

Адаптация теории стеклования для аморфных органических материалов

Алексей Одинок

Центр Фотохимии РАН

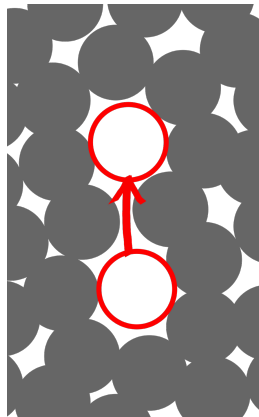
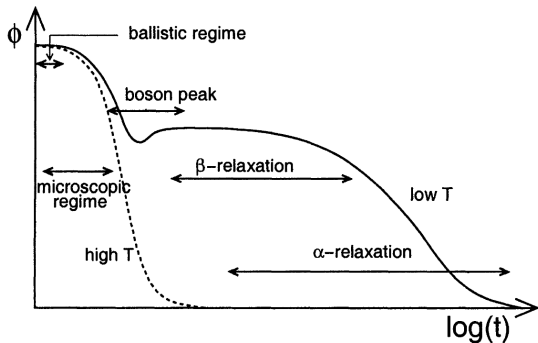
ale.odinokov@gmail.com

9 декабря 2014 г.

Фазовый переход жидкость-аморфное тело

Роль параметра порядка играет автокорреляционная функция плотности:

$$\phi(t) = \langle \rho(\vec{r}, 0) \rho(\vec{r}, t) \rangle_{\vec{r}}$$



K. Binder, W. Kob, *Glassy Materials and Disordered Solids*

Перекрывание конфигураций как мера корреляции плотности

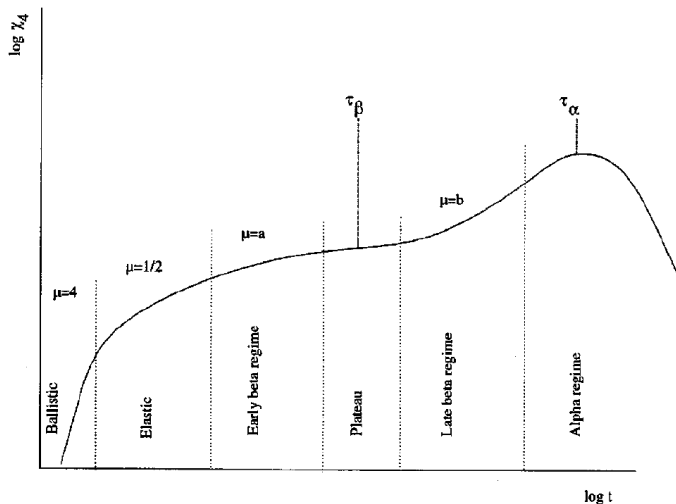
$\rho(\vec{r}, t) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t))$ - плотность системы

$\phi(t) = \frac{1}{n} \sum_{n,i,j} w(\vec{r}_i(t_n) - \vec{r}_j(t_n + t))$, - автокорреляция плотности

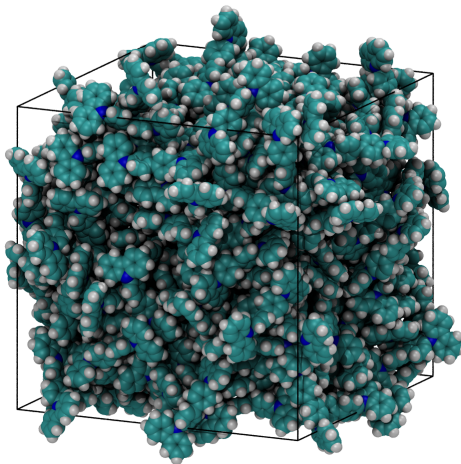
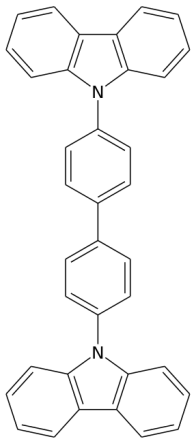
$$w(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } |\vec{r}_i - \vec{r}_j| < a. \\ 0, & \text{если } |\vec{r}_i - \vec{r}_j| \geq a. \end{cases}$$

$\chi_4(t) = \frac{\beta V}{N^2} \left[\langle \phi(t)^2 \rangle - \langle \phi(t) \rangle^2 \right]$ - флуктуация параметра порядка (обобщённая восприимчивость)

Зависимость восприимчивости от времени



C. Toninelli, M. Wyart, L. Berthier, G. Biroli, J.-P. Bouchaud
Phys. Rev. E, 2005, **71**, 041505



4,4'-N,N'-дикарбазолилбифенил (CBP)

$$w(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } |\vec{r}_i - \vec{r}_j| < a. \\ 0, & \text{если } |\vec{r}_i - \vec{r}_j| \geq a. \end{cases}$$

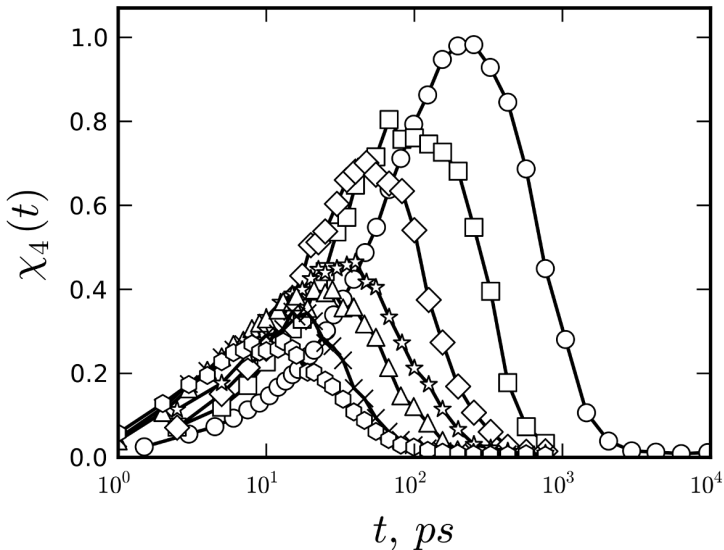
$$u(\angle(\vec{n}_1, \vec{n}_2)) = \begin{cases} 1, & \angle(\vec{n}_1, \vec{n}_2) \leq b \\ 0, & \angle(\vec{n}_1, \vec{n}_2) > b, \end{cases}$$

\vec{r}_i, \vec{r}_j – положения центров масс молекул

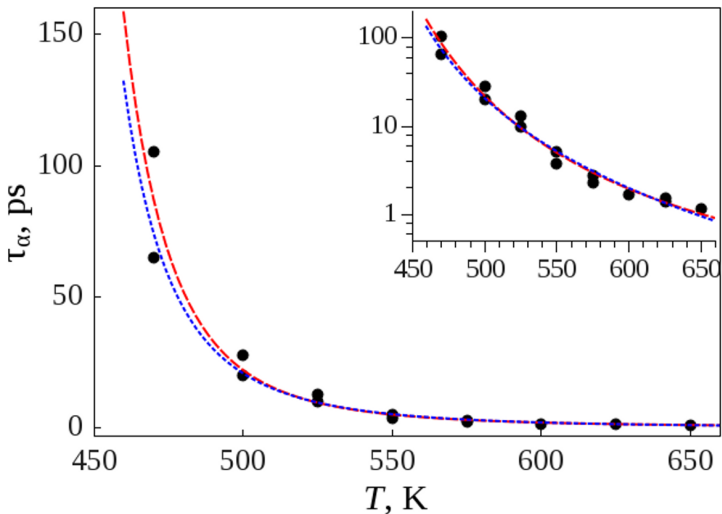
\vec{n}_1, \vec{n}_2 – вектора ориентации молекул

$$\phi(t) = \frac{1}{n} \sum_{i,n} \sum_{j,n} w[\vec{r}_i(t_n) - \vec{r}_j(t_n + t)] u[\angle(\vec{n}_i(t_n), \vec{n}_j(t_n + t))]$$

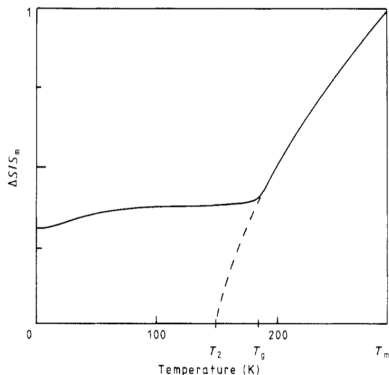
Восприимчивость при низких температурах



Расходимость времён α -релаксации



Закон Фогеля-Фулчера



F. Simon, F. Lange
Z. Phys., 1926, **38**, 227

$$S_{glass} = S_{vib} + S_{conf}$$

$$S_{cryst} = S_{vib}$$

$$\Delta S = S_{glass} - S_{cryst} = S_{conf}$$

$$\eta(T) = \eta_0 e^{\frac{B}{T-T_K}}$$

T_K - температура Каузмманна

T_g - температура стеклования

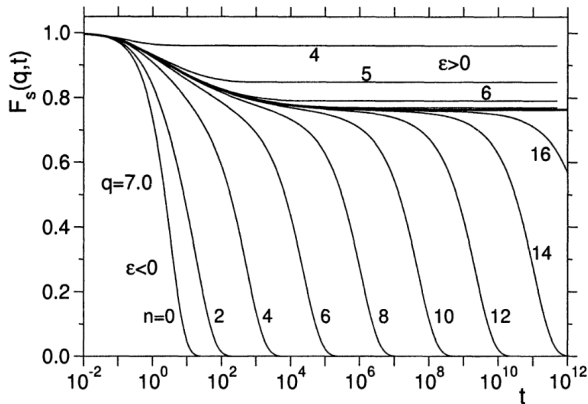
\mathbf{A} - функция от координат и импульсов системы

$$\dot{\mathbf{A}} = i\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{A}(t) - \int_0^t d\tau \mathbf{M}(\tau) \cdot \mathbf{A}(t - \tau) + \mathbf{f}(t)$$

$\mathbf{C}(t) = \langle \mathbf{A}^*(0)\mathbf{A}(t) \rangle$ - автокорреляция \mathbf{A}

$$\hat{\mathbf{C}}(z) = -\frac{\mathbf{C}(0)}{z\mathbf{I} + \mathbf{\Omega} - i\hat{\mathbf{M}}(z)} = -\frac{\mathbf{C}(0)}{z\mathbf{I} + \mathbf{\Omega} + \frac{1}{z\mathbf{I} + \mathbf{\Omega} - i\hat{\mathbf{M}}_1(z)}i\mathbf{M}(0)}$$

Поведение автокорреляции плотности



$$\eta = \eta_c \pm 10^{-n/3}$$

$$\eta_c = 0.5159$$

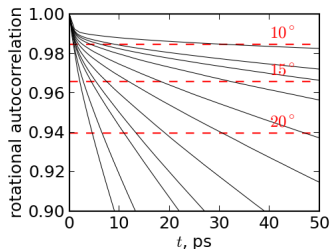
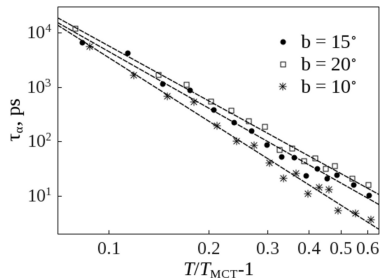
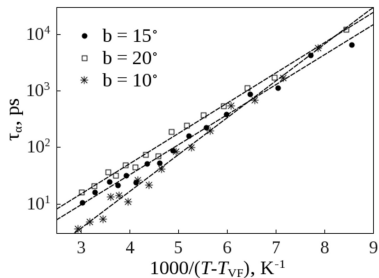
$$\tau_\alpha = \frac{B}{(T - T_c)^\gamma}$$

Результат для системы твёрдых сфер

M. Fuchs, W. Götze, M.R. Mayr

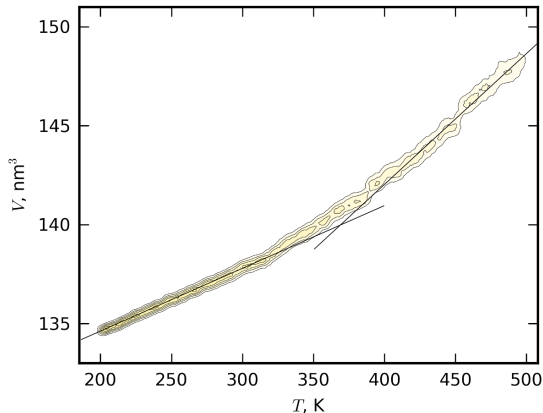
Phys. Rev. E, 1998, **58**, 3384

Подгонка теоретических кривых



b	T_{VF}	B	T_{MCT}	γ
10°	310	1502	402	3.88
15°	319	1233	405	3.35
20°	321	1224	404	3.45

Излом зависимости объёма от температуры



T_{VF}	T_g	T_{MCT}
320	369	405

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ

Работа выполнена при финансовой поддержке
Российского научного фонда
(Соглашение 14-43-00052)

