

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Сергій Іванович Сороков
Андрій Степанович Вдович
Роман Романович Левицький

ТЕРМОДИНАМІКА ТА РЕЛАКСАЦІЙНА ДИНАМІКА ПРОСТОЇ МОДЕЛІ
ПРОТОННОГО СКЛА

Роботу отримано 22 травня 2009 р.

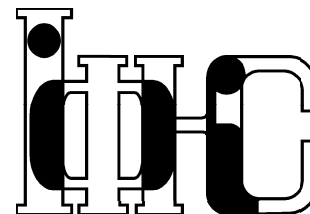
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом теорії модельних спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-09-06U

С.І.Сороков, А.С.Вдович, Р.Р.Левицький

ТЕРМОДИНАМІКА ТА РЕЛАКСАЦІЙНА ДИНАМІКА
ПРОСТОЇ МОДЕЛІ ПРОТОННОГО СКЛА

ЛЬВІВ

УДК: 537.611.2; 537.9

PACS: 75.10.Hk, 75.40.Gb, 75.50.Lk, 77.22.Gm

Термодинаміка та релаксаційна динаміка простої моделі протонного скла

С.І.Сороков, А.С.Вдович, Р.Р.Левицький

Анотація. В рамках наближення двочастинкового кластера для вільної енергії і реплічно-симетричного підходу вивчається проста модель протонного скла з різними типами конкуруючих взаємодій. Показано, що для розрахунку термодинамічних характеристик можна використати гаусове наближення для функцій розподілу кластерних полів. Для простішої моделі з гаусовими кластерними полями і слабкими далекосяжними взаємодіями (лінійне наближення) вивчено вплив далекосяжних взаємодій і випадкових внутрішніх полів на фазову діаграму і її фізичні характеристики. В рамках глауберівського підходу отримано і досліджено вираз для лінійної динамічної сприйнятливості моделі.

Thermodynamic and relaxation dynamics of simple model of proton glass

S.I.Sorokov, A.S.Vdovych, R.R.Levitskii

Abstract. Within two-particle cluster approximation for free energy and replica symmetric approach the simple model of proton-glass with different types of competitive interactions is studied. It is shown, that for calculation of thermodynamic characteristics we can use Gauss approximation for distribution function of cluster fields. For simpler model with Gauss cluster fields and weak long-range interactions (linear approximation) we study the influence of long-range interactions and random internal fields on phase diagram and its physical characteristics. Within Glauber approach expression for linear dynamic susceptibility of the model is obtained and investigated.

Подається в Журнал фізичних досліджень
Submitted to Journal of Physical Studies

© Інститут фізики конденсованих систем 2009
Institute for Condensed Matter Physics 2009

1. Вступ

Системи, які описуються псевдоспіновими гамільтоніанами з конкуруючими взаємодіями, вивчаються більше тридцяти років [1–4]. Головні особливості таких систем можна описати на основі моделі Едвардса-Андерсона (ЕА) [1], гамільтоніан якої має вигляд:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} k_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j \quad (1.1)$$

де \vec{S}_i – вектор класичного спіна, нормований на одиницю, k_{ij} – випадкові параметри з симетричною гаусовою функцією розподілу з другим моментом $\sim c$ (c – концентрація магнітних домішок). У випадку ґратки Браве індекси i, j позначають вузли ґратки. В [1] введено параметр порядку спінового скла $q = \langle \vec{S}_i(t_0) \vec{S}_i(t_0 + t) \rangle$, $t \rightarrow \infty$. Пізніше в переважній більшості робіт під моделлю ЕА називають ізінгівську модель із випадковою взаємодією між найближчими сусідами. Для величини k_{ij} використовується гаусова функція розподілу або розподіл $P(k) = (1 - c) \cdot \delta(k + 1) + c \cdot \delta(k - 1)$ (скорочене позначення $k = (-1, 1)$), де c – концентрація феромагнітних зв'язків.

В [2, 3] запропоновано спрощену модель (модель Шеррінгтона-Кіркпатріка, SK), в якій є лише взаємодії $S_i^z S_j^z$, а для k_{ij} використовується гаусовий розподіл, де середнє значення $\langle k_{ij} \rangle$ і дисперсія (парний кумулянт) $\langle k_{ij}^2 \rangle^{cum}$ не залежать від i, j . Дана модель відповідає системі з далекосяжними взаємодіями. Для цієї моделі методом реплік в рамках реплічно-симетричного підходу отримано точний розв'язок для намагніченості, параметра порядку спінового скла q , ентропії і теплоємності, а також побудовано фазову діаграму. Проте, обчислена в межах цього підходу ентропія стає від'ємною при низьких температурах. Авторами роботи [4] запропоновано розв'язок з порушенням ергодичності (на мові методу реплік – порушенням реплічної симетрії) для SK моделі, який є стабільний при низьких температурах. Пізніше правильність розв'язку з порушенням реплічної симетрії була підтверджена чисельними моделюваннями. Хоча для моделі SK знайдено точний розв'язок, вона далека від реальних сполук.

Для моделювання спінового скла з короткосяжними взаємодіями часто використовують модель, яка враховує тільки взаємодії $S_i^z S_j^z$, і тільки між найближчими сусідами. Таку ізінгівську модель зручно вивчати на ґратці Бете, оскільки в наближенні двочастинкового кластера для вільної енергії на таких ґратках отримується точний результат. Авторами роботи [5] для ґратки Бете отримано інтеграль-

не рівняння для функції розподілу $P(\sigma)$ середнього значення спіна на вузлі. Розв'язавши чисельно це рівняння, отримано температурну залежність першого $\bar{\sigma}$ і другого $\bar{\sigma}^2$ моментів при різних концентраціях. Побудовано фазову діаграму, на якій зображено області феро-і антиферромагнітної фаз (з умови $\bar{\sigma} \neq 0$ $\bar{\sigma}^2 \neq 0$), знайдених з умови $\bar{\sigma} \neq 0$, фази спінового скла (з умови $\bar{\sigma} = 0$ $\bar{\sigma}^2 \neq 0$) і парафази (з умови $\bar{\sigma} = 0$ $\bar{\sigma}^2 = 0$).

В [6] запропоновано інтегральне рівняння для функції розподілу $P(\sigma)$ поля, що діє на даний вузол з боку найближчого вузла

$$P(\sigma) = \int dJ P(J) \int \delta(\sigma - f\{J, \sigma_1, \dots, \sigma_{z-1}\}) \prod_{i=1}^{z-1} (P(\sigma_i) d\sigma_i), \quad (1.2)$$

де

$$f\{J, \sigma_1, \dots, \sigma_{z-1}\} = \beta^{-1} \operatorname{th}^{-1} \left\{ \operatorname{th}(\beta J) \operatorname{th} \left[\beta \left(h + \sum_{i=1}^{z-1} \sigma_i \right) \right] \right\},$$

$\beta = 1/T$, h – зовнішнє поле а σ_i – ефективне кластерне поле, створене i -м найближчим вузлом. Рівняння (1.2) розв'язано чисельно для $J = \pm 1$ і координаційного числа $z = 3$. Отримано функцію $P(\sigma)$, яка має 3 гострих максимуми в точках $\sigma = 0, \pm 1$ та неперервну частину. На основі такої функції розподілу розраховано температурну залежність спонтанної намагніченості, магнітної сприйнятливості, вільної енергії, а також фазову діаграму. Для цієї моделі функцію розподілу шукали аналітично у вигляді трьох δ -функцій в точках $\sigma = 0, \pm 1$ та неперервної частини [7] при $T = 0$, $c = 0.5$, $z = 3$; а пізніше в роботі [8] і для $z=4, 5, 6$. В роботі [9] асиметричні розв'язки з неперервною частиною отримані при $T=0$ для $z=3$, $h=0$ і довільного c і мають вигляд

$$P(\sigma) = a\delta(\sigma) + \frac{1}{2}[(b+\Delta)\delta(\sigma+1) + (b-\Delta)\delta(\sigma-1)] + \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} d_l P_l(\sigma). \quad (1.3)$$

Тут a, b, Δ, d_l - залежать від концентрації c ($a \neq 0$ тільки для непарних z), $P_l(\sigma)$ - поліноми Лежандра. Асиметричні розв'язки відповідають неоднорідному феромагнітному стану. Необхідно відзначити, що для ґратки Бете для чистої феромагнітної фази функція $P(\sigma)$ містить тільки одну $\delta(\sigma - \varphi(T))$ функцію, а в чистій параелектричній фазі $\varphi(T) = 0$.

Значно пізніше Мезард і Парізі [10] врахували перший крок порушення реплічної симетрії (1RSB) для моделі Ізінґа з довільним

розподілом випадкових взаємодій на ґратці Бете. Було показано, що попередні результати [5, 8, 9] відповідають реплічно-симетричному (RS) підходу. Недавно в [11] модель Ізінґа з гаусовим розподілом констант взаємодії на ґратці Бете вивчалася чисельно на основі алгоритму, запропонованого в [10]. Було показано, що різниця між вільною енергією в межах RS і 1RSB розв'язків є менша ніж 4% для $z=4, 6$. Подібний висновок було зроблено раніше для розподілу $k=(-1,1)$. Слід відзначити, що різниця між RS і 1RSB розв'язками зростає при збільшенні z . Будемо вважати, що для опису систем з конкуруючими короткосяжними і далекосяжними взаємодіями, в яких переважаючу роль у формуванні стану спінового скла відіграють короткосяжні взаємодії, можна використати реплічно-симетричний підхід.

Модель із взаємодією лише між найближчими сусідами також не є адекватною для опису реального спінового скла, а тим більше, протонного скла, де важливими є далекосяжні взаємодії.

Характерною для спінового і протонного скла є довгочасова релаксація різних фізичних властивостей (старіння). Авторами роботи [12] в наближенні середнього поля на основі рівняння Глаубера теоретично отримано степеневе загасання функції $\langle S_i S_i(t) \rangle$ і розраховано частотну залежність магнітної сприйнятливості в моделі SK. В роботі [13] для моделі EA з гаусовим розподілом на основі наближеного розв'язку рівняння Глаубера аналітично розраховано функцію $q(t) = \langle S_i(0) S_i(t) \rangle$ і залежну від часу магнітну сприйнятливості $\chi(t)$. Обидві функції мають логарифмічний закон загасання, а час релаксації залежить від температури за законом Арреніуса. Така поведінка $q(t)$ і $\chi(t)$ підтверджується проведеним в цій роботі моделюванням методом Монте-Карло.

В [14] методом Монте-Карло досліджено залежність від часу кореляційної функції

$$C(t, t_w) = \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i(t + t_w), \sigma_i(t_w) \rangle$$

де t_w – час, пройдений після охолодження до стану спінового скла. Обчислення проводились для моделі EA з $J = \pm 1$ для кубічної ґратки ($L=60$). Встановлено, що кореляційна функція $C(t, t_w)$ для $t > t_w$ спадає по степеневому закону

$$C(t, t_w) = A(t_w) \left(1 + \frac{t}{t_w} \right)^{-1/\alpha(t_w)}.$$

Для $t < t_w$ спостерігається різна поведінка на різних інтервалах часу. Спін-спінова кореляційна функція при низьких температурах також

має довгочасовий степеневий характер загасання в моделі SK [15] і моделі EA з гаусовим розподілом констант взаємодії [16]. При цьому в [15] використовуються різні наближення рівняння Глаубера і метод Монте-Карло, а в [16] – метод Монте-Карло.

В роботі [17] для випадкової ортогональної моделі (random orthogonal model), яка є модифікацією моделі SK, на основі розрахунку сприйнятливості методом Монте-Карло для квадратної ґратки показано, що в області склофазі температурна залежність піка уявної частини сприйнятливості може бути апроксимована декількома співвідношеннями, зокрема співвідношенням Вогеля-Фулчера.

Описані вище моделі придатні для опису спінового скла, проте вони не можуть правильно описати поведінку протонного скла, оскільки вони не враховують внутрішніх випадкових електричних полів, які існують в цих сполуках, реальної структури цих сполук, а також тунелювання протонів на водневих зв'язках.

В роботах [18, 19] в наближенні середнього поля досліджено модель Ізінга в поперечному полі, яка враховує тунелювання протонів. В [18] константи взаємодії $J_{ij} = \pm J$, і відмінні від нуля лише між найближчими сусідами. В [19], як і в моделі Шеррінгтона-Кіркпатріка, J_{ij} далекосяжні і флюктуюють з функцією розподілу Гауса. На основі проведених в цих роботах розрахунків встановлено, що в обох випадках тунелювання понижує температуру фазового переходу з парафазі в склофазу T_g , в сегнетофазу T_c і в антисегнетофазу T_N .

В роботах [20–22] досліджується модель Ізінга в поперечному полі Ω_i , в якій також враховано внутрішнє випадкове поздовжнє поле h_i . При цьому при розрахунках використовується гаусівський розподіл випадкової взаємодії з безмежним радіусом дії ($\langle J_{ij}^2 \rangle_c = x(1-x) \cdot \text{const}(i-j)$) і хаотичного деформаційного поля h_i ($\langle h_i \rangle = 0$, $\langle h_i^2 \rangle \sim x(1-x)$)

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_i^z S_j^z - \sum_i \Omega_i S_i^x - \sum_i (E + h_i) S_i^z, \quad (1.4)$$

де E – зовнішнє однорідне поле. В роботі [20] в рамках реплічно-симетричного підходу отримана і досліджена система рівнянь для невідомих p, q, r

$$p = \langle S_\alpha^z \rangle_n; \quad q = \langle S_\alpha^z S_\beta^z \rangle_n; \quad r = \langle (S_\alpha^z)^2 \rangle_n \xrightarrow{\Omega \rightarrow 0} 1; \quad n \rightarrow 0,$$

де α, β – номери реплік, та вирази для вільної енергії, сприйнятливості χ , лінії нестійкості для RS-наближення (лінія Алмейда-Таулеса).

Було показано, що температура переходу в склофазу T_g існує тільки при $\langle h_i^2 \rangle_c = 0$ і відповідає піку на температурній залежності $\chi(T)$. Внутрішнє хаотичне поле ($\langle h_i^2 \rangle_c \neq 0$) приводить до існування стану протонного скла при довільній високій температурі вище T_g ($q_{EA} > 0$, $q_{EA} \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 0$) і згладжування піку на температурній залежності $\chi(T)$. Автори цієї роботи розраховували (при $\Omega_i = 0$) функцію розподілу локальних полів $P(h) = \langle \delta(h - h_i - \sum_j J_{ij} S_j) \rangle$. Її форма

при високих температурах близька до гаусівської, а з пониженням температури або збільшенням $\langle h_i^2 \rangle_c$ перетворюється на двопікову з мінімумом при $h = 0$. Така форма лінії $P(h)$ якісно узгоджується із експериментально спостережуваною формою спектральних ліній ЕПР [23] і ЯМР [24], які також з пониженням температури розщеплюються. Температурна залежність параметра q_{EA} , розрахована на основі моделі [20], добре узгоджується із другим моментом функції розподілу спектральних ліній ЕПР [23] і ЯМР [24, 25]. В роботах [26, 27] для моделі з гамільтоніаном (1.4) при $\Omega_i = 0$ на основі рівняння Глаубера розраховано форму лінії ЕПР (однопікову при високих температурах і двопікову при низьких), яка добре узгоджується з експериментальною в широкому інтервалі температур ($T = [10K, 150K]$). Для цієї моделі, як показано в [22], параметр $q_{EA} \rightarrow 1$ при $\Omega_i = 0$, $T \rightarrow 0$. При наявності тунелювання ($\Omega_i \neq 0$) $q_{EA} < 1$ при всіх T , що означає неповне замороження.

В роботі [21] для моделі з гамільтоніаном (1.4) в наближенні реплічної симетрії розраховано параметр порядку m і параметр q_{EA} , а також побудовано фазові діаграми при різних значеннях поперечного поля та дисперсії випадкових полів. Оскільки при наявності випадкових полів $q_{EA} > 0$ при всіх T , то температуру переходу в склофазу T_g в даній роботі вводять, як температуру, нижче якої реплічно-симетричний розв'язок нестійкий. Тобто має місце порушення реплічної симетрії, а система переходить в неергодичний стан. Встановлено, що випадкові поля понижують температури T_g , T_c і T_N , а також розширюють область склофазі. Показано, що між областю склофазі і сегнетофазі існує фаза, в якій $m \neq 0$ і реплічно-симетричний розв'язок нестійкий, і яку автори називають областю співіснування скло- і сегнетофазі.

Якщо в (1.4) поля h_i мають функцію розподілу у вигляді двох гаусіан, то на лінії розділу сегнето- і парафазі з'являються додаткові трикритичні точки, а фазовий перехід із сегнето- в парафазу стає переходом першого роду [28].

В роботі [29] проведено динамічне узагальнення статичного підхо-

ду з роботи [20]. Розглядаються сполуки $Rb_{1-x}(ND_4)_xD_2PO_4$, $Rb_{1-x}(ND_4)_xD_2AsO_4$, які описуються гамільтоніаном.

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_i^z S_j^z - \sum_i (E + h_i) S_i^z - g \sum_{i,k} (b_k + b_{-k}^+) S_i^x, \quad (1.5)$$

Тут в ізінгівський гамільтоніан введено взаємодію псевдоспінів з термостатом фононів, що в запропонованому в цій роботі наближенні приводить до глауберівської динаміки для функцій розподілу спінів. Усереднення по конфігураціях дає дебаєвський вираз для діелектричної проникності $\varepsilon(\omega)$ з неперенормованим за рахунок усереднення затравочним часом релаксації. Тому для нього автори змушені використовувати феноменологічний вираз у вигляді закону Арреніуса. Побудовані температурні залежності піку уявної $\varepsilon''(\omega)$ частини діелектричної проникності якісно подібні до експериментальних даних. Однак, побудована на основі даної моделі релаксаційна теорія дейтерованих сумішей [29] не описує коректно частотну залежність діелектричної проникності.

Описані вище роботи, в основі яких лежить модель Ізінга з поперечним полем та поздовжнім випадковим полем мають той недолік, що вони не враховують реальної структури сполук типу $Rb_{1-x}(NH_4)_xH_2PO_4$. Крім того, в цих роботах взаємодії далекосяжні (типу Шерінгтона-Кіркпатріка), тоді як в реальних сполуках основну роль відіграють взаємодії між найближчими сусідами.

В роботах [30,31] була запропонована теорія статичних властивостей модельних протонних стекол з довільним радіусом конкуруючих взаємодій. В роботі [32] подібний підхід використано для опису термодинамічних і діелектричних властивостей сполук з водневими зв'язками $K_{1-x}(ND_4)_xD_2PO_4$ і $Rb_{1-x}(NH_4)_xH_2AsO_4$, в яких суттєву роль при формуванні енергетичних рівнів відіграє чотиричастинковий кластер. Метою даної роботи є обчислення в межах реплічної симетрії частотної залежної діелектричної проникності і фазових діаграм ізінгоподібних систем з суттєвими конкуруючими короткосяжними і слабкими далекосяжними взаємодіями в наближенні двочастинкового кластера. Ми вважаємо, що дана модельна задача і розвинені на її основі методи мають велику наукову цінність і можуть бути використані для дослідження більш широкого класу матеріалів з конкуруючими взаємодіями.

2. Функція розподілу кластерних полів у моделі протонного скла

Гамільтоніан простої моделі протонного скла має такий вигляд:

$$H = - \sum_i h_i S_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} k_{ij} S_i S_j \quad (2.1)$$

де $S_i = \pm 1$, k_{ij} – випадкова константа взаємодії між найближчими вузлами ґратки i і j з функцією розподілу $P(k) = (1 - c) \cdot \delta(k + 1) + c \cdot \delta(k - 1)$ (скорочене позначення $k = (-1, 1)$), а h_i – випадкове внутрішнє поле. На основі гамільтоніана (2.1) можна записати вільну енергію F досліджуваної моделі в наближенні двочастинкового кластера в такому вигляді:

$$\begin{aligned} -\beta F = & \sum_i F_0(h_i + \sum_{r_i} \varphi_{ir_i}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} [F_{cl}(h_i + \sum_{r_i \neq j} \varphi_{ir_i} | h_j + \sum_{r_j \neq i} \varphi_{jr_j} | k_{ij}) - \\ & - F_0(h_i + \sum_{r_i} \varphi_{ir_i}) - F_0(h_j + \sum_{r_j} \varphi_{jr_j})], \end{aligned} \quad (2.2)$$

де φ_{ir_i} – ефективне кластерне поле, що діє на i -й вузол з боку r_i -го вузла. Тут і надалі використовуємо наступні позначення

$$\begin{aligned} F_0(x) &= \ln(2 \operatorname{ch}(\beta x)), \\ F_{cl}(x_1 | x_2 | k) &= \ln(2(e^{\beta k} \operatorname{ch}(\beta x_1 + \beta x_2) + e^{-\beta k} \operatorname{ch}(\beta x_1 - \beta x_2))), \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$F_0^{(l)}(x) = \frac{\partial^l}{\partial (\beta x)^l} F_0(x),$$

$$F_{cl}^{(lm)}(x_1 | x_2 | k) = \frac{\partial^l}{\partial (\beta x_1)^l} \frac{\partial^m}{\partial (\beta x_2)^m} F_{cl}(x_1 | x_2 | k), \quad (2.4)$$

де $\beta = 1/\tilde{T}$, \tilde{T} – температура. Для представлення результатів розрахунків будемо використовувати приведену температуру $T = \tilde{T}/z$, де z – координаційне число. Кластерні поля φ_{ir_i} , φ_{jr_j} діють на вузли i , j з боку вузлів r_i , r_j різних координаційних сфер. Вони задовільняють рівнянню

$$\beta \varphi_{1r} = \operatorname{Arc th}[\operatorname{th}(\beta k_{1r}) \operatorname{th}(\sum_{k \neq 1} \beta \varphi_{rk})]. \quad (2.5)$$

Розглянемо спочатку однопідґраткову систему (всі вузли після конфігураційного усереднення еквівалентні). Для усереднення по кон-

фігураціях будемо використовувати такі функції розподілу

$$R_n(\sigma, 1) = \langle \delta(\sigma - \varphi_{1r_n}) \rangle_{conf}, \quad R_n(\sigma, z_n - 1) = \langle \delta(\sigma - \sum_{r_n}^{z_n-1} \varphi_{1r_n}) \rangle_{conf}. \quad (2.6)$$

$$\begin{aligned} R(\sigma, z_n - 1) &= \\ &= \langle \delta(\sigma - \sum_{r_1}^{z_1} \varphi_{1r_1} - \sum_{r_2}^{z_2} \varphi_{1r_2} \dots - \sum_{r_n}^{z_n-1} \varphi_{1r_n} - \sum_{r_{n+1}}^{z_{n+1}} \varphi_{1r_{n+1}} - \dots) \rangle_{conf}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Тут $R_n(\sigma, z_n - 1)$ - функція розподілу $z_n - 1$ кластерних полів для n -ої координаційної сфери, $R(\sigma, z_n - 1)$ - функція розподілу суми всіх кластерних полів за виключенням одного поля з n -ої координаційної сфери, $z_n \in$ координаційне число n -ої координаційної сфери, ($n = 1, \dots, M$). Ми будемо надалі нехтувати кореляціями між кластерними полями. Тоді з (2.5)-(2.7) легко знайти співвідношення ($\tilde{R}_n(\zeta, 1)$ - фур'є-образ для $R_n(\sigma, 1)$)

$$\begin{aligned} \tilde{R}_n(\zeta, 1) &= \langle e^{i\zeta \varphi_{1r_n}} \rangle_{conf} = \\ &= \int d\xi_n \langle e^{i\zeta \beta^{-1} \text{Arc th}(\text{th } \beta k_n \text{ th } \beta \xi_n)} \rangle_{k_n} R(\xi_n, z_n - 1), \end{aligned} \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} R(\sigma, z_n - 1) &= \\ &= \frac{1}{2\pi} \int d\zeta e^{-i\sigma\zeta} [\tilde{R}_1(\zeta, 1)]^{z_1} \times \dots \times [\tilde{R}_n(\zeta, 1)]^{z_n-1} [\tilde{R}_{n+1}(\zeta, 1)]^{z_{n+1}} \times \dots \end{aligned} \quad (2.9)$$

При врахуванні M координаційних сфер співвідношення (2.8), (2.9) дають M інтегральних рівнянь для M функцій розподілу $R(\sigma, z_n - 1)$, які вперше отримані в [30]. Ці рівняння є узагальненням інтегрального рівняння, отриманого і розв'язаного чисельно в [6] для функції розподілу $R(\sigma, 1)$ поля від одного найближчого сусіда. В [6] враховано взаємодію лише між найближчими сусідами. Вільну енергію можна виразити через середні з відповідними функціями розподілу $R(\sigma, z_n - 1)$ і $R(\sigma, z_n) = R(\sigma)$:

$$\begin{aligned} -\beta F/N &= (1 - z_1) \langle F_0(\sigma) \rangle_{R(\sigma)} + \frac{z_1}{2} \langle \langle F_{cl}(\sigma | \sigma' | k_1) \rangle_{k_1} \rangle_{R(\sigma, z_1 - 1), R(\sigma', z_1 - 1)} + \\ &+ \sum_{i \geq 2} \frac{z_i}{2} [\langle \langle F_{cl}(\sigma | \sigma' | k_i) \rangle_{k_i} \rangle_{R(\sigma, z_i - 1), R(\sigma', z_i - 1)} - \langle F_0(\sigma) \rangle_{R(\sigma)} - \langle F_0(\sigma') \rangle_{R(\sigma')}] . \end{aligned}$$

На основі (2.5) і (2.7) функцію $R(\sigma)$ можна виразити тільки через $R(\sigma, z_n - 1)$:

$$R(\sigma) = \int d\zeta R(\zeta, z_i - 1) \langle R(\sigma - \text{Arc th}[\text{th}(\beta k_i) \text{ th}(\beta \zeta)], z_i - 1) \rangle_{k_i}. \quad (2.10)$$

Інтегральне рівняння розв'язано нами чисельно для випадку, коли взято до уваги тільки взаємодію між найближчими сусідами (базисна система з $M=1$, $z = z_1$) з розподілом $P(k) = (1-c)\delta(k+1) + c\delta(k-1)$. Інтегральне рівняння для функції $R(\sigma, z - 1) = R_1(\sigma, z_1 - 1)$ в даному випадку має такий вигляд

$$\begin{aligned} R(\sigma, z - 1) &= \\ &= \frac{1}{2\pi} \int d\xi e^{-i\sigma\xi} \left[\int d\zeta \langle e^{i\zeta \beta^{-1} \text{Arc th}(\text{th } \beta k \text{ th } \beta \xi)} \rangle_k R(\xi, z - 1) \right]^{z-1}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Ми розв'язуємо це рівняння методом ітерацій. При цьому в якості нульового наближення для $R(\sigma, z - 1)$ вибирається гаусівська функція

$$R^{(0)}(\sigma, z - 1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(z-1)q^{(0)}}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{(\sigma - (z-1)\varphi^{(0)})^2}{(z-1)q^{(0)}} \right\}$$

з параметрами $\varphi^{(0)}$, $q^{(0)}$, які знаходяться з такої системи рівнянь:

$$\begin{aligned} \varphi^{(0)} &= \langle \sigma \rangle_{R^{(0)}(\sigma, z-1)} = \langle \langle \beta^{-1} \text{Arc th}(\text{th } \beta k \text{ th } \beta \sigma) \rangle_k \rangle_{R^{(0)}(\sigma, z-1)}, \\ q^{(0)} &= \langle \sigma^2 \rangle_{R^{(0)}(\sigma, z-1)} - (\varphi^{(0)})^2. \end{aligned}$$

При низьких температурах функції розподілу для i -ої ітерації $R^{(i)}(\sigma, z - 1)$, починаючи з першої, містять δ -подібні піки. Для коректного підрахунку інтегралів від таких функцій ми використовуємо співвідношення між функцією $f(x)$ і її фур'є-образом $\tilde{f}(\zeta)$:

$$f(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\varepsilon} \int_{x-\varepsilon}^{x+\varepsilon} d\sigma f(\sigma) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi\varepsilon} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \tilde{f}(\zeta) e^{-ix\zeta} \frac{\sin(\varepsilon\zeta)}{\zeta}.$$

На рис.1 зображені отримані нами результати п'ятої ітерації для функції $R(\sigma, z - 1)$, результати отримані на основі формул, даних в [9], і гаусової затравочної функції (нульова ітерація). Вже перша ітерація дає якісно правильну структуру спектра для $R(\sigma, z - 1)$, яка складається з δ -подібних піків зі скінченною шириною біля $\pm 1, \pm 3$. Це пов'язано з тим, що при $T \rightarrow 0$ розв'язки системи для φ_{1r} є близькі до ± 1 . Отже, сума $z - 1$ кластерних полів може мати тільки наступні значення: $\pm(z - 1), \pm(z - 3), \dots$ На рис.1 можна побачити, що $R(\sigma, z - 1)$ є симетричною функцією σ . Таким чином, при цих параметрах ($z=4$ $c=0.5$) система є в стані спінового скла ($\langle \sigma \rangle_{R(\sigma, z-1)} = 0$, $\langle \sigma^2 \rangle_{R(\sigma, z-1)}^{cum} \neq 0$). δ -подібні піки можуть спостерігатися тільки при

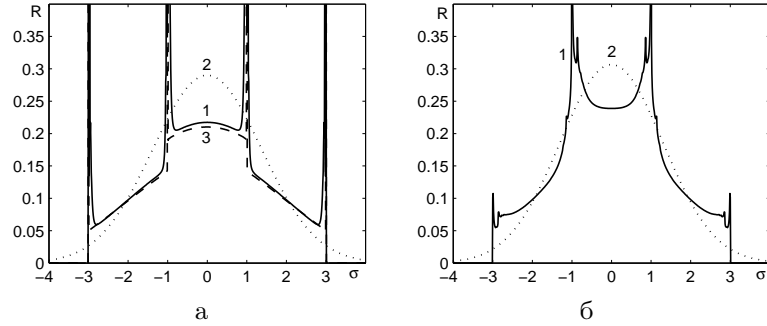


Рис. 1. Функція розподілу $R(\sigma, z-1)$ для $z=4$, $c=0.5$ (фаза спінового скла (SG)) при $T = 0.021$ (а) і 0.1 (б). 1 – п'ята ітерація, 2 – затравочна гаусова функція, 3 – аналітичний результат при $T=0$.

дуже низьких температурах. Як видно з рис.1, при підвищенні температури δ -подібні піки розмиваються. Для $z = 4$ при $T > 0.2$ і для $z > 4$ при $T > 0.1$ форма лінії для $R(\sigma, z-1)$ є дуже близька до гаусової функції.

Для $c = 0.95$ функція розподілу кластерних полів є несиметричною функцією σ (рис.2). Таким чином, при цих параметрах ($z=4$, $c=0.95$) система є в сегнетоелектричному стані ($\langle \sigma \rangle_{R(\sigma, z-1)} \neq 0$, $\langle \sigma^2 \rangle_{R(\sigma, z-1)}^{cum} \neq 0$).

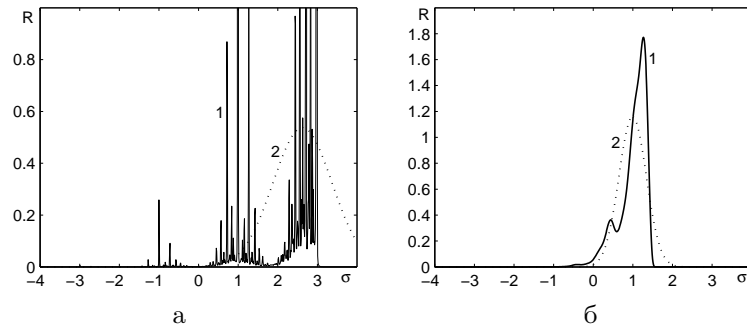


Рис. 2. Функція розподілу $R(\sigma, z-1)$ для $z=4$, $c=0.95$ (сегнетоелектрична (F) фаза) при $T = 0.2$ (а) і 0.6 (б). 1 – п'ята ітерація, 2 – затравочна гаусова функція.

Використовуючи гаусове наближення для $R(\sigma, z_1 - 1)$ можна отримати добре відомі аналітичні вирази для температури переходу T_g з чистої параелектричної фази до фази спінового скла і температури переходу T_c з чистої параелектричної до змішаної сегнетоелектричної фази

$$T_c = \left[\text{Arcth} \frac{1}{(z-1)(2c-1)} \right]^{-1} \xrightarrow{z \rightarrow \infty} z(2c-1),$$

$$T_g = \left[\text{Arcth} \frac{1}{\sqrt{z-1}} \right]^{-1} \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \sqrt{z}.$$

Для базисної системи показано, що ітераційна процедура для інтегрального рівняння для функцій розподілу $(z-1)$ кластерних полів швидко збігається, якщо використати гаусову форму затравочної функції (п'ята і вищі ітерації не відрізняються). Вперше показано [30, 31], що вільна енергія, обчислена з гаусовою функцією розподілу і вільна енергія, обчислена з функцією розподілу, знайденою з інтегрального рівняння після п'ятої ітерації, є близькі між собою (рис.3). Це дозволяє нам використовувати гаусові наближення для

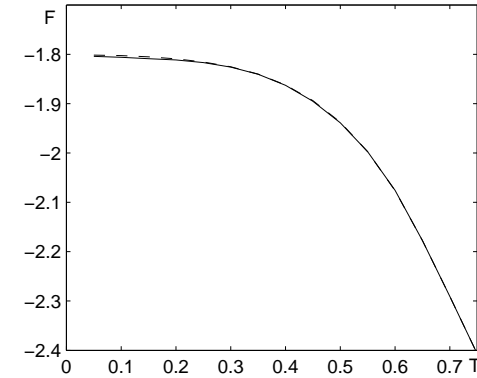


Рис. 3. Температурна залежність вільної енергії $z=4$, $c=0.95$ (сегнетоелектрична (F) фаза): гаусова функція (пунктирна лінія) і п'ята ітерація (суцільна лінія) для $R(\sigma, z_1 - 1)$.

всіх функцій розподілу (параметри φ_n, q_n для $R_n(\sigma, 1)$, $(z_n - 1)\varphi_n$, $(z_n - 1)q_n$ для $R_n(\sigma, z_n - 1) = \langle \delta(\sigma - \sum_{r_n=1}^{z_n-1} \varphi_{ir_n}) \rangle$). Таким чином, коли враховано M координаційних сфер, з умов екстремуму вільної

енергії можна отримати $2M$ рівнянь для $2M$ параметрів гаусових функцій розподілу.

Для того, щоб надалі спростити задачу, будемо вивчати простішу модель спінового скла з суттєвими взаємодіями між найближчими сусідами (базисна система) і слабкими взаємодіями для інших координаційних сфер.

3. Термодинамічні властивості моделі протонного скла з гаусовим розподілом кластерних полів

В роботі [31] розглянуто кубічну ґратку, яка складається з двох підґраток ($f = 1$ і $f = 2$ після конфігураційного усереднення) так, що найближчими сусідами вузлів одної з підґраток є вузли іншої підґратки. Для вільної енергії F запропоновано наближення двочастинкового кластера для першої координаційної сфери і наближення середнього поля для інших координаційних сфер з гаусівськими функціями розподілу кластерних полів. Це дозволяє описувати систему з допомогою таких варіаційних параметрів: середніх по конфігураціях кластерних полів, які діють на f -й спін з боку найближчого сусіда φ_f і з боку всіх інших координаційних сфер $\varphi_{L,f}$, дисперсії цих полів відповідно q_f і $q_{L,f}$. Чисельні розрахунки проведені для випадку нехтування флуктуаціями далекосяжної взаємодії ($q_{L,f}=0$). Тобто вважається, що стан протонного скла формується в основному завдяки короткосяжним взаємодіям. Після усереднення по конфігураціях вільна енергія на одну примітивну комірку F/N в цьому наближенні має вигляд:

$$-\beta \frac{F}{N} = - \sum_{f=1}^2 z_1 \langle F_f^{(0)} \rangle_c + z \langle F^{(00)} \rangle_c + \frac{\beta}{2} \sum_{f,f'=1}^2 J_{ff'} \langle F_f^{(1)} \rangle_c \langle F_{f'}^{(1)} \rangle_c - \beta \sum_{f=1}^2 \varphi_{L,f} \langle F_f^{(1)} \rangle_c. \quad (3.1)$$

Тут і далі позначимо $z_1 = z - 1$. Для усереднення по конфігураціях використано позначення:

$$\begin{aligned} \langle F_f^{(l)} \rangle_c &= \int \int F_0^{(l)}(z\varphi_f + \varphi_{L,f} + \sigma + g + h) R(\sigma, zq_f) \rho(g) d\sigma dg, \\ \langle F^{(lm)} \rangle_c &= \\ &= \int \int \int \int F_{cl}^{(lm)}(z_1\varphi_1 + \varphi_{L1} + \sigma_1 + g_1 + h | z_1\varphi_2 + \varphi_{L2} + \sigma_2 + g_2 + h | k) \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\times R(\sigma_1, z_1q_1) R(\sigma_2, z_1q_2) \rho(g_1) \rho(g_2) P(k) d\sigma_1 d\sigma_2 dg_1 dg_2 dk, \\ P(k) &= (1-c) \cdot \delta(k+\alpha) + c \cdot \delta(k-1), \quad \overrightarrow{def} k = (-\alpha, 1), \\ \rho(g) &= 0.5 \left(\delta(g + \sqrt{2c(1-c)Q_g}) + \delta(g - \sqrt{2c(1-c)Q_g}) \right), \\ R(\sigma, zq_f) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi zq_f}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\sigma^2}{zq_f} \right\}, \end{aligned}$$

де $J_{ff'}$ – усереднена по конфігураціях сума констант взаємодії між спінами (які не є найближчими сусідами) f -ї і f' -ї підґратки, h – зовнішнє поле, $R(\sigma, z_1q)$ і $R(\sigma, zq)$ – гаусовий розподіл z_1 і z кластерних полів, $\rho(g_f)$ – розподіл випадкових внутрішніх полів з дисперсією $4c(1-c)Q_g$. З умови екстремуму F/N знаходимо систему рівнянь для варіаційних параметрів φ_f , q_f , $\varphi_{L,f}$:

$$\begin{aligned} \langle F_1^{(1)} \rangle_c &= \langle F^{(10)} \rangle_c, \quad \langle F_1^{(2)} \rangle_c = \langle F^{(20)} \rangle_c, \\ \langle F_2^{(1)} \rangle_c &= \langle F^{(01)} \rangle_c, \quad \langle F_2^{(2)} \rangle_c = \langle F^{(02)} \rangle_c, \quad \varphi_{L,f} = \sum_{f'=1}^2 J_{ff'} \langle F_{f'}^{(1)} \rangle_c, \end{aligned} \quad (3.2)$$

а також вирази для усереднених по конфігураціях температурного середнього значення f -го спіна η_f в елементарній комірці і його квадрату:

$$\eta_f = \langle F_f^{(1)} \rangle_c, \quad Q_f = Q = \left\langle [F_1^{(1)}]^2 \right\rangle_c = 1 - \langle F_1^{(2)} \rangle_c. \quad (3.3)$$

У випадку сегнетоелектричного і антисегнетоелектричного впорядкування при відсутності зовнішнього поля мають місце такі співвідношення:

$$\begin{aligned} \eta_1 &= \eta_2 = \eta, \quad \varphi_1 = \varphi_2 = \varphi, \quad \varphi_{L1} = \varphi_{L2} = \varphi_L, \quad q_1 = q_2 = q, \\ \eta_1 &= -\eta_2 = \eta, \quad \varphi_1 = -\varphi_2 = \varphi, \quad \varphi_{L1} = -\varphi_{L2} = \varphi_L, \quad q_1 = q_2 = q. \end{aligned}$$

Зауважимо, що в запропонованій нами моделі антисегнетофаза утворюється за рахунок протилежної поляризації підґратки $f=2$ (найближчі сусіди підґратки $f=1$). Тепер із системи рівнянь (3.2) отримаємо вираз для η і рівняння для φ , q , φ_L :

$$\begin{aligned} \eta &= \langle F_1^{(1)} \rangle_c, \quad \langle F_1^{(1)} \rangle_c = \langle F^{(10)} \rangle_c, \quad \langle F_1^{(2)} \rangle_c = \langle F^{(20)} \rangle_c, \\ \varphi_L &= (J_{11} \pm J_{12}) \eta = J_{\pm} \eta. \end{aligned} \quad (3.4)$$

де $J_+ = J$ відповідає сегнетофазі, а J_- – антисегнетофазі.

Нас цікавить сприйнятливність системи. Упохіднюючи по полю βh вираз $\eta_f = \langle F_f^{(1)} \rangle_c$ і верхні рівняння (3.2) з $f=1$ та враховуючи, що $\varphi'_1 = \varphi'_2 = \varphi'$, $q'_1 = \pm q'_2 = q'$ (“-” – для антисегнетофази), $\eta'_1 = \eta'_2 = \eta'$, можна отримати систему рівнянь для φ' , q' , η' :

$$\begin{aligned} [1 - \bar{F}^{(2)}\beta J] \eta' &= \bar{F}^{(2)} [1 + z\varphi'] \beta + \frac{z}{2} \bar{F}^{(3)} \beta^2 q', & (3.5) \\ [z\bar{F}^{(2)} - z_1\bar{F}^{[11]}] \beta \varphi' + \frac{1}{2} [z\bar{F}^{(3)} - z_1\bar{F}^{[12]}] \beta^2 q' &= [-\bar{F}^{(2)} + \bar{F}^{[11]}] [1 + \beta J \eta'], \\ [z\bar{F}^{(3)} - z_1\bar{F}^{[21]}] \beta \varphi' + \frac{1}{2} [z\bar{F}^{(4)} - z_1\bar{F}^{[22]}] \beta^2 q' &= [-\bar{F}^{(3)} + \bar{F}^{[21]}] [1 + \beta J \eta'], \end{aligned}$$

де введені такі позначення

$$\begin{aligned} \bar{F}^{(i)} &= \langle F_1^{(i)} \rangle_c, \\ \bar{F}^{[11]} &= \langle F^{(20)} + F^{(11)} \rangle_c, \quad \bar{F}^{[12]} = \langle F^{(30)} \pm F^{(12)} \rangle_c, & (3.6) \\ \bar{F}^{[21]} &= \langle F^{(30)} + F^{(21)} \rangle_c, \quad \bar{F}^{[22]} = \langle F^{(40)} \pm F^{(22)} \rangle_c. \end{aligned}$$

Знак “-” у (3.6) відповідає антисегнетоелектричному впорядкуванню. Розв’язавши (3.5) отримуємо сприйнятливність:

$$\chi = \beta \eta' = -\beta [D/B - \beta J]^{-1}, \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} D &= [z\bar{F}^{(2)} - z_1\bar{F}^{[11]}] [z\bar{F}^{(4)} - z_1\bar{F}^{[22]}] - \\ &\quad - [z\bar{F}^{(3)} - z_1\bar{F}^{[12]}] [z\bar{F}^{(3)} - z_1\bar{F}^{[21]}], \\ B &= \bar{F}^{(2)} \bar{F}^{[11]} [z\bar{F}^{(4)} - z_1\bar{F}^{[22]}] + z_1 \bar{F}^{(2)} \bar{F}^{[12]} \bar{F}^{[21]} - z [\bar{F}^{(3)}]^2 \bar{F}^{[11]}. \end{aligned}$$

Система рівнянь для φ_L , φ , q має наступні розв’язки: $\varphi_L = \varphi = 0$, $q = 0$ (чиста параелектрична фаза), що існує тільки при $Q_g = 0$; $\varphi_L = \varphi = 0$, $q \neq 0$ (SG- фаза протонного скла); $\varphi_L, \varphi \neq 0$, $q = 0$ (чиста сегнетоелектрична або антисегнетоелектрична фаза), існують тільки при $c = 1$ або $c = 0$; $\varphi_L, \varphi \neq 0$, $q \neq 0$ (F – неоднорідна сегнетоелектрична фаза або AF – неоднорідна антисегнетоелектрична фаза) в залежності від умов (3.4)).

На рис.4 приведена фазова діаграма для кубічної ґратки відповідно для симетричного $k = (-1, 1)$ і асиметричного розподілу $k = (-0.5, 1)$ і для відповідного гаусового розподілу з невідповідною малою додатною далекосяжною взаємодією J ($J_- = 3/5J$). T_g для

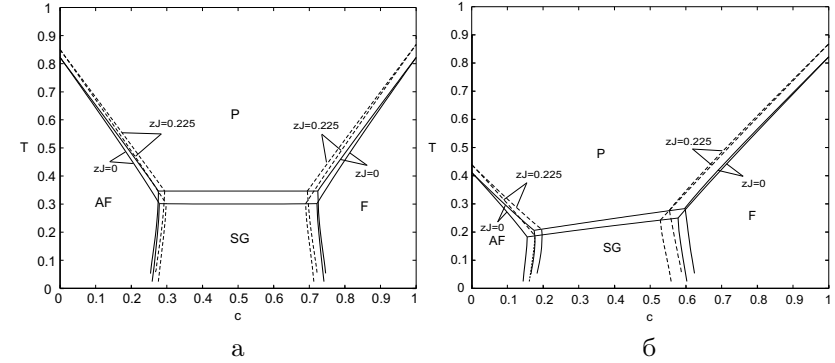


Рис. 4. Фазова діаграма для $z=6$ для розподілу $k=(-1,1)$ (а) і $k=(-0.5,1)$ (б) і для відповідного гаусового розподілу (нижня крива) при $J=0.0; 0.225$.

гаусового розподілу k лежить нижче тому що для цього розподілу більш імовірні значення k близькі до нуля. Зростання невідповідних додатних далекосяжних взаємодій змушує область фази спінового скла. При великих J лінія P-SG зникає, виникає вертикальна лінія F-AF; криві F-P і AF-P, а також F-SG і AF-SG перетинаються, і SG фаза існує тільки нижче від F-SG і AF-SG.

На рис.5 для $z=6$ з розподілом $k=(-1,1)$ приведена температурна залежність середнього спіна η , сприйнятливості χ і середнього квадрату спіна Q при $c=0.73$ і $c=0.95$ для різних значень J . Видно, що для $c=0.73$ на відміну від $c=0.95$, невеликі значення J суттєво впливають на характеристики системи. Фазові переходи між параелектричною фазою і сегнетофазою, а також між сегнетофазою і скло фазою для $c=0.73$ (низькотемпературна гілка) відносяться до другого роду. Якісно подібну фазову діаграму, а також параметр порядку, параметр Едвардса-Андерсона і сприйнятливність отримано в [6] на основі чисельного розв’язку інтегрального рівняння для $R(\sigma, 1)$ при $z = 3$.

Для симетричних гаусового розподілу k і розподілу $k=(-1,1)$ для концентрації $c=0.5$ на рис.6 приведені температурні залежності термодинамічних характеристик системи. Відзначимо, що гаусовий розподіл не тільки понижуює температуру SG-переходу, але також згладжує пік в точці переходу для теплоємності і сприйнятливості.

На рис.7 приведена фазова діаграма для кубічної ґратки для си-

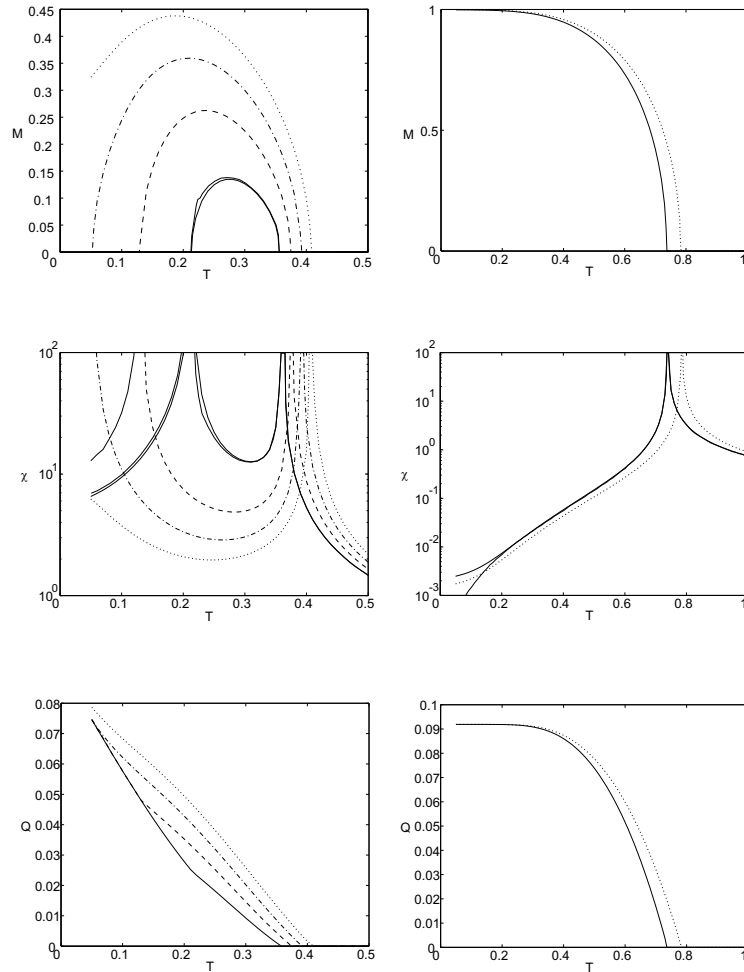


Рис. 5. Температурна залежність η , χ і Q для $z=6$ і розподілу $k=(-1,1)$ при $c=0.73$ (ліва колонка, SG область зліва від лівого піка, F-фаза в центральній області) і $c=0.95$ (права колонка, F – зліва від піка) для $J=0.0; 0.075; 0.15; 0.225$ (пунктирна лінія).

метричного $k=(-1,1)$ і асиметричного розподілу $k = (-0.5, 1)$ при різних значеннях дисперсії Q_g внутрішніх випадкових полів при невідповідній малій додатній далекосяжній взаємодії J ($J_- = 3/5J$). При

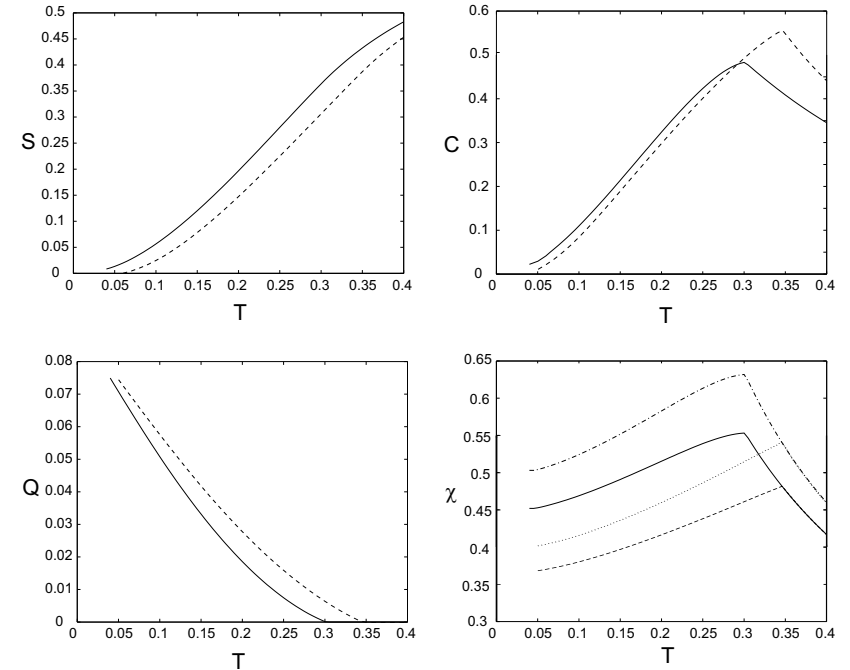


Рис. 6. Температурна залежність ентропії S , теплоємності C , середнього квадрату поляризації Q і сприйнятливості χ для $z=6$, $c=0.5$ (SG фаза) з розподілом $k=(-1,1)$ (штрихові лінії і пунктирна лінія для χ) і гаусовим розподілом k (суцільні лінії і штрихпунктирна лінія для χ) для $J=0.0; 0.225$. В SG фазі залежність від J проявляється тільки для χ . Для $J=0.225$ ці лінії лежать вище ніж для $J=0.225$.

відсутності внутрішнього поля у високотемпературній області існує параелектричний стан ($\eta=0$, $Q=q=0$) і можна розрахувати температуру склування $T_g(c)$ при переході до стану спінового скла з умови $q(T_g)=0$, а також температури Кюрі $T_c(c)$ і Нееля $T_N(c)$ при переході до сегнето- або антисегнетоелектричного станів з умов $\eta(T_{c,N})=0$. Внутрішні поля призводять до існування стану протонного скла у високотемпературній області ($Q \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 0$), однак при цьому липаються в силі умови $\eta(T_{c,N})=0$ для визначення T_c , T_N .

В перехідній області між високотемпературною фазою протонного скла HPG (high-temperature proton-glass), де $Q \ll 1$, і низько-

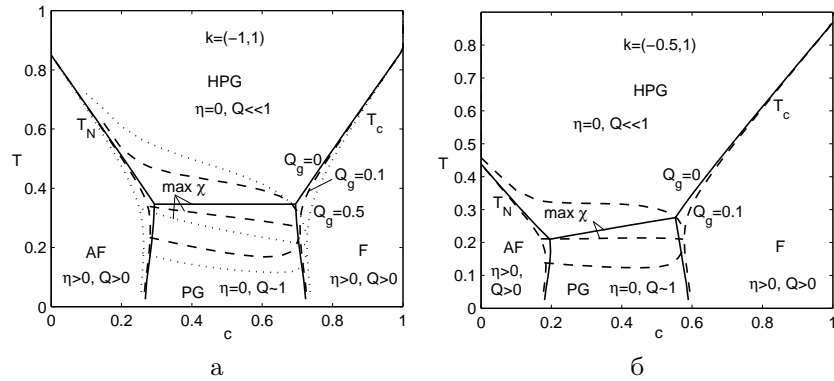


Рис. 7. Фазова діаграма для $z=6$ для розподілу $k=(-1,1)$ (а) і $k=(-0.5,1)$ (б) при $Q_g=0, 0.1, 0.5$ і $J=0.225$.

температурними фазами відбувається швидке зростання параметра Q (в зв'язку зі зростанням q) з пониженням температури. На експерименті границі перехідної області часто визначають як верхню і нижню точки перегину (наприклад, при $Q_g = 0.1$ верхня і нижня штрихові лінії на рис.7) в температурній залежності сприйнятливості. Як видно з рис.7, це може бути якісним критерієм перехідної області при переході у фазу низькотемпературного скла або у AF фазу.

Для прикладу на рис.8 і 9 зображено температурну залежність Q і χ для кубічної ґратки для симетричного розподілу $k=(-1,1)$ при наявності внутрішніх випадкових полів при $J=0.225$ і $c=0.5$ (перехід від високотемпературної SG-фази до низькотемпературної SG-фази) і $c=0.735$ (перехід від високотемпературної SG-фази через сегнетофазу до низькотемпературної SG-фази). Малі внутрішні поля призводять до суттєвого розмиття фазового переходу з парафази в склофазу (рис.8а і 9а). Однак внутрішні випадкові поля практично не змінюють форму піка сприйнятливості при переході між HPG фазою і F фазою (рис.9б) і визначена по точках перегину перехідна область відсутня, хоча перехідна область по параметру Q існує. Подібне розмивання переходу в склофазу і згладження кривих $Q(T)$ і $\chi(T)$ існує в моделі Ізінга з поперечним полем і безмежно далекими конкуруючими взаємодіями при врахуванні внутрішніх випадкових полів [20].

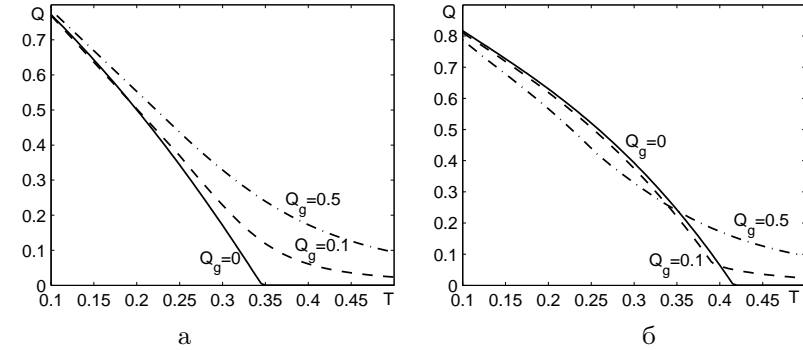


Рис. 8. Температурна залежність середнього квадрата спіна Q для $z=6$ для розподілу $k=(-1,1)$ при $J=0.225$ та $c=0.5$ (а) і $c=0.735$ (б).

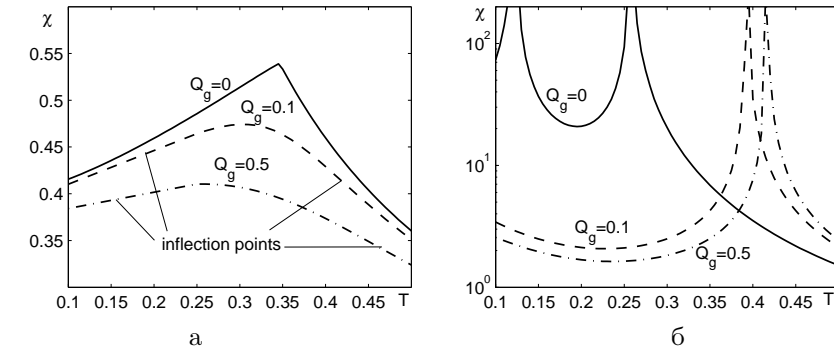


Рис. 9. Температурна залежність сприйнятливості χ для $z=6$ для розподілу $k=(-1,1)$ при $J=0.225$ та $c=0.5$ (а) і $c=0.735$ (б).

4. Релаксаційна динаміка моделі протонного скла в кластерному наближенні

Динамічні характеристики запропонованої нами моделі протонного скла будемо вивчати на основі методу Глаубера. Кінетичне рівняння

для унарної функції $\langle S_1 \rangle_{\rho(t)}$ запишемо в такому вигляді:

$$\left(1 + \frac{\partial}{\partial t}\right) \langle S_1 \rangle_{\rho(t)} = \left\langle F_0^{(1)} \left(h_1 + \sum_{r_1} k_{1r_1} \cdot S_{r_1} \right) \right\rangle_{\rho(t)}$$

Для замикання цього рівняння в 1-частинковому наближенні проводимо заміну $\sum_{r_1} k_{1r_1} \cdot S_{r_1} \approx \sum_{r_1} \varphi_{1r_1}(t)$:

$$\left(1 + \frac{\partial}{\partial t}\right) \eta_1(t) \approx \left\langle F_0^{(1)} \left(h_1 + \sum_{r_1} \varphi_{1r_1} \right) \right\rangle_{\rho(t)} = \left\langle F_0^{(1)}(x_1(t)) \right\rangle_{\rho(t)}, \quad (4.1)$$

Тут в праву частину входять кластерні поля φ_{1r_1} , які діють на вузол 1 з боку вузлів r_1 . Для їх знаходження потрібні додаткові рівняння. В наближенні двочастинкового кластера виділяємо явно два вузли 1 і 2, які є найближчими сусідами, а для решти вузлів використовуємо наближення, яке аналогічне одночастинковому

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{\partial}{\partial t}\right) \eta_1(t) &\approx \left\langle F_0^{(1)} \left(h_1 + \sum_{r_1 \neq 2} \varphi_{1r_1}(t) + k_{12} S_2 \right) \right\rangle_{\rho(t)} = \\ &= L(y_1(t)) + P(y_1(t)) \eta_2(t), \\ \left(1 + \frac{\partial}{\partial t}\right) \eta_2(t) &\approx \left\langle F_0^{(1)} \left(h_2 + \sum_{r_2 \neq 1} \varphi_{2r_2}(t) + k_{21} S_1 \right) \right\rangle_{\rho(t)} = \\ &= L(y_2(t)) + P(y_2(t)) \eta_1(t), \end{aligned}$$

Тут і надалі ми використовуємо позначення:

$$x_i(t) = h_i(t) + \sum_{r_i} \varphi_{ir_i}(t), \quad y_i(t) = h_i(t) + \sum_{r_i \neq j} \varphi_{ir_i}(t),$$

$$h_i(t) = h(t) + g_i, \quad i, j = 1, 2,$$

$$P(y) = F_0^{(1)}(y + k_{12}) + F_0^{(1)}(y - k_{12}), \quad L(y) = F_0^{(1)}(y + k_{12}) - F_0^{(1)}(y - k_{12}),$$

$$\frac{\partial^n P(y)}{\partial(\beta y)^n} = F_0^{(1+n)}(y + k_{12}) + F_0^{(1+n)}(y - k_{12}),$$

$$\frac{\partial^n L(y)}{\partial(\beta y)^n} = F_0^{(1+n)}(y + k_{12}) - F_0^{(1+n)}(y - k_{12}).$$

Запишемо систему кластерних рівнянь в матричному вигляді:

$$\hat{A}_t(\partial/\partial t) \cdot \vec{\eta}(t) = \vec{C}_t, \quad (4.2)$$

де

$$\begin{aligned} \hat{A}_t(\partial/\partial t) &= \hat{A}(y_1(t), y_2(t), \partial/\partial t) = \begin{pmatrix} -1 - \frac{\partial}{\partial t} & P(y_1(t)) \\ P(y_2(t)) & -1 - \frac{\partial}{\partial t} \end{pmatrix}, \\ \vec{C}_t &= \vec{C}(y_1(t), y_2(t)) = \begin{pmatrix} -L(y_1(t)) \\ -L(y_2(t)) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

Ми використовуємо ті самі позначення для $\eta_i(t)$, $\varphi_{ir_i}(t)$, як і в 1-частинковому наближенні. Це дозволяє отримати замкнуту самоузгоджену систему рівнянь для змінних $\eta_i(t)$, $\varphi_{ir_i}(t)$. Як ми покажемо нижче, в статичному випадку ця система дає результати наближення 2-частинкового кластера, яке можна отримати також на основі розвинення вільної енергії системи. Тому ми будемо називати отриману систему рівнянь наближенням двочастинкового кластера для рівняння Глаубера.

Нас будуть цікавити статичні розв'язки і лінійний відгук системи на зовнішнє залежне від частоти поле. Запишемо $\eta_i(t)$, $x_i(t)$, $y_i(t)$, $\hat{A}_t(\partial/\partial t)$, \vec{C}_t у вигляді суми рівноважного значення і залежного від часу відхилення від рівноваги:

$$\begin{aligned} \eta_i(t) &= \eta_i + \delta\eta_i(t), \quad x_i(t) = x_i + \delta x_i(t), \quad y_i(t) = y_i + \delta y_i(t). \\ \hat{A}_t(\partial/\partial t) &= \hat{A}(\partial/\partial t) + \delta\hat{A}_t(\partial/\partial t), \quad \vec{C}_t = \vec{C} + \delta\vec{C}_t. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Підставивши (4.3) у (4.1) і (4.2) отримуємо статичний і динамічний розв'язки, які запишемо в частотному представленні в одночастинковому

$$\eta_f = F_0^{(1)}(x_f); \quad \delta\eta_f(\omega) = \delta F_0^{(1)}(x_f)/(1 + i\omega), \quad (4.4)$$

і двочастинковому наближеннях

$$\vec{\eta} = \hat{A}^{-1}(0)\vec{C}, \quad \delta\vec{\eta}(\omega) = \hat{A}^{-1}(i\omega) \left(\delta\vec{C}_\omega - \delta\hat{A}_\omega(i\omega)\vec{\eta} \right), \quad (4.5)$$

$$\hat{A}(i\omega) = \hat{A}(y_1, y_2, i\omega), \quad \vec{C} = \vec{C}(y_1, y_2).$$

Упохіднивши динамічний розв'язок (4.4) і (4.5) по зовнішньому полю $\beta h(\omega)$, отримуємо систему рівнянь для η'_f в одно- і двочастинковому наближеннях:

$$\eta'_i(\omega) = F_i^{(2)}(\omega) \cdot \beta x'_i(\omega), \quad F_i^{(n)}(\omega) = F_0^{(n)}(x_i)/(1 + i\omega), \quad (4.6)$$

$$\vec{\eta}'(\omega) = \sum_{i=1}^2 \left(\frac{\partial \vec{\eta}(\omega)}{\partial(\beta y_i(\omega))} \right)_{y_i(\omega)=y_i} \frac{\partial(\beta y_i(\omega))}{\partial(\beta h(\omega))} = \sum_{i=1}^2 \left(\frac{\Omega_{1i}(\omega)}{\Omega_{2i}(\omega)} \right) \beta y'_i(\omega), \quad (4.7)$$

$$\begin{pmatrix} \Omega_{1i}(\omega) \\ \Omega_{2i}(\omega) \end{pmatrix} = \hat{A}^{-1}(i\omega) \left(\frac{\partial \vec{C}}{\partial(\beta y_i)} - \frac{\partial \hat{A}(i\omega)}{\partial(\beta y_i)} \vec{\eta} \right).$$

В гаусовому наближенні по динамічних змінних $x'_i(\omega)$, $y'_i(\omega)$ нам потрібні додаткові рівняння для другого моменту:

$$Q_i(\omega) = 1 - \eta_i^2(\omega), \quad Q'_i(\omega) = -2\eta_i \cdot \beta\eta'_i(\omega).$$

Вирази для $Q'_i(\omega)$ в одно- і двочастинковому наближенні запишемо у вигляді:

$$Q'_i(\omega) = F_i^{(3)}(\omega) \cdot \beta x'_i(\omega), \quad (4.8)$$

$$Q'_i(\omega) = \Omega_{Q,i1}(\omega) \cdot \beta y'_1(\omega) + \Omega_{Q,i2}(\omega) \cdot \beta y'_2(\omega), \quad (4.9)$$

$$\Omega_{Q,i1}(\omega) = -2\eta_i \Omega_{i1}(\omega), \quad \Omega_{Q,i2}(\omega) = -2\eta_i \Omega_{i2}(\omega).$$

Будемо вважати далекосяжні взаємодії слабофлуктуючими і врахуємо їх в наближенні середнього поля. Це приводить до перенормування поля $h_i \rightarrow h_i + \varphi_{Li}$.

Для врахування антисегнетоелектричного стану розіб'ємо ґратку на елементарні комірки з двома вузлами, що здійснюється заміною індексів: $i \rightarrow if$. Після усереднення по конфігураціях рівняння (4.6)-(4.9) при $f=1$ мають вигляд:

$$\bar{\eta}'(\omega) = \bar{F}^{(2)}(\omega)[1 + z\beta\varphi'(\omega) + J\beta\bar{\eta}'(\omega)] + \bar{F}^{(3)}(\omega)\frac{\beta^2}{2}zq'(\omega), \quad (4.10)$$

$$\bar{\eta}'(\omega) = \bar{\Omega}(\omega)[1 + z_1\beta\varphi'(\omega) + J\beta\bar{\eta}'(\omega)] + \bar{\Omega}'(\omega)\frac{\beta^2}{2}z_1q'(\omega), \quad (4.11)$$

$$\bar{Q}'(\omega) = \bar{F}^{(3)}(\omega)[1 + z\beta\varphi'(\omega) + J\beta\bar{\eta}'(\omega)] + \bar{F}^{(4)}(\omega)\frac{\beta^2}{2}zq'(\omega), \quad (4.12)$$

$$\bar{Q}'(\omega) = \bar{\Omega}_Q(\omega)[1 + z_1\beta\varphi'(\omega) + J\beta\bar{\eta}'(\omega)] + \bar{\Omega}'_Q(\omega)\frac{\beta^2}{2}z_1q'(\omega). \quad (4.13)$$

Тут введені позначення (знак “-” відповідає антисегнетоелектричному впорядкуванню):

$$\bar{F}^{(i)}(\omega) = \left\langle F_1^{(i)}(\omega) \right\rangle_c,$$

$$\bar{\Omega}(\omega) = \bar{\Omega}_{11}(\omega) + \bar{\Omega}_{12}(\omega), \quad \bar{\Omega}'(\omega) = \bar{\Omega}'_{11}(\omega) \pm \bar{\Omega}'_{12}(\omega),$$

$$\bar{\Omega}_Q(\omega) = \bar{\Omega}_{Q,11}(\omega) + \bar{\Omega}_{Q,12}(\omega), \quad \bar{\Omega}'_Q(\omega) = \bar{\Omega}'_{Q,11}(\omega) \pm \bar{\Omega}'_{Q,12}(\omega),$$

$$\beta \langle x'_1(\omega) \rangle_c = 1 + z\beta\varphi'(\omega) + \beta J\bar{\eta}'(\omega), \quad \langle x_1 \cdot x'_1(\omega) \rangle_c^{cum} = zq'(\omega)/2.$$

$$\beta \langle y'_1(\omega) \rangle_c = 1 + z_1\beta\varphi'(\omega) + \beta J\bar{\eta}'(\omega), \quad \langle y_1 \cdot y'_1(\omega) \rangle_c^{cum} = z_1q'(\omega)/2.$$

А також

$$\bar{\Omega}_{ff'}(\omega) = \langle \Omega_{ff'}(\omega) \rangle_c, \quad \bar{\Omega}'_{ff'}(\omega) = \left\langle \frac{\partial \Omega_{ff'}(\omega)}{\partial (\beta y_{ff'})} \right\rangle_c,$$

$$\bar{\Omega}_{Q,ff'}(\omega) = \langle -2\eta_f \Omega_{ff'}(\omega) \rangle_c, \quad \bar{\Omega}'_{Q,ff'}(\omega) = \left\langle \frac{\partial \Omega_{Q,ff'}(\omega)}{\partial (\beta y_{ff'})} \right\rangle_c,$$

$$\frac{\partial}{\partial (\beta y_{ff})} \left(\begin{array}{c} \Omega_{1f}(\omega) \\ \Omega_{2f}(\omega) \end{array} \right) =$$

$$= \hat{A}^{-1}(i\omega) \left(\frac{\partial^2 \vec{C}}{\partial (\beta y_{ff})^2} - \frac{\partial^2 \hat{A}(0)}{\partial (\beta y_{ff})^2} \vec{\eta} - \frac{\partial \hat{A}(0)}{\partial (\beta y_{ff})} \right) \times \\ \times \left(\hat{A}^{-1}(i\omega) + \hat{A}^{-1}(0) \right) \left(\frac{\partial \vec{C}}{\partial (\beta y_{ff})} - \frac{\partial \hat{A}(0)}{\partial (\beta y_{ff})} \vec{\eta} \right),$$

$$\frac{\partial \Omega_{Q,ff'}(\omega)}{\partial (\beta y_{ff'})} = -2 \left(\frac{\partial \eta_f}{\partial (\beta y_{ff'})} \Omega_{Q,ff'}(\omega) + \eta_f \frac{\partial \Omega_{ff'}(\omega)}{\partial (\beta y_{ff'})} \right),$$

$$\frac{\partial \vec{\eta}}{\partial (\beta y_{ff})} = \hat{A}^{-1}(0) \left(\frac{\partial \vec{C}}{\partial (\beta y_{ff})} - \frac{\partial \hat{A}(0)}{\partial (\beta y_{ff})} \vec{\eta} \right),$$

Прирівняємо (4.10) і (4.11), а також (4.12) і (4.13). Отримаємо разом із (4.10) систему трьох рівнянь для $\bar{\eta}'(\omega)$, $\varphi'(\omega)$, $q'(\omega)$, яка подібна до (3.5):

$$\left[1 - \bar{F}^{(2)}(\omega)\beta J \right] \bar{\eta}'(\omega) = \bar{F}^{(2)}(\omega) [1 + z\beta\varphi'(\omega)] + \frac{\beta^2}{2} \bar{F}^{(3)}(\omega) zq'(\omega), \\ \left[z\bar{F}^{(2)}(\omega) - z_1\bar{\Omega}(\omega) \right] \beta\varphi'(\omega) + \frac{\beta^2}{2} \left[z\bar{F}^{(3)}(\omega) - z_1\bar{\Omega}'(\omega) \right] q'(\omega) = \\ = \left[-\bar{F}^{(2)}(\omega) + \bar{\Omega}(\omega) \right] \cdot [1 + \beta J\bar{\eta}'(\omega)], \quad (4.14) \\ \left[z\bar{F}^{(3)}(\omega) - z_1\bar{\Omega}_Q(\omega) \right] \beta\varphi'(\omega) + \frac{\beta^2}{2} \left[z\bar{F}^{(4)}(\omega) - z_1\bar{\Omega}'_Q(\omega) \right] q'(\omega) = \\ = \left[-\bar{F}^{(3)}(\omega) + \bar{\Omega}_Q(\omega) \right] [1 + \beta J\bar{\eta}'(\omega)].$$

Розв'язавши (4.14), знаходимо вираз для динамічної сприйнятливості, який при $\omega = 0$ переходить у вираз (3.7):

$$\chi(\omega) = \beta\bar{\eta}'(\omega) = -\beta [D(\omega)/B(\omega) - \beta J]^{-1}, \quad (4.15)$$

$$D(\omega) = \left[z\bar{F}^{(2)}(\omega) - z_1\bar{\Omega}(\omega) \right] \left[z\bar{F}^{(4)}(\omega) - z_1\bar{\Omega}'_Q(\omega) \right] - \\ - \left[z\bar{F}^{(3)}(\omega) - z_1\bar{\Omega}'(\omega) \right] \left[z\bar{F}^{(3)}(\omega) - z_1\bar{\Omega}_Q(\omega) \right], \\ B(\omega) = \bar{F}^{(2)}(\omega)\bar{\Omega}(\omega) \left[z\bar{F}^{(4)}(\omega) - z_1\bar{\Omega}'_Q(\omega) \right] + \\ + z_1\bar{F}^{(2)}(\omega)\bar{\Omega}_Q(\omega)\bar{\Omega}'(\omega) - z \left[\bar{F}^{(3)}(\omega) \right]^2 \bar{\Omega}(\omega).$$

Проаналізуємо тепер результати чисельних розрахунків $\chi(\omega)$ на основі виразу (4.15). На рис.10 представлена температурна залежність

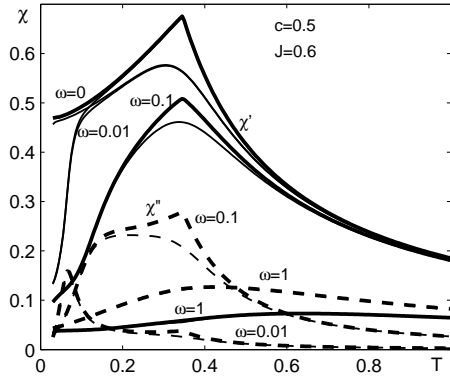


Рис. 10. Температурна залежність дійсної (суцільні лінії) і уявної (штрихові лінії) частин сприйнятливості в моделі $k=(-1,1)$ при $z=6$, $Q_g=0$ (товсті лінії), 0.1 (тонкі лінії) при різних частотах у стані протонного скла ($c=0.5$).

сприйнятливості для моделі на кубічній ґратці для симетричного розподілу короткодії $k=(-1,1)$ і з різними розподілами внутрішніх полів $Q_g=0, 0.1$ при $c = 0.5$ (стан протонного скла при всіх T). Дійсна частина сприйнятливості $\chi'(\omega, T)$ при $\omega=0$ (статична сприйнятливість) і при малих частотах ($\omega=0.01$) на рис.10 відрізняються лише при низьких температурах і мають пік в точці T_g . Малі випадкові поля ($Q_g=0.1$) приводять до суттєвого згладжування піку $\chi'(\omega, T)$, $\chi''(\omega, T)$ в околі T_g . При $\omega \neq 0$ пік уявної частини $\chi''(\omega \rightarrow 0, T)$ відповідає точці перегину дійсної частини $\chi'(\omega \rightarrow 0, T)$. Нижче цієї температури (точки заморожування) в системі існують процеси з дуже великими часами релаксації. При цьому мають місце наступні співвідношення для ефективного часу релаксації $\langle \tau_{eff} \rangle$ (рис.11):

$$\langle \tau_{eff} \rangle = -i\chi(0) \lim_{\omega \rightarrow 0} T_0 \frac{\partial}{\partial \omega} \chi^{-1}(\omega); \quad Re \langle \tau_{eff} \rangle \xrightarrow{T \rightarrow 0} \tau_0 \exp\left(\frac{E}{T}\right). \quad (4.16)$$

$$Re \langle \tau_{eff} \rangle \rightarrow \infty, \quad Im \langle \tau_{eff} \rangle \rightarrow \infty; \quad Im \langle \tau_{eff} \rangle / Re \langle \tau_{eff} \rangle \ll 1.$$

Таким чином, в досліджуваній моделі в кластерному наближенні при $T \rightarrow 0$ температурний хід $Re \langle \tau_{eff} \rangle$ описується співвідношенням Ареніуса (4.16).

При $c = 0.8$ в моделі при пониженні температури при T_c відбувається фазовий перехід з високотемпературної фази протонного

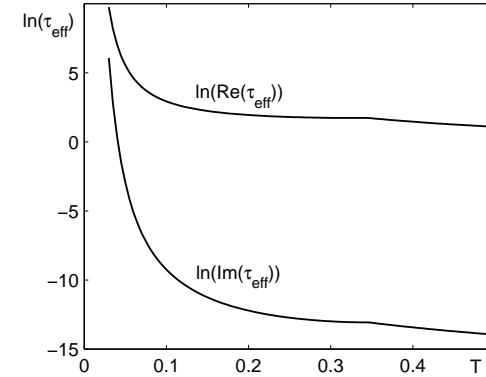


Рис. 11. Температурна залежність дійсної і уявної частини ефективного часу релаксації в моделі $k=(-1,1)$ при $z=6$, $Q_g=0$ у стані протонного скла ($c=0.5$).

скла ($\eta = 0$, $Q \ll 1$) до неоднорідної сегнетоелектричної фази ($\eta > 0$, $Q > 0$) (рис.12). В точці переходу $\chi'(\omega = 0, T)$ має місце розрив (пере-

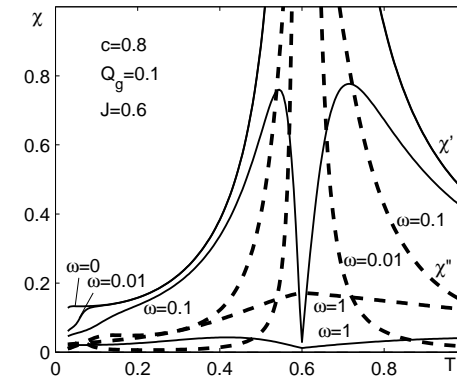


Рис. 12. Температурна залежність дійсної (суцільна лінія) і уявної (штрихова) частин сприйнятливості в моделі $k=(-1,1)$ при $z=6$, $Q_g=0.1$. Перехід з високотемпературного стану протонного скла у сегнетоелектричний стан при різних частотах ($c=0.8$).

хід другого роду), а $\chi'(\omega \neq 0, T)$ занулюється (для частоти $\omega = 0.01$

на рис.12 область занулення не відображена). Уявна частина $\chi''(\omega, T)$ в точці T_c має температурний пік, ширина якого збільшується при збільшенні частоти, а також низькотемпературний пік, який відповідає лінії заморожування.

В реальних протонних склах в матеріалах типу $\text{Rb}_{1-x}(\text{NH}_4)_x\text{H}_2\text{PO}_4$ можливі відхилення від стехіометрії в об'ємі зразка. Ми змоделювали цей макроскопічний концентраційний безлад шляхом усереднення динамічної сприйнятливості $\chi(\omega, T, c)$ по концентраціях c з гаусівським розподілом з дисперсією $q_c = 0.004 \cdot c(1 - c)$. Як видно з рис.13, незначні флуктуації заданої концентрації $c = 0.8$ приводять до значного зменшення піків в області фазового переходу як для дійсної $\langle \chi'(\omega, T, c) \rangle_c$, так і для уявної частин $\langle \chi''(\omega, T, c) \rangle_c$ сприйнятливостей. При цьому занулення $\langle \chi'(\omega, T, c) \rangle_c$ в області фазового переходу вже відсутнє, а сама область переходу суттєво розмивається.

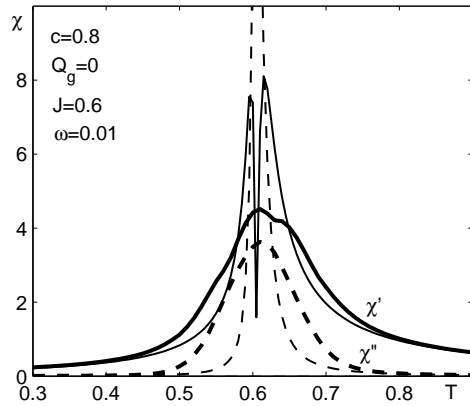


Рис. 13. Температурна залежність дійсної (суцільні лінії) і уявної (штрихові лінії) частин сприйнятливості в моделі $k=(-1,1)$ при $z=6$, $Q_g=0$ при частоті $\omega=0.01$ і середній концентрації $c=0.8$. Товсті лінії відповідають флуктуаціям концентрацій з дисперсією $q_c = 0.004 \cdot c(1 - c)$.

При $c=0.2$ при зниженні температури при T_N відбувається фазовий перехід з високотемпературної фази протонного скла ($\eta = 0$, $Q \ll 1$) до антисегнетоелектричної фази ($\eta > 0$, $Q > 0$) (рис.14). В точці переходу сприйнятливості $\chi'(\omega = 0, T)$ скінченна і має злам. Уявна частина $\chi''(\omega, T)$ має низькотемпературний пік, що відповідає лінії заморожування.

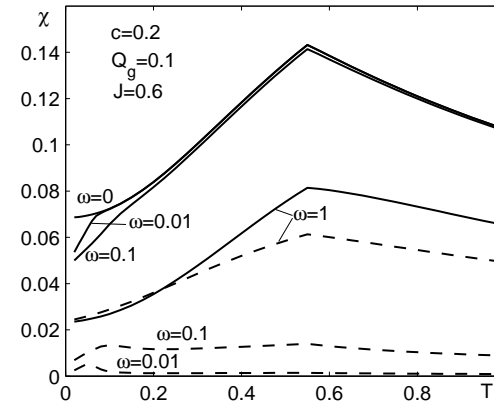


Рис. 14. Температурна залежність дійсної (суцільні лінії) і уявної (штрихові лінії) частин сприйнятливості в моделі $k=(-1,1)$ при $z=6$, $Q_g=0.1$. Перехід з високотемпературного стану протонного скла у антисегнетоелектричну фазу ($c=0.2$).

На рис.15-17 зображені частотні залежності сприйнятливості моделі при різних температурах для $c=0.2, 0.5, 0.8$. Як видно з рисунків, при високих температурах частотна залежність комплексної сприйнятливості $\chi(\omega, T)$ близька до дебаєвської. При низьких температурах дебаєвська залежність зникає. В уявній частині сприйнятливості чітко спостерігається двошківа структура спектру. В антисегнетофазі низькочастотний пік слабше виражений. Ми вважаємо, що низькочастотний пік відповідає процесам з великими часами релаксації. Для чистих систем ($c=1, 0$) цей пік не спостерігається.

Двошківа структура проявляється також на кривих Коула-Коула (рис.18-20).

Приведемо тепер фазову діаграму моделі $k=(-1,1)$ при $z=6$ з врахуванням лінії заморожування (рис.21). Як видно з рис.21, верхня границя перехідної області (inflection points) при низьких частотах практично не залежить від частоти. В нашій моделі при $c \rightarrow 1$ лінія заморожування прямує до певного значення, хоча в протонних склах типу $\text{Rb}_{1-x}(\text{NH}_4)_x\text{H}_2\text{PO}_4$ лінія заморожування прямує до нуля при $c \rightarrow 1$. Ця невідповідність може бути пов'язана з певними наближеннями (гаусів розподіл кластерних полів, нехтування флуктуаціями далекодії), які використовуються при розрахунках. Певну роль також можуть зіграти включення фаз протонного скла у

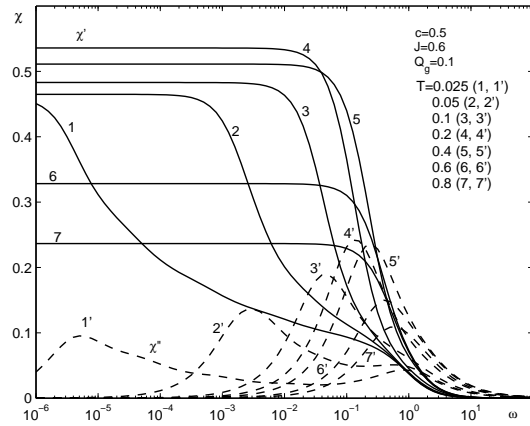


Рис. 15. Частотна залежність дійсної (суцільні лінії) і уявної (штрихові лінії) частин сприйнятливості в моделі $k=(-1,1)$ при $z=6$, $Q_g=0.1$ у стані протонного скла ($c=0.5$) при різних температурах.

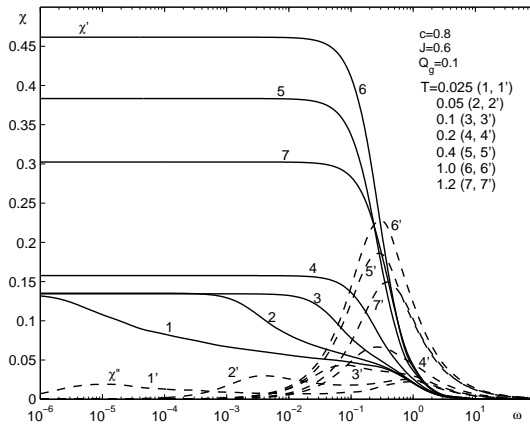


Рис. 16. Частотна залежність дійсної (суцільні лінії) і уявної (штрихові лінії) частин сприйнятливості в моделі $k=(-1,1)$ при $z=6$, $Q_g=0.1$ у сегнетоелектричній фазі ($c=0.8$) при різних температурах.

сегнетоелектричну матрицю, які спостерігаються в матеріалах типу $Rb_{1-x}(NH_4)_xH_2PO_4$ і які не враховані в даній моделі.

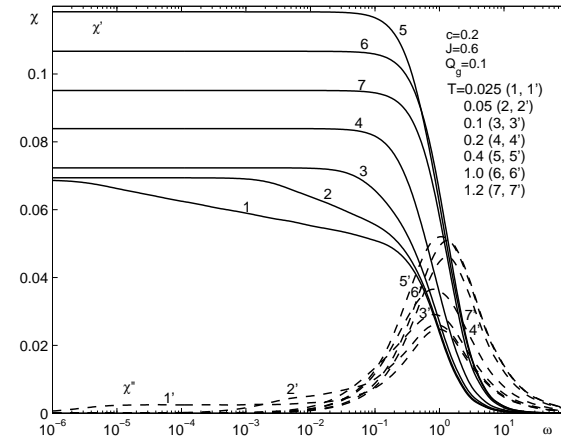


Рис. 17. Частотна залежність дійсної (суцільні лінії) і уявної (штрихові лінії) частин сприйнятливості в моделі $k=(-1,1)$ при $z=6$, $Q_g=0.1$ у антисегнетоелектричній фазі ($c=0.2$) при різних температурах.

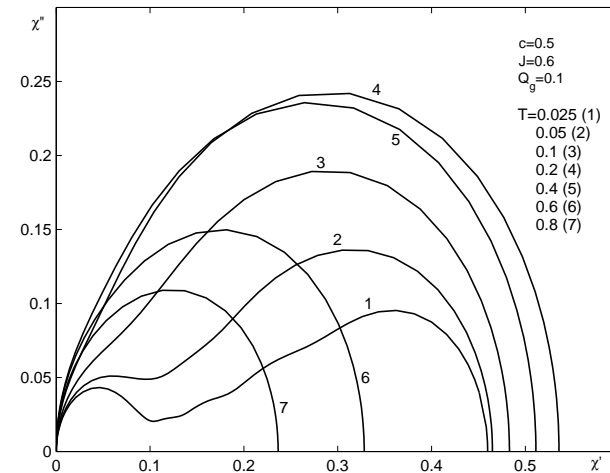


Рис. 18. Криві Коула-Коула в моделі $k=(-1,1)$ при $z=6$, $Q_g=0.1$ у стані протонного скла ($c=0.5$) при різних температурах.

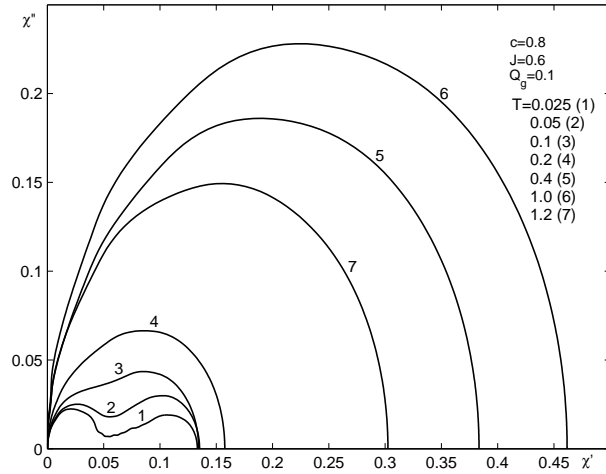


Рис. 19. Криві Коула-Коула в моделі $k=(-1,1)$ при $z=6$, $Q_g=0.1$ у сегнетоелектричній фазі ($c=0.8$) при різних температурах.

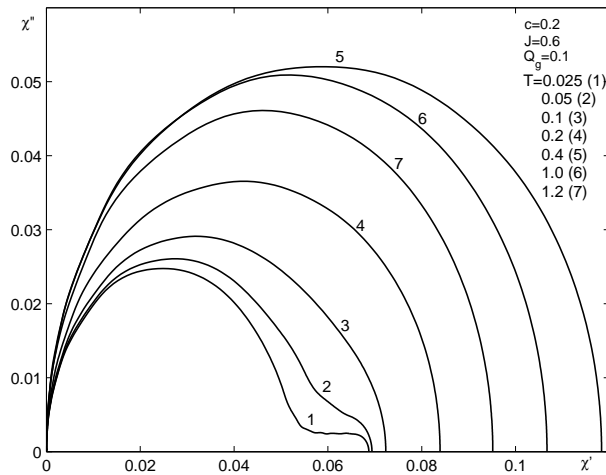


Рис. 20. Криві Коула-Коула в моделі $k=(-1,1)$ при $z=6$, $Q_g=0.1$ у антисегнетоелектричній фазі ($c=0.2$) при різних температурах.

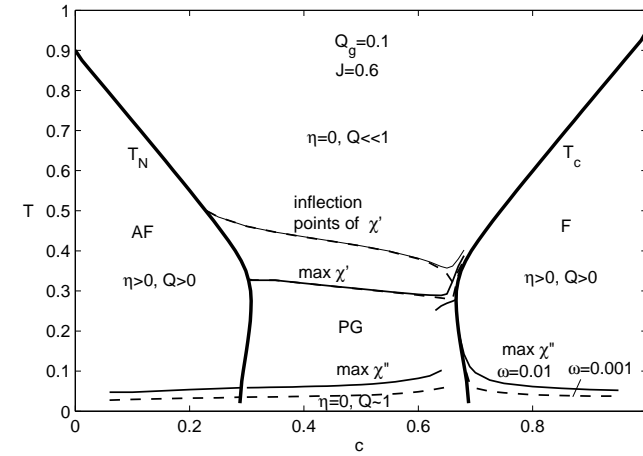


Рис. 21. Фазова діаграма моделі $k=(-1,1)$ при $z=6$, $J=0.6$, $Q_g=0.1$. Лінії заморожування побудовані на основі максимуму уявної частини сприйнятливості $\chi''(T, \omega)$ при низьких частотах $\omega=0.01$; 0.001 .

5. Висновки

В даній роботі для моделі Ізінга з конкуруючими взаємодіями в наближенні двочастинкового кластера отримано інтегральне рівняння для функцій розподілу ефективних кластерних полів. Встановлено, що вільна енергія, розрахована з використанням гаусової функції розподілу і отриманої з інтегрального рівняння практично співпадають. Оскільки час розрахунку з гаусовою функцією розподілу на два порядки менший, то саме її варто використовувати для розрахунків фізичних характеристик моделі.

Для простої моделі протонного скла в наближенні двочастинкового кластера за випадковими короткосяжними взаємодіями (перша координаційна сфера) з гаусовим розподілом кластерних полів, в наближенні середнього поля за слабкими далекосяжними взаємодіями і з врахуванням випадкового внутрішнього поля розраховано параметр порядку, параметр Едвардса-Андерсона, ентропію, теплоємність, статичну сприйнятливості, а також побудовано фазову діаграму. Встановлено, що фазові переходи із пара- та склофаз в сегнетофазу та антисегнетофазу є переходами другого роду. Використання гаусового розподілу констант взаємодії k замість розподілу

$k=(-1,1)$ з однаковою дисперсією k понижує температуру переходу T_g з парафази в склофазу. Врахування далекосяжної взаємодії призводить до розширення областей сегнето- та антисегнетофаз, але не впливає на температуру T_g .

Показано, що в даній моделі внутрішнє хаотичне поле розмиває перехід з парафази в склофазу та формує стан високотемпературного протонного скла ($\eta = 0$, $Q \ll 1$). Побудовано фазову діаграму для випадку симетричної $k=(-1,1)$ і асиметричної $k=(-0.5,1)$ короткодії при різних параметрах випадкового внутрішнього поля. На ній відмічено області переходу з фази $\eta = 0$, $Q \ll 1$ до фази низькотемпературного протонного скла ($\eta = 0$, $Q \sim 1$), а також до неоднорідних сегнето- і антисегнетоелектричної фаз ($\eta \neq 0$, $Q \neq 1$).

В рамках методу Глаубера запропоновано кластерне наближення для динамічної сприйнятливості запропонованої моделі. Встановлено, що в даній моделі в стані протонного скла динаміка має характер близький до дебаєвської релаксації тільки при високих температурах. При цьому в нашій моделі при $T \rightarrow 0$ температурний хід дійсної частини ефективного часу релаксації описується співвідношенням Арреніуса. На температурній залежності уявної частини сприйнятливості у фазі протонного скла і у сегнето- та антисегнетофазі спостерігається низькотемпературний пік, який зміщується до вищих температур при збільшенні частоти. В області переходу до сегнетофазі продемонстровано суттєве згладження температурних піків дійсної і уявної частин сприйнятливості за рахунок малих макроскопічних флуктуацій концентрацій конкуруючих взаємодій. Побудована фазова діаграма для симетричної моделі $k=(-1,1)$ з врахуванням ліній заморожування.

Література

1. Edwards S.F., Anderson P.W. Theory of spin glasses. // J.Phys. F. Metal. Phys. – 1975.–Vol. 5. – P. 965-974.
2. Sherrington D., Kirkpatrick S. Solvable Model of Spin Glass. // Phys.Rev. Lett. – 1975.–Vol. 35. – P. 1792-1796.
3. Kirkpatrick S., Sherrington D. Infinite-Ranged Model of Spin-Glasses. // Phys.Rev B. – 1978.–Vol. 17, N 11. – P. 4384-4403.
4. Parisi G. The order parameter for spin glasses: A function on the interval 0-1. // J. Phys A. – 1980.–Vol. 13. – P. 1101-1112.
5. Matsubara F., Sakata M. Theory of Random Magnetic Mixture. III. Glass-Like phase. // Progr.Theor.Phys. – 1976.–Vol. 55, N. 3. – P. 672-682.

6. Morita T. Spin-glass and ferromagnetic phases on the random-bond Ising model on the Bethe lattice // Physica 125A. – 1984. – P. 321-343.
7. Katsura S. Theory of Spin Glass by the Method of the Distribution Function of an Effective Field // Progress of Theoretical Physics Supplement No. – 1986. – Vol. 87. – P. 139- 154.
8. Sasaki M., Katsura Sh. The Distribution Function of the Effective Field of the Ising Spin Glass on the Bethe Lattice for the Coordination Number $z=4,5,6$. // Physica A. – 1989. – Vol. 155. – P. 206-220.
9. Sasaki M., Katsura Sh. The Assymmetric Continuous Distribution Function of the Effective Field of the Ising Spin Model in the Spin Glass and Ferromagnetic States on the Bethe Lattice. // Physica A. – 1989.–Vol. 157. – P. 1195- 1202.
10. Mezard M., Parisi G. The Bethe Lattice Spin Glass Revisited. // Eur.Phys B. – 2001.–Vol. 20. – P. 217-233.
11. Liers F., Palassini M., Hartmann A.K., Junger M. Ground State of the Bethe-lattice Spin Glass and Running Time of an exact optimization. // Phys. Rev B. – 2003.–Vol. 68. – P. 094406 - 094406.
12. Kinzel W., Fischer K.H. Dynamics of spin glasses // Solid State Commun. – 1977. – Vol. 23. – P. 687-690.
13. Bray A.J., Moore M.A., Red P. Dynamics of Ising spin glasses // J. Phys. C: Solid State Phys. – 1979. – Vol. 12. – L477-L483.
14. S. Jimenez, V. Martin-Mayor, G. Parisi, A. Tarancon. Aging in Spin Glasses in three, four and infinite dimensions // J. Phys. A: Math. and Gen. – 2003. – Vol. 36. – P. 10755 - 10771.
15. Szamel G. Glauber dynamics of the SK model: theory simulations in the low-temperature phase // J. Phys. A: Math. Gen. – 1998. – Vol. 31. – P. 10053I10063.
16. Picco M., Ricci-Tersenghi F., Ritort F. Aging effects and dynamic scaling in the 3D Edwards-Anderson spin glasses: a comparison with experiments // Eur. Phys. J. B. – 2001. – Vol. 21. – P. 211-217.
17. Rao F., Crisanti A., Ritort F. Frequency-domain study of relaxation in a spin glass model for the structural glass transition // Europhys. Lett. – 2003. – Vol. 62. – P. 869-875.
18. Dobrosavljevic V., Stratt R.M. Mean-field theory of the proton glass // Phys. Rev. B. – 1987. – Vol. 36, No.16. – P. 8484-8496.
19. Tadic B., Pirc R., Blinc R. Isotope effect and pressure dependence of the freezing temperature in proton glasses // Phys. Rev. B. – 1988. – Vol. 37, No.1. – P. 679-682.
20. Pirc R., Tadic B., and Blinc R. Random-Field Smearing of the

- Proton-Glass Transition. // Phys.Rev.B. – 1987. – Vol. 36, N 16. – P. 8607-8615.
21. Kim D.H., Kim J.J. Replica Symmetric Solution of Random Field Tunneling Model for Proton Glasses. // Ferroelectrics. – 2002.–Vol. 268. – P. 263-268.
 22. R. Blinc, J. Dolinsek, B. Zalar. Low temperature properties of proton and deuteron glasses // Z. Phys. B. – 1997. – Vol. 104. – P. 629–634.
 23. Cevc P., Zalar B., and Blinc R. EPR study of random field smearing of the proton glass transition in Tl^{2+} doped $Rb_{1-x}(NH_4)_xH_2PO_4$. // Solid state Comm. – 1989. – Vol. 70, N 4. – P. 461-464.
 24. Blinc R., Dolinsek J., Pirc R., Tadic B., Zalar B., Kind R., Liechti O. Local-polarization Distribution in Deuteron Glasses. // Phys. Rev. Lett. – 1989. – Vol. 63, N 20. – P. 2248-2251.
 25. Chen S., Ailion D.C. NMR determination of the Edwards-Anderson order parameter in the deuterated pseudo-spin-glass $Rb_{1-x}(ND_4)_xD_2PO_4$: Anisotropy and concentration dependence of the ND_4^+ deuteron second moment // Phys.Rev.B. – 1990. – Vol. 42, N 10. – P. 5945-5952.
 26. Pirc R., Tadic B., Blinc R., Kind R. Dynamic approach to local-polarization distribution and NMR line shape in deuteron glasses. // Phys. Rev. B. – 1991. – Vol. 43, No.4. – P. 2501-2510.
 27. Kind R., Blinc R., Dolinsek J., Korner N., Zalar B., Cevc P., Dalal N., DeLooze J. Tl^{2+} EPR study of the dynamics of the proton-glass transition in $Rb_{1-x}(NH_4)_xH_2PO_4$. //Phys.Rev.B. – 1991. – Vol. 43, N 4. – P. 2511-2518.
 28. Crokidakis N., Nobre F.D. Ising spin glass under continuous-distribution random magnetic fields: Tricritical points and instability lines // Phys. Rev. E. – 2008. – Vol. 77. – P. 041124 (9).
 29. Banerjee V., Dattagupta S. Dielectric relaxation in a deuteron glass. // Phys.Rev B. – 2003. – Vol. 68. – P. 054202.
 30. Levitskii R.R., Sorokov S.I., Vdovych A.S. Spin model with different types of competing interactions. // Ferroelectrics. – 2005. – Vol. 316. – P. 111-119.
 31. Sorokov S.I., Levitskii R.R., Vdovych A.S. Spin-glass model with essential short-range competing interactions. // Condens. Matter Phys. – 2005, – Vol. 8, N 3(43). – P. 603-622.
 32. Levitskii R.R., Sorokov S.I., Stankowski J., Trybula Z., Vdovych A.S. Thermodynamics and complex dielectric permittivity of mixed crystals of the $Rb_{1-x}(NH_4)_xH_2PO_4$ type. // Condens. Matter Phys. – 2008. Vol. 11, N 3(55), – P. 523-542.
-

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN:

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- "Referativnyi Zhurnal"
- "Dzherelo"

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk, *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Freiburg*; R. Folk, *Linz*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch, *Lviv*; M. Holovko, *Lviv*; O. Ivankiv, *Lviv*; W. Janke, *Leipzig*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; H. Krienke, *Regensburg*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod, *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; N. Plakida, *Dubna*; G. Röpke, *Rostock*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; M. Vavruk, *Lviv*; A. Zagorodny, *Kyiv*

CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2760908; Fax: +38(032)2761978
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>