разложений (4.23), (4.28) в уравнение (3.35) приводит к системе

$$d_0g_0 + d_1g_1 + A_0S_0 - A_1S_1 - \frac{2w}{\Theta^2}(g_0^2 + g_1^2 + S_0^2 - S_1^2) = 1,$$

$$d_0g_1 + A_0S_1 - A_1S_0 + d_1g_0 - \frac{4w}{\Theta^2}g_0g_1 = 0,$$

$$d_0S_0 - d_1S_1 + A_0g_0 + A_1g_1 - \frac{4w}{\Theta^2}g_0S_0 = 0,$$

$$d_0S_1 - d_1S_0 + A_0g_1 + A_1g_0 - \frac{4w}{\Theta^2}g_0S_1 = 0, \quad (4.30a)$$

$$D_0G_0 + D_1G_1 - \frac{2w}{\Theta^2}(G_0^2 + G_1^2) = 1,$$

$$D_0G_1 + D_1G_0 - \frac{4w}{\Theta^2}G_0G_1 = 0. \quad (4.30b)$$

Характерно, что уравнения для бозевских $g_{0,1}$, $S_{0,1}$ и фермиевских $G_{0,1}$ корреляторов не зацепляются между собой. Наиболее простым представляется определение вида фермиевских компонент

$$\begin{aligned} G_\pm^{-1} - D_\pm + \frac{2w}{\Theta^2}G_\pm &= 0; \\ G_0 &= \frac{D_0G_+G_-}{1 + (2w/\Theta^2)G_+G_-}, \quad G_1 = -\frac{D_1G_+G_-}{1 - (2w/\Theta^2)G_+G_-}. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Соответственно для бозевских компонент имеем

$$\begin{aligned} g_\pm^{-1} - d_\pm + \frac{2w}{\Theta^2}g_\pm &= \\ &= \frac{A_+A_-}{(4w/\Theta^2)g_0 - d_\mp} \left(1 - \frac{(2w/\Theta^2)g_\mp}{(4w/\Theta^2)g_0 - d_\pm} \right); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g_0 &= \frac{d_0\mathcal{G}^2}{1 + (2w/\Theta^2)\mathcal{G}^2}, \quad g_1 = -\frac{d_1\mathcal{G}^2}{1 - (2w/\Theta^2)\mathcal{G}^2}, \\ S_\pm &= \frac{A_\pm g_\pm}{(4w/\Theta^2)g_0 - d_\mp}; \\ \mathcal{G}^2 &\equiv g_+g_- \left\{ 1 - \frac{A_+A_-}{[(4w/\Theta^2)g_0 - d_+] [(4w/\Theta^2)g_0 - d_-]} \right\}. \end{aligned} \quad (4.32)$$

В общем случае анализ полученных уравнений (4.31), (4.32), полностью описывающих произвольную термодинамическую систему, представляет весьма трудную задачу. Это связано с тем, что в рамках развитой схемы учитываются как диссипативный, так и реактивный режимы поведения. При слабой неравновесности системы, например в стеклах, достаточно учесть только диссиацию. Формально это означает $A_- = 0$, и система (4.31), (4.32) сводится к исследованной в работе [27] (см. разделы 3.2, 3.3). Оказывается, что сильная неравновесность приводит к потере эргодичности, характеризуемой ненулевой разностью между значениями адиабатической и изотермической восприимчивостей, и появлению памяти, означающей, что структурный фактор $S_+(t)$ приобретает ненулевые значения в пределе $t \rightarrow \infty$. Из последней формулы (4.31) легко видеть, что точка потери эргодичности определяется условием расходимости фермиевского коррелятора (ср. с (3.39))

$$\frac{2w}{\Theta^2}G_+G_- = 1. \quad (4.33)$$

Характерно, что самосогласованное описание эффектов неэргодичности и памяти может быть достигнуто только во втором порядке теории возмущений по ангармонизму v [27]. Это связано с тем, что собственно энергетическая часть (4.24), определенная в первом порядке теории возмущений, не содержит компонент вдоль "направлений" \hat{B}_- , \hat{F}_- . Кроме того, поведение диссипативной системы определяется не каждым из базисных операторов \hat{T}_+ , \hat{T}_- по отдельности, а их суммой [27]. Поскольку в (4.24) соответствующие коэффициенты перед \hat{T}_+ , \hat{T}_- имеют противоположный знак, то их сумма также пропадает. Таким образом, ненулевые составляющие вдоль "направлений" \hat{B}_- , \hat{F}_- , $\hat{T}_+ + \hat{T}_-$, ответственных за память и неэргодичность, появляются только во втором порядке (см. (4.25)).

Оставляя в стороне полный анализ сильно неравновесной неэргодической системы с памятью, рассмотрим более простой случай соотношения между реактивной и диссипативной составляющими в первом порядке теории возмущений. Кроме того, пренебрежем межатомным взаимодействием ($w = 0$). Тогда система (4.32) принимает вид

$$g_\pm = \frac{d_\pm}{d_+d_- - A_+A_-}, \quad S_\pm = -\frac{A_\pm}{d_+d_- - A_+A_-}. \quad (4.34)$$

С учетом (4.29) условие расходимости найденных корреляторов приводит к закону дисперсии

$$\omega = i \frac{\omega_0^2\tau}{\Theta} \pm \omega_0 \left[\left(1 + 12 \frac{v}{\Theta} S \right) - \left(\frac{\omega_0\tau}{2\Theta} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (4.35)$$

где $S = S_+(t = 0)$ — среднеквадратическое значение параметра порядка. При малых степенях неравновесности Θ спектр (4.35) имеет чисто диссипативный характер, и поведение системы не отличается от описанного в [27]. Однако при степенях возбуждения Θ , превышающих критическое значение

$$\Theta_c = -6vS + \left[3vS + \left(\frac{\omega_0\tau}{2} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (4.36)$$

частота (4.35) приобретает действительную составляющую, которая в условиях $\Theta \gg \Theta_c$ намного превосходит мнимую часть. Это означает, что предельно возбужденные системы могут находиться в стационарном состоянии, где гидродинамическая мода, отвечающая параметру порядка, представляет автоколебательное движение. Наиболее ярким примером такого поведения является, очевидно, реакция Белоусова–Жаботинского [29]. Согласно (4.36) системы, в которых может быть реализовано автоколебательное стационарное состояние, должны обладать ангармонизмом, превышающим критическое значение

$$v_c = \frac{1}{24S} \left[1 + \sqrt{1 + (2\omega_0\tau)^2} \right]. \quad (4.37)$$

Как и следовало ожидать, его значение тем меньше, чем больше среднеквадратическое значение параметра порядка S и чем меньше значения частоты мягкой моды ω_0 и времени релаксации τ . Столь жесткие ограничения объясняют причину, по которой системы с поведением типа реакции Белоусова–Жаботинского наблюдаются достаточно редко.

5. Заключение

Проведенный анализ поведения пространственно-временной структуры неравновесной системы показывает, что единая картина ее эволюции достигается в рамках самосогласованного представления конденсатной и флюктуационной составляющих параметра порядка и плотности межфазных границ как компонент единого суперполя. При этом бозеевские компоненты отвечают составляющим параметра порядка, а фермиевские — плотности антифазных границ.

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

Использование суперсимметричного подхода позволяет представить гидродинамическую моду упорядочения и ее пространственную 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 представляют стандартную картину упорядочения, а характеристики макроуровня — крупномасштабную (доменную или

гетерофазную) структуру упорядоченной фазы и ее замедленную эволюцию.

Суперсимметричная теория позволяет представить самосогласованным образом поведение гомогенных и гетерофазных флюктуаций. При этом в выражении для термодинамического потенциала пропадают нефизические расходимости, а скачок теплоемкости возрастает.

Совместное рассмотрение реактивного и диссипативного режимов поведения сильно неравновесной термодинамической системы требует расширения базиса операторного пространства от трех до шести суперматриц, по которым проводится разложение произвольного суперкоррелятора. Коэффициенты такого разложения дают структурный фактор и восприимчивости конденсатной и флюктуационной компонент параметра порядка, а также плотности распределения антифазных границ.

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 значение этого параметра превышает пороговое, обратно пропорциональное среднеквадратической флюктуации параметра порядка.

Выражаем благодарность В.Г. Барьяттару за поддержку работы и Е.А. Торопову за сотрудничество в ее оригинальной части. Мы признательны также Ю.В. Головачу за обсуждения и указание на эксперимент D. Beysens, Y. Jayalakshmi.

Список литературы

1. Cahn J W, Hilliard J E *J. Chem. Phys.* **28** 258 (1958)
2. Cahn J W, Hilliard J E *J. Chem. Phys.* **31** 668 (1959)
3. Cahn J W *J. Chem. Phys.* **42** 93 (1965)
4. Allen S M, Cahn J W *Acta Metall.* **27** 1085 (1979)
5. Лифшиц И М *ЖЭТФ* **42** 1354 (1962)
6. Cook H E *Acta Metall.* **18** 297 (1970)
7. Langer J S *Ann. Phys.* **65** 53 (1971)
8. Langer J S, Bar-on M, Miller H D *Phys. Rev. A* **11** 1417 (1975)
9. Митлин В С *ЖЭТФ* **95** 1826 (1989)
10. Chen Z Y *Phys. Rev. B* **40** 4656 (1989)
11. Bray A J *Phys. Rev. Lett.* **62** 2841 (1989)
12. Лифшиц И М, Слезов В В *ЖЭТФ* **35** 479 (1958)
13. Михайлова Ю В, Максимов Л А *ЖЭТФ* **59** 1367 (1970)
14. Максимов Л А, Рязанов А И *ЖЭТФ* **79** 2311 (1980)
15. Cook H E *Acta Metall.* **23** 1027 (1975)
16. Кацнельсон А А, Олемской А И *Микроскопическая теория неоднородных структур* (М.: Изд-во МГУ, 1987)
17. Klein W, Batrouni G *Phys. Rev. Lett.* **67** 1278 (1991)
18. Mazenko G F, Valls O T, Zannetti M *Phys. Rev. B* **38** 520 (1988)
19. Mazenko G F *Phys. Rev. Lett.* **63** 1605 (1989)
20. Mazenko G F *Phys. Rev. B* **42** 4487 (1990)
21. Mazenko G F *Phys. Rev. B* **43** 5747 (1991)
22. Roger T M, Elder K R, Desai C *Phys. Rev. B* **37** 9638 (1988)
23. Mazenko G F, Valls O T, Zannetti M *Phys. Rev. B* **40** 379 (1989)
24. Олемской А И, Торопов Е А, Склар И А *ЖЭТФ* **100** 987 (1991)
25. Parisi G, Sourlas N *Phys. Rev. Lett.* **43** 744 (1979)
26. Фейгельман М В, Цвелик А М *ЖЭТФ* **83** 1430 (1982)
27. Гинзбург С Л *ЖЭТФ* **85** 2171 (1983)
28. Олемской А И, Коплык И В, Торопов Е А, Склар И А, Флат А Я *Изв. вузов. Физика* (1) 90 (1993)
29. Хорстхемке В, Лефевр Р *Индукционные шумом переходы* (М.: Мир, 1987)
30. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Статистическая физика* Ч. 1 (М.: Наука, 1976)

31. Amit D J, Zannetti M *J. Stat. Phys.* **7** 31 (1973)
32. Porod G, in *Small Angle X-Ray Scattering* (Eds O Glatter, L Kratky) (N.Y.: Academic, 1983)
33. Черемской П Г, Слезов В В, Бетехтин В И *Поры в твердом теле* (М.: Энергоатомиздат, 1990)
34. Falk F Z. *Phys. B* **54** 159 (1984)
35. Березин Ф А *Метод вторичного квантования* (М.: Физматгиз, 1965)
36. Абрикосов А А, Горьков Л П, Дзялошинский И Е *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (М.: ГИФМЛ, 1962)
37. Олемской А И, Торопов Е А *ФММ* (9) 5 (1991)
38. Binder K, Young A P *Rev. Mod. Phys.* **58** 801 (1986)
39. Kubo R *J. Phys. Soc. Japan* **12** 570 (1957)
40. *Аморфные металлические сплавы* (Под ред. Ф Е Люборского) (М.: Металлургия, 1987)
41. Генденштейн Л Э, Криве И В УФН **146** 553 (1985)
42. Aksenov V L, Bobeth M, Plakida N M, Schreiber J *J. Phys. C* **20** 375 (1987)
43. Gunton J D, Droz M *Introduction to the theory of metastable and unstable states* (Berlin: Springer-Verlag, 1983)
44. Gunton J D, San Miguel M, Sahni P *Phase transition and critical phenomena Vol. 8* (N.Y.: Academic, 1983) p. 267
45. Furukawa H *Adv. Phys.* **34** 703 (1985)
46. Олемской А И, Коплык И В, Торопов Е А *Изв. вузов. Физика* (4) 49 (1994)
47. Олемской А И, Коплык И В, Торопов Е А *ФММ* (1) 40 (1994)
48. Ициксон К, Зюбер Ж-Б *Квантовая теория поля* Т. 1, 2 (М.: Мир, 1984)
49. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Квантовая механика* (М.: Наука, 1989)
50. Kirkaldy J S *Rep. Prog. Phys.* **55** 723 (1992)
51. Олемской А И, Коплык И В, Торопов Е А *Изв. вузов. Физика* (6) 46 (1994); (8) 39 (1994); (10) 76 (1994)

THEORY OF SPATIOTEMPORAL EVOLUTION OF A NONEQUILIBRIUM THERMODYNAMIC SYSTEM

A.I. Olemskoi, I.V. Koplyk

Sumy State University

ul. Rimskogo-Korsakova 2, 244007 Sumy, Ukraine

Tel. (7-0542) 33-34 65

E-mail: simpo@demex.sumy.ua

Field theories of the kinetics of formation of new phases are reviewed on the basis of a microscopic approach. The evolution of a system quenched across the first-order phase transition point is described in terms of the supersymmetric scheme (which deals on an equal basis with both single-phase and heterophase fluctuations). The dependences of the order parameter, susceptibilities, as well as memory and the nonergodicity parameters on the external conditions and the quenching rate are determined. The critical degree of nonequilibrium as well as the value of the unharmonism parameter for the transition from the dissipative regime to the reactive one (reactions of the Belousov-Zhabotinsky type) are determined.

PACS numbers: 05.70.Fh, 05.70.Ln, 11.30.Pb, 64.70.Kb

Bibliography — 51 references

Received 9 March 1995