

**Семинар
по актуализации научных знаний
по разделу «Молекулярная физика. Термодинамика»**

Павел Владимирович Прудников

кафедра теоретической физики,
Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского



- 1 **Фазовые переходы и критические явления, как раздел молекулярной физики и термодинамики [1,2];**
- 2 **Многообразии фазовых переходов;**
- 3 **Особенности описания фазовых переходов второго рода;**
- 4 **Неравновесные критические явления;**

¹Садовский М.В. Лекции по статистической физике. Ижевск: ИКИ. 2003. – 336 с.

²Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В. Квантово-статистическая теория твердых тел. Омск:Изд-во ОмГУ. 2014. – 492 с.

- **Фаза** – любое однородное состояние системы т.е. такое состояние системы, когда физические свойства во всех точках одинаковы.
- **Фазовый переход** – переход вещества из одного однородного состояния в другое.

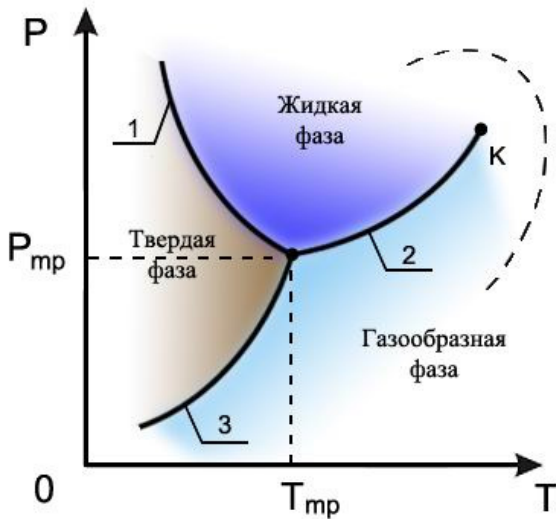


Рис. 1. Переход твердое тело-жидкость-газ

- Если новая фаза возникает в виде зародышей, скажем пузырьков пара в воде, и переход идет путем постепенного увеличения объема новой фазы в массиве старой, то такие фазовые переходы называются **фазовыми переходами первого рода**;
- Фазовые превращения, при которых сосуществование двух фаз исключено и новая фаза возникает сразу во всем объеме, полностью заменяя собой старую, носят название **фазовых переходов второго рода** или **непрерывных фазовых переходов**.

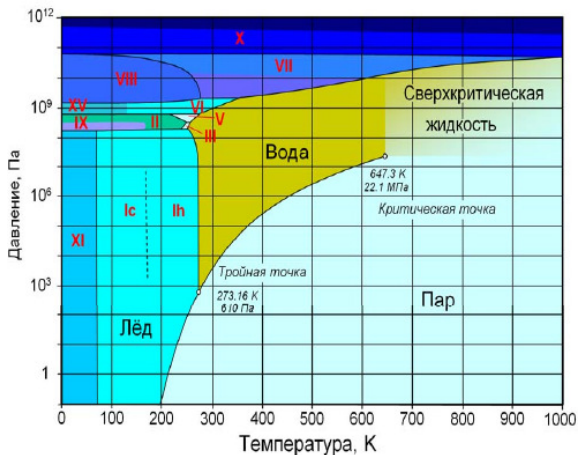


Рис. 2. Фазовая диаграмма воды [3]

³Бражкин В.В., Ляпин А.Г., Рыжов В.Н., Траченко К., Фомин Ю.Д., Циок Е.Н. Где находится область сверхкритического флюида на фазовой диаграмме? Успехи Физ. Наук 2012, 182, 1137;



Рис. 3. Сверхкритическая флюидная экстракция

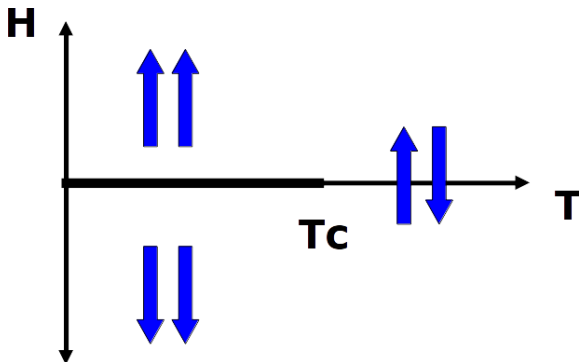


Рис. 4. Магнитные фазовые переходы

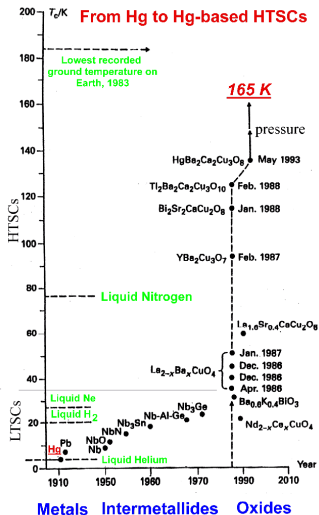


Рис. 5. История сверхпроводящих материалов [4]

⁴Гинзбург В.Л. Сверхпроводимость: позавчера, вчера, сегодня, завтра. Успехи Физ. Наук 2000, 170, 619;

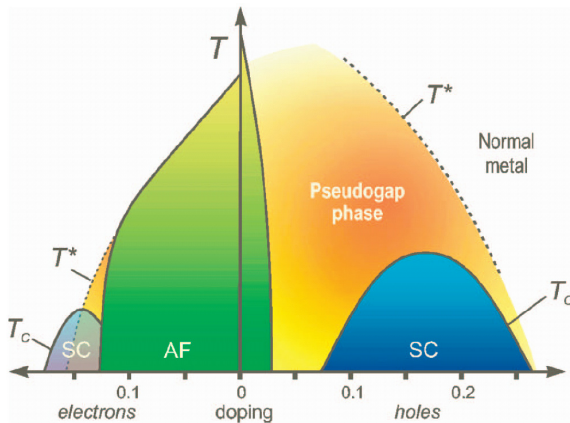


Рис. 6. Фазовая диаграмма высокотемпературного сверхпроводника

- 2008 г. – открытие нового класса сверхпроводящих слоистых соединений на основе железа (пниктиды и халькогениды)

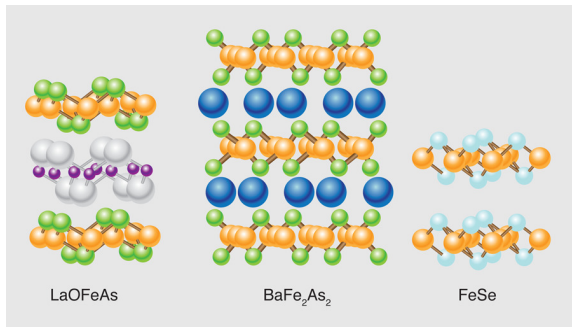


Рис. 7. Высокотемпературные сверхпроводники в слоистых соединениях на основе железа [5]

⁵Садовский М.В. Высокотемпературная сверхпроводимость в слоистых соединениях на основе железа. Успехи Физ. Наук 2008, 178, 1243;



Рис. 8. Левитация человека в лаборатории сверхпроводимости

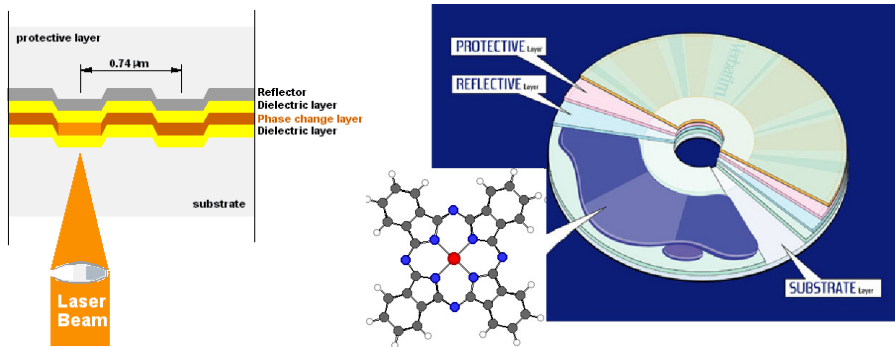


Рис. 9. Структура перезаписываемых дисков

- Жидкие кристаллы – группа веществ, обнаруживающих анизотропию свойств, и в то же время текучих, как обычные жидкости

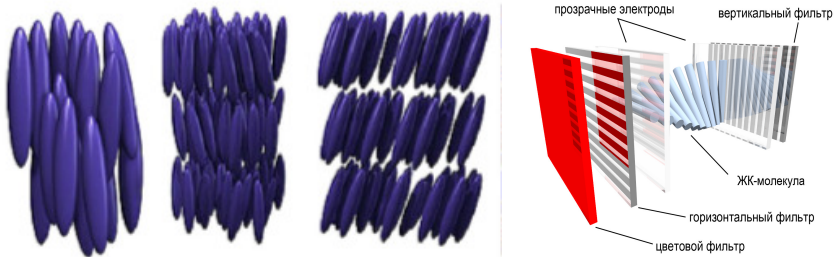


Рис. 10. Жидкие кристаллы: нематики, смектики, холестерики

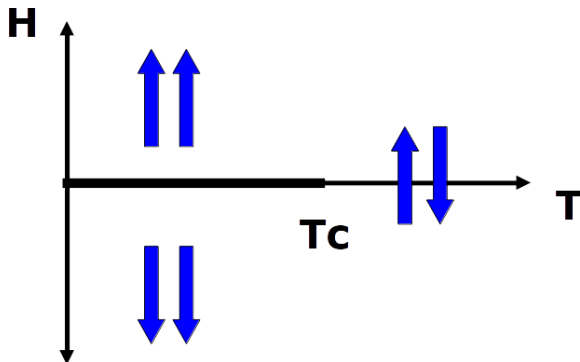


Рис. 11. Магнитные фазовые переходы

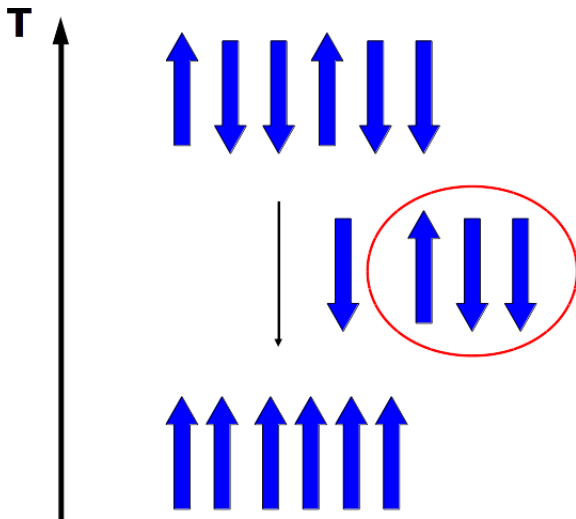


Рис. 12. Неэргодические системы – спиновые стекла [6]

⁶ Доценко В.С. Физика спин-стекольного состояния. Успехи Физ. Наук 1993, 163, 1;

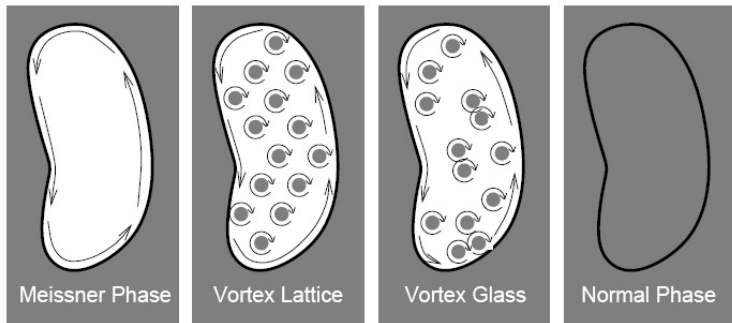


Рис. 13. Метастабильная фаза вихревого стекла

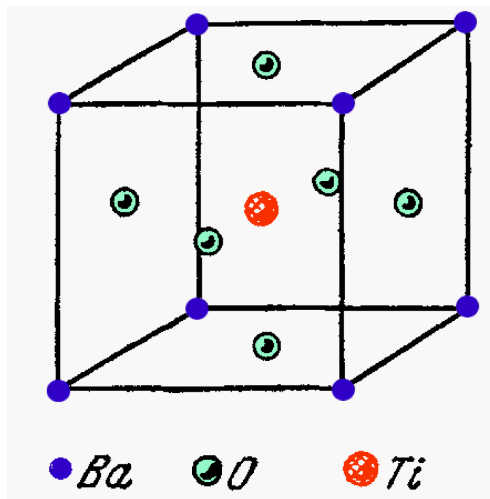
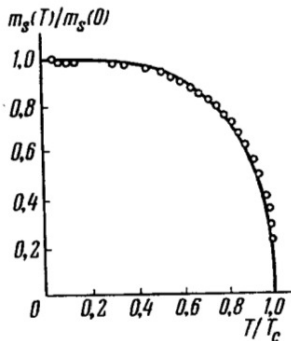


Рис. 14. Кристаллическая структура сегнетоэлектрика BaTiO₃

- Параметр порядка – величина характеризующая изменение симметрии при фазовом переходе

$$\phi = \begin{cases} \neq 0, & T < T_c, \\ = 0, & T > T_c. \end{cases}$$



Критическая точка	Параметр порядка	Вещество	T_c , К
Жидкость — газ	Плотность	H ₂ O	647,05
Ферромагнетик	Намагниченность	Fe	1044,0
Антиферромагнетик	Намагниченность подрешеток	FeF ₂	78,26
λ -точка	Амплитуда He ⁴	He ⁴	1,8—2,1
Сверхпроводник	Амплитуда электронных пар	Pb	7,19
Бинарная смесь	Концентрация	CCl ₄ —C ₇ F ₁₄	301,78
Бинарный сплав	Плотность одной компоненты на подрешетке	Cu — Zn	739
Ферроэлектрик	Поляризация		322,5

Рис. 15. Примеры параметра порядка

- Восприимчивость

$$\chi = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial h} = \frac{(\langle \phi^2 \rangle - \langle \phi \rangle^2)}{kT}$$

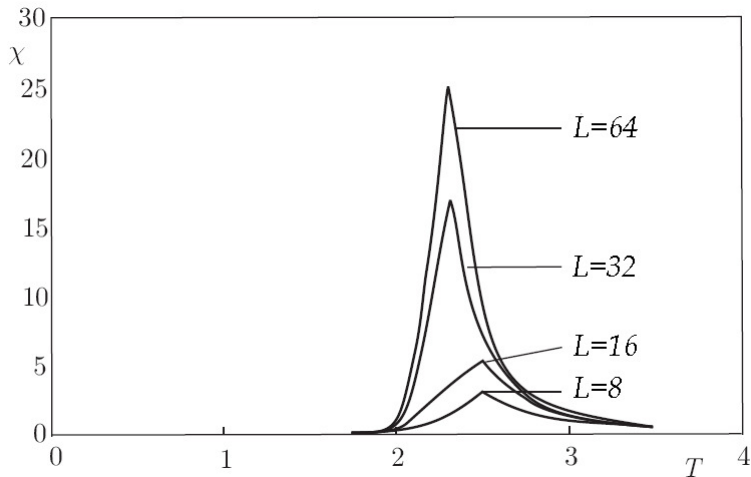


Рис. 16. Восприимчивость двумерной модели Изинга

- Теплоемкость

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{(\langle E \rangle - \langle E \rangle^2)}{kT^2}$$

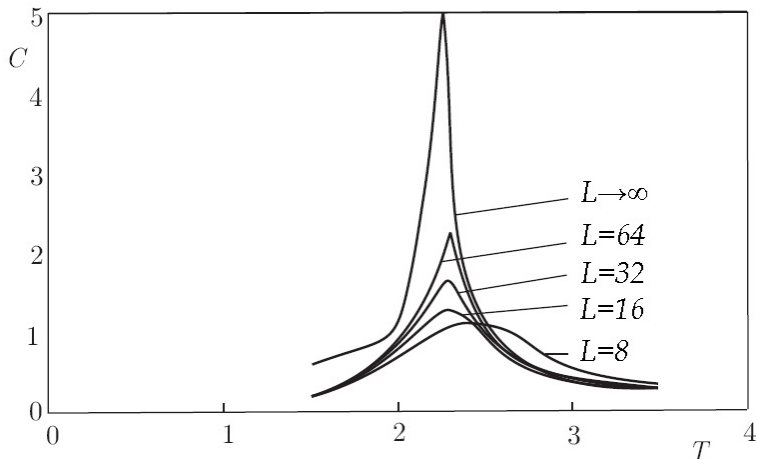


Рис. 17. Теплоемкость двумерной модели Изинга

Корреляционная функция:

$$G(r - r') = \langle S(r)S(r') \rangle - \langle S(r) \rangle \langle S(r') \rangle \sim \frac{e^{-\frac{|r - r'|}{\xi(\tau)}}}{|r - r'|^{d-2+\eta}},$$

$$\xi(\tau) \sim |\tau|^{-\nu} \rightarrow \infty, \quad \tau = (T - T_c)/T_c.$$

Автокорреляционная функция:

$$C(t - t') = \langle S(r, t)S(r, t') \rangle - \langle S(r, t) \rangle \langle S(r, t') \rangle \sim e^{-\frac{|t - t'|}{t_{\text{corr}}(\tau)}},$$

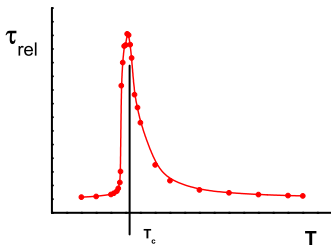
$$t_{\text{corr}}(\tau) \sim |\tau|^{-2\nu} \rightarrow \infty.$$

$$T_0 \Rightarrow T_s, \quad t \gg \tau_{\text{rel}} - \text{состояние равновесия};$$

$$\Rightarrow T_s = T_c(\tau = 0), \quad \tau_{\text{rel}}(\tau) \sim |\tau|^{-z\nu} \rightarrow \infty, \text{ при } \tau = (T - T_c)/T_c \rightarrow 0.$$

Параметр порядка

$$m(t) = \langle S(r, t) \rangle \sim \frac{e^{-\frac{t}{\tau_{\text{rel}}(\tau)}}}{t^{\beta/\nu z}}.$$



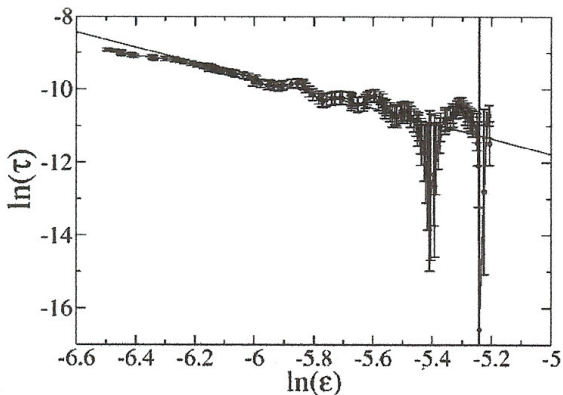


Рис. 18. Equilibration time of 2 monolayers Fe on W for $T_c = 453K$. Value $z\nu = 2.09 \pm 0.06$ corresponds 2D Ising ferromagnet [7]

⁷M.J.Dunlavy, D.Venus, Phys. Rev. B **71**, 144406 (2005);

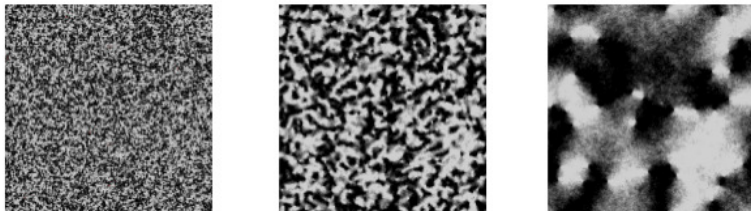
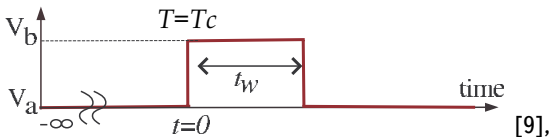
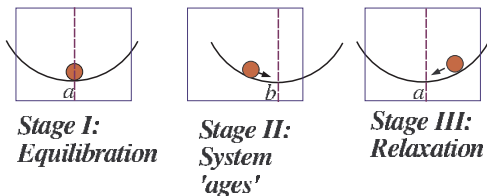


Рис. 19. Неравновесный процесс огрубления планарного магнетика [8]

⁸ Попов I.S., Prudnikov P.V., Solid State Phenomena, 2015, 233-234, 8;



t_w – время ожидания («возраст системы»),

$t - t_w$ – время наблюдения.

⁹A. Amir, Y. Oreg, Y. Imry, Phys. Rev. Lett., 2009, arXiv:0902.1501;

эффекты аномального критического замедления неравновесной критической релаксации при увеличении возраста системы

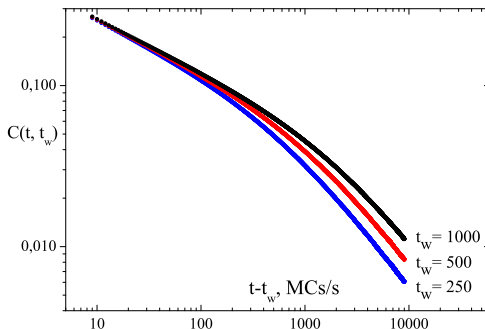


Рис. 20. Автокорреляционная функция $C(t, t_w)$ неупорядоченной 3D модели Изинга

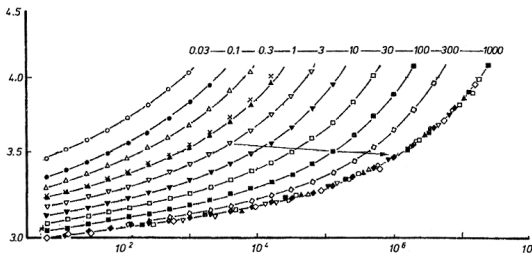


Рис. 21. Creep curves of rigid PVC quenched from 90 C to 20.C. After the ageing time t_e has passed (with values $t_e = [0.03, 0.1, 0.3, 1, 3, 10, 30, 100, 300, 1000]$ days from left to right), a small constant stress was applied and the compliance $J(t)$ was measured as a function of time t , in the range from 10^0 to 10^8 seconds [12,13]

¹²L.C.E. Struik. Physical ageing in amorphous polymers and other materials. Elsevier, Amsterdam, 1978;

¹³ M. Henkel, M. Pleimling, Ageing and dynamical scaling far from equilibrium, in Non-equilibrium Phase Transitions. – Heidelberg:Springer. 2010.

- Автокорреляционная функция:

$$C(t, t_w) = \frac{1}{V} \int d^d x [\langle S(x, t) S(0, t_w) \rangle - \langle S(x, t) \rangle \langle S(0, t_w) \rangle], \quad (1)$$

- Функция отклика:

$$R(t, t_w) = \frac{1}{V} \int d^d x \left. \frac{\delta \langle S(x, t) \rangle}{\delta h(x, t_w)} \right|_{h=0}. \quad (2)$$

Автокорреляционная функция и функция отклика характеризуются двухвременной зависимостью:

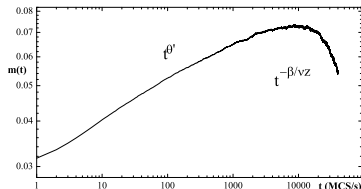
$$\begin{aligned} C(t, t_w) &\sim (t - t_w)^{a+1-d/z} (t/t_w)^{\theta-1} \hat{f}_C(t_w/t), \\ R(t, t_w) &\sim (t - t_w)^{a-d/z} (t/t_w)^\theta \hat{f}_R(t_w/t), \end{aligned} \quad (3)$$

где $\hat{f}_C(t_w/t)$ и $\hat{f}_R(t_w/t)$ конечны при $t_w \rightarrow 0$,

$$a = (2 - \eta - z)/z,$$

$$\theta = \theta' - a,$$

θ' — индекс коротковременной динамики [14];



¹⁴H.K. Janssen, B. Schaub, B. Schmittmann, Z. Phys. B 73, 539 (1989).

- Скейлинговая форма для временной зависимости k -го момента намагниченности [14]:

$$m^{(k)}(t, \tau, L, m_0) = b^{-\frac{k\beta}{\nu}} m^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau, b^{-1}L, b^{x_0}m_0) \quad (4)$$

- Высокотемпературное начальное состояние $m_0 \ll 1$: полагая $b = t^{1/z}$, намагниченность представляется в виде

$$m(t, \tau, m_0) \sim m_0 t^{\theta'} (1 + At^{1/\nu z} \tau + O(\tau^2, m_0^2)), \quad (5)$$
$$\theta' = (x_0 - \beta/\nu)/z$$

- При $\tau = 0$

$$m(t) \sim m_0 t^{\theta'} \quad (6)$$

Этап роста намагниченности: $t \lesssim t_{\text{cr}} \sim m_0^{-1/(\theta' + \beta/\nu z)}$

¹⁴Н.К. Janssen, В. Schaub, В. Schmittmann, Z. Phys. B 73, 539 (1989).

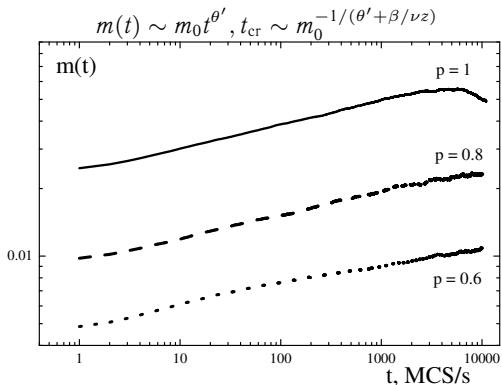


Рис. 22. Временные зависимости намагниченности $m(t)$ для различных спиновых концентраций

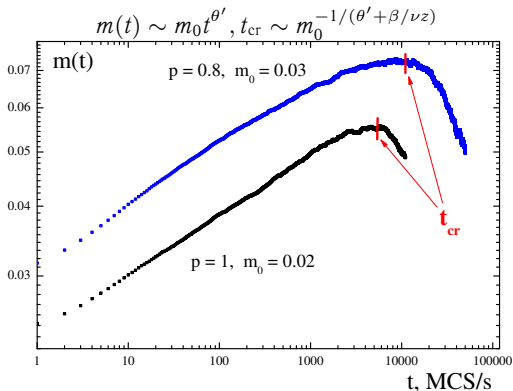


Рис. 22. Временные зависимости намагниченности $m(t)$ для различных спиновых концентраций

- $t - t_w < t_w$: $R = R(t - t_w)$ квазиравновесный режим;
- $t - t_w \sim t_w$: $R \approx t_w^{-2\beta/\nu z - 1} F_R(t/t_w)$ режим **старения**;
- $t - t_w \gg t_w$: $R \sim (t/t_w)^\theta$ **коротковременной** режим [15],

$$1 \ll t_w < t \ll t_{\text{equil}} \sim |\mathcal{T}|^{-z\nu}$$

¹⁵Prudnikov, et al. Phys. Rev. E 81, 011130 (2010).

В состоянии равновесия

$$R(t - t_w) = \frac{1}{T} \frac{\partial C(t - t_w)}{\partial t_w}, \quad (7)$$

При неравновесном поведении

$$R(t, t_w) = X(t, t_w) \frac{1}{T} \frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w}, \quad (8)$$

где $X(t, t_w)$ флуктуационно-диссипативное отношение.

ФДТ утверждает, что $X(t > t_w \gg t_{rel}) = 1$. При $t, t_w \ll t_{rel}$ $X \neq 1$.

Предельное значение

$$X^\infty = \lim_{t_w \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} X(t, t_w) \quad (9)$$

может быть использовано в качестве универсальной характеристики неравновесного поведения систем с медленной динамикой

$$T_{\text{eff}} = T/X^\infty \quad (10)$$

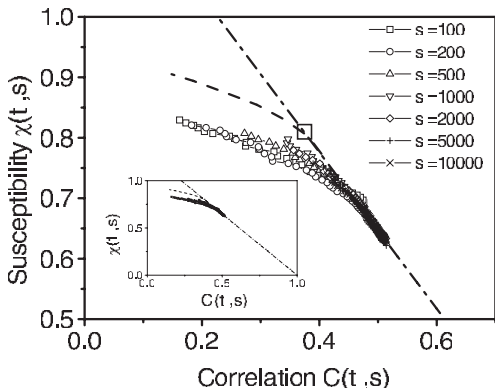


Рис. 23. Нарушение ФДТ в спиновом стекле $\text{CdCr}_{1.7}\text{In}_{0.3}\text{S}_4$, для $T = 13.3\text{K} = 0.8 T_c$ [16]

¹⁶D.Hérissou, M.Ocio. *Fluctuation-dissipation ratio of a spin glass in the ageing regime*. Phys. Rev. Lett. **88**, 257202 (2002); *Off-equilibrium fluctuation-dissipation relation in a spin glass*. Eur. Phys. J. B **40**, 283 (2004);

$$T\chi(t, t_w) = \int_0^{t_w} dt' R(t, t') = \int_0^{t_w} X(t, t') \frac{\partial C(t, t')}{\partial t'} dt' = \int_0^{C(t, t_w)} X(C) dC, \quad (11)$$

$$X(t, t_w) = \frac{\partial(T\chi(t, t_w))}{\partial C(t, t_w)} \quad (12)$$

$$X^\infty = \lim_{t_w \rightarrow \infty} \lim_{C \rightarrow 0} \frac{\partial(T\chi(t, t_w))}{\partial C(t, t_w)} \quad (13)$$

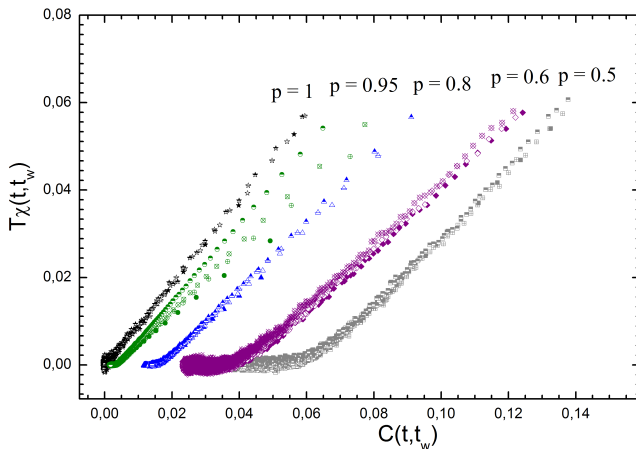


Рис. 24. Параметрические зависимости $T\chi(t, t_w)$ от $C(t, t_w)$ [17]

¹⁷Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А., Маляренко П.Н. Письма в ЖЭТФ 2015, 102, 192;

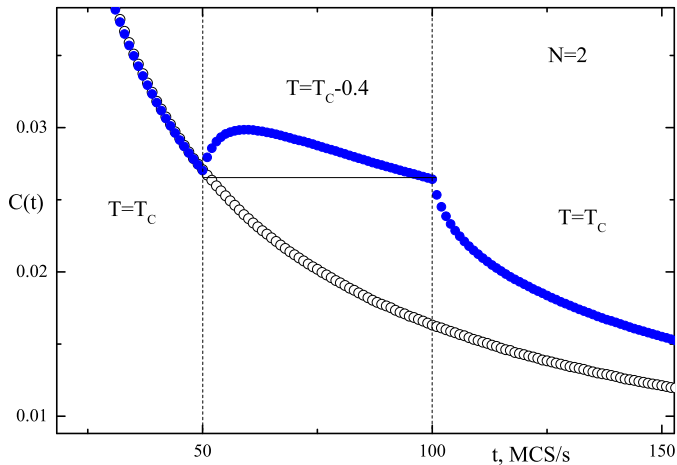


Рис. 25. Эффекты памяти в T -циклическом поведении автокорреляционной функции $C(t, tw)$ для $N = 2$ ($m_0 \ll 1$)

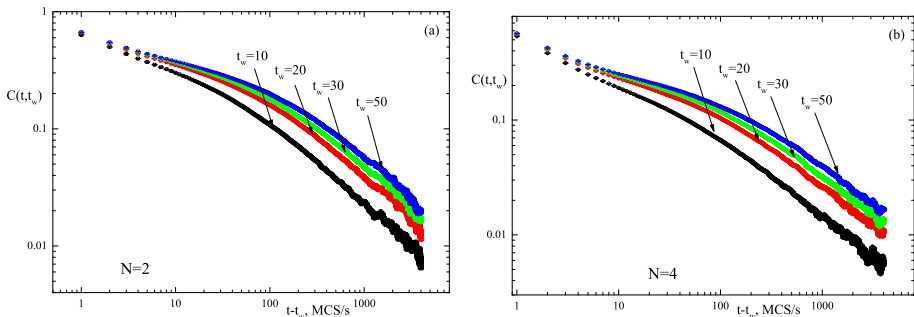
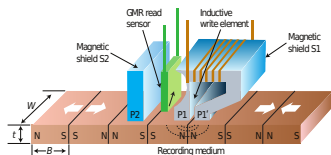


Рис. 26. Временные зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ для $N = 2$ (а) и $N = 4$ (б) для различных t_w ($m_0 \ll 1$)



- устройства магнитной записи [18, 19, 20];
- устройства спинтроники [21].

Схема магниторезистивной записывающей головки жесткого диска, представленная IBM в 1991.

¹⁸Developments in data storage : materials perspective / [edited by] S.N. Piramanayagam, Tow C. Chong, IEEE Press, Wiley:New Jersey, 2012 – 331p.;

¹⁹Fullerton, Margulies, et al., IEEE Trans. Magn., 2003;

²⁰Chappert, Fert, et. al, Nature Mater., 2007

²¹Mangin, Ravelosona, et al. Nature Mater., 2006.

- Продемонстрирован набор интересных эффектов в современной физике критических явлений

Спасибо за внимание!