

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-05-01U

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

МОДЕЛЬ СПІНОВОГО СКЛА З СУТТЄВИМИ
КОРОТКОСЯЖНИМИ КОНКУРУЮЧИМИ ВЗАЄМОДІЯМИ

ЛЬВІВ

УДК: 532; 533; 533.9:530.182; 536.75; 536-12.01.

PACS: 75.10.Nk, 77.22.ch, 77.84.F

Модель спінового скла з суттєвими короткосяжними конкуруючими взаємодіями

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

Анотація. В межах наближення двохчастинкового кластера для вільної енергії і в рамках реплічно-симетричного підходу вивчається модель протонного скла з різними типами конкуруючих взаємодій. Ми показуємо, 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) ми вивчаємо вплив далекосяжних взаємодій і випадкових внутрішніх полів на фазову діаграму і термодинамічні характеристики. Показано, що малі флуктуації внутрішніх полів можуть призвести до суттєвого розмивання області фазового переходу в стан протонного скла. Обговорена можливість застосування даної теорії для опису властивостей протонних стекел типу $\text{Rb}_{1-x}(\text{NH}_4)_x\text{H}_2\text{PO}_4$.

Spin-glass model with essential short-range competing interactions

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

Abstract. We consider a proton-glass model with an arbitrary range of competing interactions within two-particle cluster approximation for the free energy and within symmetric replica approach. We show that for the thermodynamic characteristics, the Gaussian approximation for distribution functions of cluster fields can be used. For a simpler proton-glass model with weak long-range interactions (linear approximation) we study the influence of the long-range interactions and random internal fields on the phase diagram and thermodynamics characteristics. It is shown that small fluctuations of internal fields can lead to essential smearing of proton-glass transition region. The adaptability of theory for description proton-glasses of $\text{Rb}_{1-x}(\text{NH}_4)_x\text{H}_2\text{PO}_4$ -type is discussed.

Подається в Журнал фізичних досліджень

Submitted to Journal of Physical Studies

© Інститут фізики конденсованих систем 2005

Institute for Condensed Matter Physics 2005

1. Вступ

Системи, в яких існує фазовий похід в стан спінового скла, вивчаються біля 30-ти років.

Кристали з водневими зв'язками типу $\text{Rb}_{1-x}(\text{NH}_4)_x\text{H}_2\text{PO}_4$, в яких при низьких температурах реалізується стан протонного скла, інтенсивно вивчаються експериментально [1]- [3] і теоретично [2], [4]- [7] вже більше 10 років.

В перших роботах [4, 5] приймалась до уваги енергетична структура кластера, який складається з тетраедра PO_4 протонів на водневих зв'язках. В наступних роботах використовують прості спінові моделі з безмежним радіусом для середнього значення і дисперсії випадкової взаємодії [2, 6, 7]. Все-таки, адекватне врахування всіх типів взаємодій (як короткосяжних так і далекосяжних) в таких системах до тепер залишається важливою теоретичною проблемою.

Головні особливості систем із спіновим склом можна описати на основі ізінго-подібного гамільтоніана H з випадковими параметрами h_i і k_{ij}

$$H = - \sum_i h_i S_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} k_{ij} S_i S_j \quad (1.1)$$

У випадку ґратки Браве індекси i і j позначають вузли ґратки.

В моделі Шеррінгтона-Кіркпатріка (SK) [8, 9] використовується гаусовий розподіл для k_{ij} , де їхнє середнє значення $\langle k_{ij} \rangle$ і дисперсія (парний кумулянт) $\langle k_{ij}^2 \rangle^{cum}$ не залежать від i, j . Тому ця модель відповідає системі з далекосяжними взаємодіями. Для цієї моделі в рамках реплічно-симетричного підходу отримані фазова діаграма, намагніченність, параметр порядку спінового скла q , ентропія і теплоємність. Проте, обчислена в межах цього підходу ентропія і теплоємність стають від'ємними при низьких температурах. В [10] запропонований розв'язок з порушенням реплічної симетрії для SK моделі, який є стабільний при низьких температурах. Пізніше правильність розв'язку з порушенням реплічної симетрії підтверджена чисельними моделюваннями.

Для опису переходу в спінове скло в системах з водневими зв'язками типу $\text{Rb}_{1-x}(\text{NH}_4)_x\text{H}_2\text{PO}_4$ (протонне скло) необхідно врахувати внутрішні поля з гаусовою дисперсією $\sim x(1-x)$. Ці поля викликані структурним безладом завдяки різниці між іонними радіусами іонів Rb і NH_4 [11]. В [6] показано, що в присутності гаусових випадкових полів з нульовим середнім значенням перехід в протонне скло є розмитий, тобто сприйнятливість є згладжена, а параметр по-

рядку протонного скла залишається скінченним при температурах, вищих від номінальної температури заморожування (межа стабільності реплічно-симетричного розв'язку).

Модель Едвардса-Андерсона [12] враховує тільки взаємодії між найближчими сусідами $k_{ij} = k$. Для k звичайно використовується гаусова функція розподілу або розподіл $P(k) = (1-c)\delta(k+1) + c\delta(k-1)$ (позначення $k = (-1, 1)$). Таку ізінгівську модель зручно вивчати на ґратці Бете, тому що наближення двохчастинкового кластера для вільної енергії на таких ґратках є точне. В [13] для ґратки Бете отримано інтегральне рівняння для функції розподілу $R(\sigma, 1)$ одного ефективного поля φ_{1r} , що діє на вузол 1 з боку найближчого вузла r . В [14] аналітичні розв'язки (з врахуванням перших гармонік Фур'є розвинення) отримані для $T = 0$ і для координаційних чисел $z=4,5,6$ і $c = 0.5$. Ці розв'язки містять δ -функції і симетричну неперервну частину і відповідають стану спінового скла. В [15] асиметричні розв'язки з неперервною частиною знайдені при $T = 0$ для $z=3$, $h=0$ і довільного $c(\delta(\sigma))$ і мають вигляд

$$R(\sigma, 1) = a\delta(\sigma) + \frac{1}{2}[(b + \Delta)\delta(\sigma + 1) + (b - \Delta)\delta(\sigma - 1)] + \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} d_l P_l(\sigma). \quad (1.2)$$

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 змішаному феромагнітному стану. Необхідно зазначити, що для ґратки Бете для чистої феромагнітної фази функція $R(\sigma, 1)$ містить тільки одну $\delta(\sigma - \varphi(T))$ функцію, а в чистій параелектричній фазі $\varphi(T) = 0$.

Значно пізніше Мезард і Парізі [16] врахували перший крок порушення реплічної симетрії (1RSB) для ґратки Бете. Було показано, що попередні результати [13]- [15] відповідають реплічно-симетричному (RS) розв'язку. Недавно [17] ЕА модель для ґратки Бете з гаусовим розподілом констант взаємодії вивчалася чисельно на основі алгоритму, запропонованого в [16]. Різниця між вільною енергією в межах RS і RSB розв'язків є менша ніж 4% для $z=4,6$ (рис.1). Подібний висновок зроблений раніше для розподілу $k = (-1, 1)$. Різниця між RS і 1RSB розв'язками зростає при зростанні z .

Ми 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. Ми очікуємо,

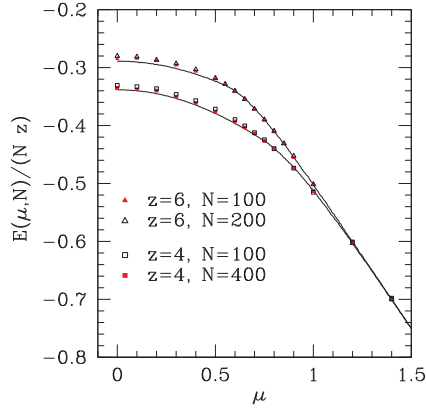


Рис. 1. Енергія і намагніченість основного стану, як функція від $\mu = \langle k \rangle$ [17]. Моделювання на основі 1 кроку RSB в порівнянні з розв'язками інтегрального рівняння в наближенні RS (суцільна лінія).

що така ситуація має місце в системі з водневими зв'язками типу $\text{Rb}_{1-x}(\text{NH}_4)_x\text{H}_2\text{PO}_4$ (протонне скло). В цій суміші тетраедри PO_4 і їх оточення відіграють вирішальну роль у формуванні рівнів енергії системи. Метою даної роботи є обчислення в межах RS термодинамічних характеристик і фазових діаграм ізінгоподібних систем з довільним радіусом конкуруючих взаємодій.

2. Теорія

В наближенні двохчастинкового кластера вільну енергію F можна записати як

$$F = \sum_i F_0(h_i + \sum_{r_i} \varphi_{ir_i}) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j [F_{cl}(h_i + \sum_{r_i \neq j} \varphi_{ir_i} | h_j + \sum_{r_j \neq i} \varphi_{jr_j} | k_{ij}) - F_0(h_i + \sum_{r_i \neq j} \varphi_{ir_i}) - F_0(h_j + \sum_{r_j \neq i} \varphi_{jr_j})]. \quad (2.1)$$

Тут і далі використовуємо позначення

$$\begin{aligned} -\beta F_0(x) &= \ln(2 \cosh(\beta x)), \\ -\beta F_{cl}(x_1 | x_2 | k) &= \ln(2(e^{\beta k} \cosh(\beta x_1 + \beta x_2) + e^{-\beta k} \cosh(\beta x_1 - \beta x_2))). \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$F_0^{(l)}(x) = \frac{\partial^l}{\partial x^l} F_0(x) \quad F_{cl}^{(l,m)}(x_1 | x_2 | k) = \frac{\partial^l}{\partial x_1^l} \frac{\partial^m}{\partial x_2^m} F_{cl}(x_1 | x_2 | k). \quad (2.3)$$

Кластерні поля $\varphi_{ir_i}, \varphi_{jr_j}$ діють на вузли i, j з боку вузлів r_i, r_j різних координаційних сфер. Вони задовільняють рівнянню

$$\beta \varphi_{1r} = \text{Arc tanh}[\tanh(\beta k_{1r}) \tanh(\sum_{k \neq 1} \beta \varphi_{rk})]. \quad (2.4)$$

Розглянемо спочатку однопідграткову систему (еквівалентність всіх вузлів після конфігураційного усереднення). Ми будемо використовувати наступні функції розподілу

$$R_n(\sigma, 1) = \langle \delta(\sigma - \varphi_{1r_n}) \rangle_{conf}, \quad R_n(\sigma, z_n - 1) = \langle \delta(\sigma - \sum_{r_n}^{z_n-1} \varphi_{1r_n}) \rangle_{conf}. \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned} R(\sigma, z_n - 1) &= \\ &= \langle \delta(\sigma - \sum_{r_1}^{z_1} \varphi_{1r_1} - \sum_{r_2}^{z_2} \varphi_{1r_2} \dots - \sum_{r_n}^{z_n-1} \varphi_{1r_n} - \sum_{r_{n+1}}^{z_{n+1}} \varphi_{1r_{n+1}} - \dots) \rangle_{conf}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

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 всіх кластерних полів за виключенням одного поля з n -ої координаційної сфери, z_n є координаційне число n -ої координаційної сфери, $n = 1, \dots, M$. Ми будемо далі нехтувати кореляцією між кластерними полями. Тоді з (2.4)-(2.6) легко знайти співвідношення ($\tilde{R}_n(\zeta, 1)$ - фур'є-образ для $R_n(\sigma, 1)$)

$$\tilde{R}_n(\zeta, 1) = \int d\xi_n \langle e^{i\zeta \beta^{-1} \text{Arc tanh}(\tanh \beta k_n \tanh \beta \xi_n)} \rangle_{k_n} R(\xi_n, z_n - 1), \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} R(\sigma, z_n - 1) &= \\ &= \frac{1}{2\pi} \int d\zeta e^{-i\sigma\zeta} [\tilde{R}_1(\zeta, 1)]^{z_1} \times \dots \times [\tilde{R}_n(\zeta, 1)]^{z_n-1} [\tilde{R}_{n+1}(\zeta, 1)]^{z_{n+1}} \times \dots \end{aligned} \quad (2.8)$$

При врахуванні M координаційних сфер співвідношення (2.7), (2.8) дають M інтегральних рівнянь для M функцій розподілу $R(\sigma, z_n - 1)$. Вільну енергію можна виразити через середні з відповідними функціями розподілу $R(\sigma, z_n - 1)$ і $R(\sigma, z_n) = R(\sigma)$

$$\begin{aligned} F/N &= (1 - z_1) \langle F_0(\sigma) \rangle_{R(\sigma)} + \frac{1}{2} z_1 \langle \langle F_{cl}(\sigma | \sigma' | k_1) \rangle_{k_1} \rangle_{R(\sigma, z_1-1), R(\sigma', z_1-1)} + \\ &+ \sum_{i \geq 2} \frac{1}{2} z_i \langle \langle \langle F_{cl}(\sigma | \sigma' | k_i) \rangle_{k_i} \rangle_{R(\sigma, z_i-1), R(\sigma', z_i-1)} - \langle F_0(\sigma) \rangle_{R(\sigma)} - \langle F_0(\sigma') \rangle_{R(\sigma')} \rangle. \end{aligned} \quad (2.9)$$

На основі (2.4) і (2.6) функцію $R(\sigma)$ можна виразити тільки через $R(\sigma, z_n - 1)$:

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

Ми чисельно розв'язали інтегральне рівняння 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 $R(\sigma, z - 1) = R_1(\sigma, z_1 - 1)$ тепер має вигляд

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

Ми розв'язуємо рівняння методом ітерацій. При цьому в якості затравочної функції (нульового наближення) вибирається гаусівська функція $R^{(0)}(\sigma, z - 1)$ з параметрами $\varphi^{(0)}, q^{(0)}$, які знаходяться з системи

$$\varphi^{(0)} = \langle \sigma \rangle_{R^{(1)}(\sigma, z - 1)}, \quad q^{(0)} = \langle \sigma^2 \rangle_{R^{(1)}(\sigma, z - 1)} - (\varphi^{(0)})^2. \quad (2.12)$$

Тут $R^{(1)}(\sigma, z - 1)$ - вираз для першої ітерації (вираз (2.11), де справа підставлена функція $R^{(0)}(\sigma, z - 1)$). При низьких температурах функції $R^{(i)}(\sigma, z - 1)$, починаючи з першої ітерації, містять δ -подібні піки. Для коректного підрахунку інтегралів від таких функцій ми використовуємо співвідношення між функцією $f(x)$ і її фур'є-образом $\tilde{f}(\zeta)$:

$$f(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\varepsilon} \int_{x-\varepsilon}^{x+\varepsilon} d\sigma f(\sigma) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi\varepsilon} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \tilde{f}(\zeta) e^{-ix\zeta} \frac{\sin(\varepsilon\zeta)}{\zeta}. \quad (2.13)$$

На рис.2 зображені результати 5-ї ітерації для функції $R(\sigma, z - 1)$, результати отримані на основі формул, даних в [15], і гаусової затравочної функції (0-а 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 $t \rightarrow 0$ ($t = T/Tk$) 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.2 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 -

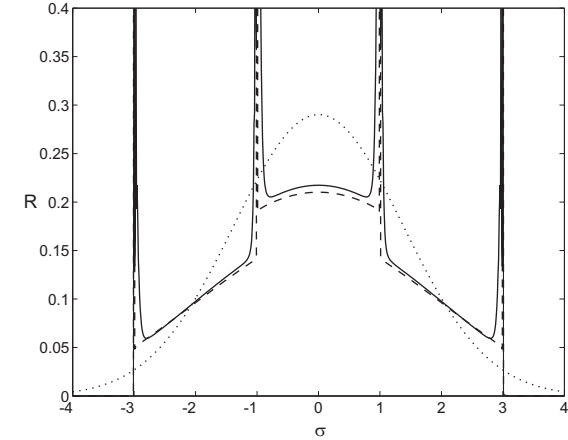


Рис. 2. Функція розподілу $R(\sigma, z - 1)$ для $z=4, c=0.5$ (фаза спінового скла (SG)): затравочна гаусова функція (пунктирна лінія) і 5-а ітерація (суцільна лінія) при $t = 0.021$; аналітичний результат при $t = 0$ (штрихова лінія).

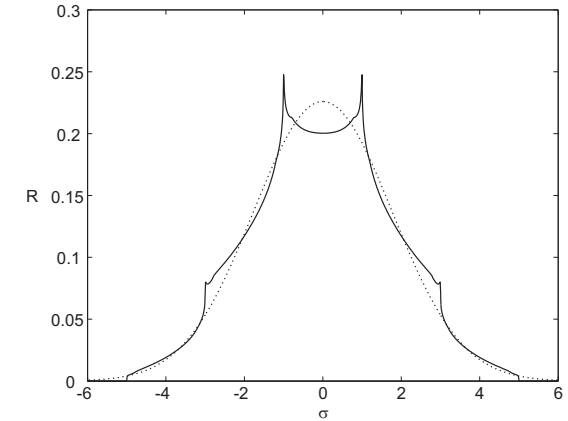


Рис. 3. Функція розподілу $R(\sigma, z - 1)$ для $z=6, c=0.5$ (фаза спінового скла (SG)): затравочна гаусова функція (пунктирна лінія) і 5-а ітерація (суцільна лінія) при $t = 0.1$.

подібні піки можуть спостерігатися тільки при дуже низьких температурах. Вже при $t \sim 0.1$ форма лінії для $R(\sigma, z-1)$ є дуже близька до гаусової функції (рис.3 для $z=6$).

Для $c = 0.95$ функція розподілу кластерних полів є несиметричною функцією σ (рис.4,5). Таким чином, при цих параметрах ($z=4$ $c=0.95$) система є в сегнетоелектричному стані ($\langle \sigma \rangle_{R(\sigma, z-1)} \neq 0$, $\langle \sigma^2 \rangle_{R(\sigma, z-1)}^{cum} \neq 0$).

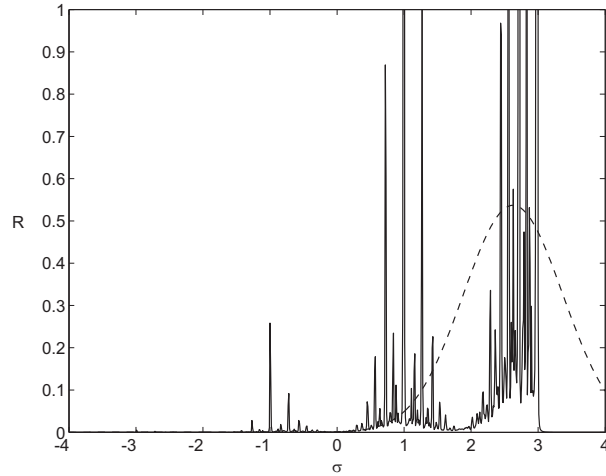


Рис. 4. Функція розподілу $R(\sigma, z-1)$ для $z=4$, $c=0.95$ (сегнетоелектрична (F) фаза): гаусова функція (пунктирна лінія) і 5-а ітерація (суцільна лінія) при $t=0.2$.

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

$$\begin{aligned} t_c &= \left[\text{Arc tanh} \frac{1}{(z-1)(2c-1)} \right]^{-1} \xrightarrow{z \rightarrow \infty} z(2c-1), \\ t_g &= \left[\text{Arc tanh} \frac{1}{\sqrt{z-1}} \right]^{-1} \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \sqrt{z}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Для базисної системи ми показали, що ітераційна процедура для інтегрального рівняння для функцій розподілу $(z-1)$ кластерних полів швидко збігається, якщо використати гаусову форму затра-

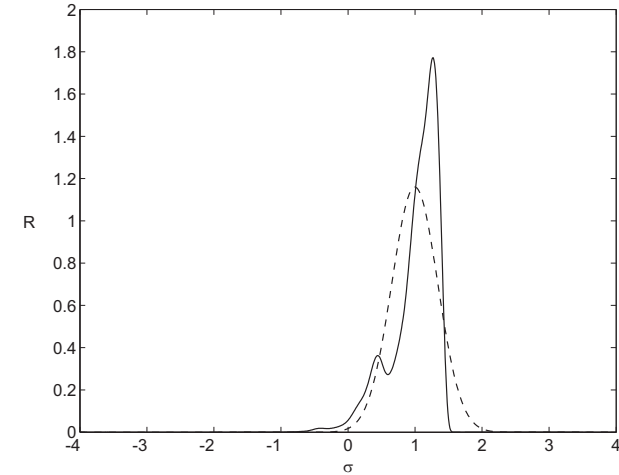


Рис. 5. Порівняння $R(\sigma, z_1-1)$ для $c=0.95$, $Z=4$ (сегнетоелектрична фаза): затравочна функція (гаус) і після 5-ї ітерації для $t=0.6$.

вочної функції (5-а і вищі ітерації не відрізняються). Вільна енергія, обчислена з гаусовою функцією розподілу, що знайдена з умов екстремуму, і вільна енергія, обчислена з функцією розподілу, знайденою з інтегрального рівняння, є близькі (рис.6). Це дозволяє нам використовувати гаусові наближення для всіх функцій розподілу (параметри φ_n, q_n для $R_n(\sigma, 1)$, $(z_n-1)\varphi_n$, $(z_n-1)q_n$ для $R_n(\sigma, z_n-1) = \langle \delta(\sigma - \sum_{r_n=1}^{z_n-1} \varphi_{i_{r_n}}) \rangle$). Таким чином, коли враховано M координаційних сфер, $2M$ рівнянь для $2M$ параметрів можна отримати з умов екстремуму вільної енергії.

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

Розглянемо систему, яка складається з двох підґраток (рис.7) ($f=1$ і $f=2$ після конфігураційного усереднення; вузли 2 з першої координаційної сфери для вузлів 1, і навпаки), і використаємо лінійне наближення для взаємодії з усіма координаційними сферами крім першої. Це відповідає наближенню двохчастинкового кластера для першої координаційної сфери і наближенню середнього поля для інших координаційних сфер.

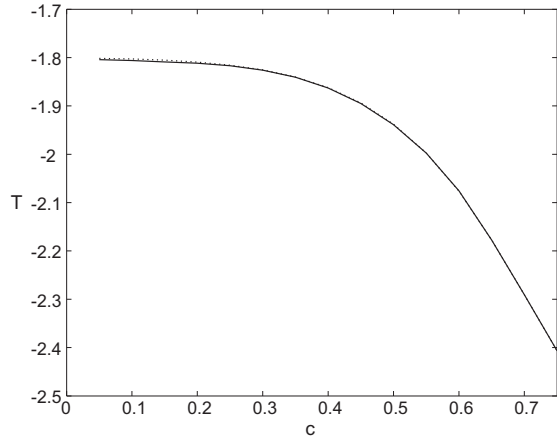


Рис. 6. Температурна залежність вільної енергії $z=4$, $c=0.95$ (сегнетоелектрична (F) фаза): гаусова функція (пунктирна лінія) і 5-а ітерація (суцільна лінія) для $R(\sigma, z_1 - 1)$.

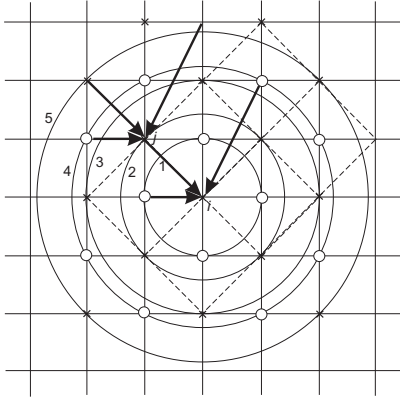


Рис. 7. Ефективні поля, що діють на вузли i, j з боку інших вузлів з різних координаційних сфер (представлено фрагмент ґратки до конфігураційного усереднення). Розглядається модель, яка після усереднення розбивається на дві підґратки (\times - вузли і \circ - вузли).

Вільну енергію на елементарну комірку $\frac{F}{N}$ запишемо (при $h = 0$) як

$$\begin{aligned} \frac{F}{N} = & (1-z)\langle F_0(\sigma+z\varphi_1+\varphi_{L,1}) \rangle_{\tilde{R}_1(\sigma,z)} + (1-z)\langle F_0(\sigma+z\varphi_2+\varphi_{L,2}) \rangle_{\tilde{R}_2(\sigma,z)} \\ & + z\langle \langle F_{cl}(\sigma_1+(z-1)\varphi_1+\varphi_{L,1} | \sigma_2-(z-1)\varphi_2-\varphi_{L,2} | k) \rangle_k \rangle_{\tilde{R}_1(\sigma_1,z-1), \tilde{R}_2(\sigma_2,z-1)} \\ & - \varphi_{L,1}\langle F_0^{(1)}(\sigma+z\varphi_1+\varphi_{L,1}) \rangle_{\tilde{R}_1(\sigma,z)} - \varphi_{L,2}\langle F_0^{(1)}(\sigma+z\varphi_2+\varphi_{L,2}) \rangle_{\tilde{R}_2(\sigma,z)} \\ & + \sum_{f,f'} \bar{k}_{L,ff'} \langle F_0^{(1)}(\sigma+z\varphi_f+\varphi_{L,f}) \rangle_{\tilde{R}_f(\sigma,z)} \langle F_0^{(1)}(\sigma+z\varphi_{f'}+\varphi_{L,f'}) \rangle_{\tilde{R}_{f'}(\sigma,z)}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Тут

$$\varphi_{L,f} = \sum_{i \geq 2} \sum_{f'} z_i \langle \varphi_{i,ff'} \rangle_c, \quad \bar{k}_{L,ff'} = \sum_{i \geq 2} z_i \langle k_{i,ff'} \rangle_c. \quad (2.16)$$

$$\tilde{R}_f(\sigma, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi z q_f}} \exp\left\{-\frac{1}{2} \frac{\sigma^2}{z q_f}\right\}. \quad (2.17)$$

З умови екстремуму $\frac{F}{N}$ знаходимо систему рівнянь для параметрів $\varphi_f, \varphi_{L,f}, q_f$.

В подальшому беремо до уваги тільки сегнетоелектричне і антисегнетоелектричне впорядкування. Для цих випадків можна записати:

$$\begin{aligned} \varphi_1 = \varphi_2 = \varphi, \quad \varphi_{L,1} = \varphi_{L,2} = \varphi_0, \quad q_1 = q_2 = q, \quad J = \bar{k}_{L,11} + \bar{k}_{L,12}, \\ \varphi_1 = -\varphi_2 = \varphi, \quad \varphi_{L,1} = -\varphi_{L,2} = \varphi_0, \quad q_1 = q_2 = q, \quad J_- = \bar{k}_{L,11} - \bar{k}_{L,12}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Умова екстремуму вільної енергії приводить до системи трьох рівнянь для трьох величин: середнього кластерного поля φ і дисперсії q (парний кумулянт) для першої координаційної сфери, середнього кластерного поля φ_0 для інших сфер (для далекосяжних взаємодій). Наприклад, для антисегнетоелектричного впорядкування система рівнянь має вигляд

$$\begin{aligned} \varphi_0 = \langle F_0^{(1)}(\sigma+z\varphi+\varphi_0) \rangle_{\tilde{R}(\sigma,z)} J_-, \\ \langle F_0^{(1)}(\sigma+z\varphi+\varphi_0) \rangle_{\tilde{R}(\sigma,z)} = \\ = \langle \langle F_{cl}^{(10)}(\sigma_1+(z-1)\varphi+\varphi_0 | \sigma_2-(z-1)\varphi-\varphi_0 | k) \rangle_k \rangle_{R(\sigma_1,z-1), R_2(\sigma_2,z-1)}, \\ \langle F_0^{(2)}(\sigma+z\varphi+\varphi_0) \rangle_{\tilde{R}(\sigma,z)} = \\ = \langle \langle F_{cl}^{(20)}(\sigma_1+(z-1)\varphi+\varphi_0 | \sigma_2-(z-1)\varphi-\varphi_0 | k) \rangle_k \rangle_{R(\sigma_1,z-1), R_2(\sigma_2,z-1)}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Вирази для вільної енергії, середнього спіна $m_1 = -m_2$ і квадрату спіна $Q_1 = Q_2 = Q = \langle \langle S_i \rangle_{TERM}^2 \rangle_{conf}$ наступні

$$\begin{aligned} \frac{F}{N} &= 2(1-z)\langle F_0(\sigma + z\varphi + \varphi_0) \rangle_{R(\sigma_1, z)} + \\ &+ z\langle \langle F_{cl}(\sigma_1 + (z-1)\varphi + \varphi_0 | \sigma_2 - (z-1)\varphi - \varphi_0 | k) \rangle_k \rangle_{R(\sigma_1, z-1), R(\sigma_1, z-1)}, \\ &- 2\varphi_0 \langle F_0^{(1)}(\sigma + z\varphi + \varphi_0) \rangle_{R(\sigma_1, z)} + [\langle F_0^{(1)}(\sigma + z\varphi + \varphi_0) \rangle_{R(\sigma_1, z)}]^2 J_-. \end{aligned} \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} m_1 &= \frac{\delta F}{\delta h} = \langle F_0^{(1)}(\sigma + z\varphi + \varphi_0) \rangle_{R(\sigma, z)}, \\ Q_1 = Q_2 &= \langle [F_0^{(1)}(\sigma + z\varphi + \varphi_0)]^2 \rangle_{R(\sigma, z)}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Дисперсія для далекосяжних взаємодій дорівнює нулеві, тому що ми використовуємо лінійне наближення. Таким чином, ці наближення можна використати, якщо стан спінового скла формується в основному завдяки короткосяжним взаємодіям. Врахування дисперсії для вищих координаційних сфер буде предметом наступних досліджень.

3. Обговорення результатів

Ми будемо фазові діаграми і виконуємо чисельний аналіз термодинамічних функцій для наступних типів функцій розподілу взаємодії між найближчими сусідами

$$P(k) = (1-c)\delta(k+\alpha) + c\delta(k-1); \Rightarrow k = (-\alpha, 1), \quad (3.1)$$

$$P_{gauss}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\langle k_1^2 \rangle_{cum}}} \exp\left\{-\frac{(k - \langle k_1 \rangle)^2}{2\langle k_1^2 \rangle_{cum}}\right\}. \quad (3.2)$$

Щоб порівняти результати ми використовуємо наступні співвідношення між гаусовим і $k = (-\alpha, 1)$ розподілами:

$$\langle k_1 \rangle = -\alpha + c(1+\alpha); \quad \langle k_1^2 \rangle = \alpha^2 + c(1-\alpha^2); \quad \langle k_1^2 \rangle_{cum} = \langle k_1^2 \rangle - \langle k_1 \rangle^2. \quad (3.3)$$

Для моделі протонного скла маємо врахувати внутрішні випадкові гаусові поля з нульовим середнім значенням і дисперсією Q_h . Зараз ми маємо зробити заміну $\sigma_i \rightarrow \sigma_i + h_i$ в виразі (2.15) для вільної енергії і виконати додаткове усереднення з гаусовими полями h_i . Система рівнянь для φ_0, φ, q має наступні розв'язки: $\varphi_0 = \varphi = 0, q = 0$ (P - риге - чиста параелектрична фаза), що існує тільки при

$Q_h = 0, \varphi_0 = \varphi = 0, q \neq 0$ (SG- фаза спінового скла), $\varphi_0, \varphi \neq 0, q = 0$ (F-pure - чиста сегнетоелектрична фаза, яка існує тільки при $c = 1$, або F-pure - чиста сегнетоелектрична фаза, яка існує тільки при $c = 0$), $\varphi_0, \varphi \neq 0, q \neq 0$ (F- сегнетоелектрична фаза або AF в залежності від умов (2.18)).

На рис.8 і 9 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 не випадковою малою додатною далекосяжною взаємодією $J(J_- = \frac{2}{3}J)$. t_g для гаусового розподілу є нижче тому що для цього розподілу більш імовірні значення k близькі до нуля. Зростання не випадкових додатних далекосяжних взаємодій звужує область фази спінового скла. При великих J P-SG лінія зникає, F-SG і AF-SG криві перетинаються, і SG фаза існує тільки нижче від F-SG і AF-SG.

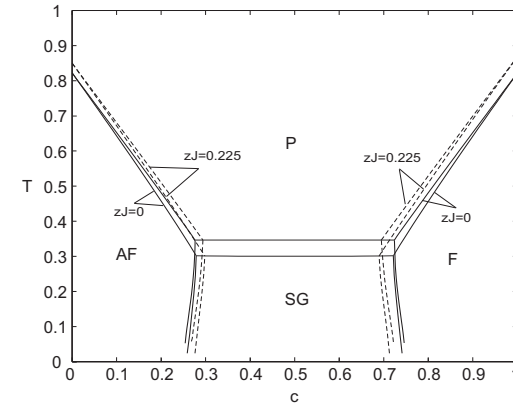


Рис. 8. Фазова діаграма для $z=6$ для розподілу $k = (-1, 1)$ і для відповідного гаусового розподілу (нижня крива) при $zJ = 0.0; 0.225$.

Наступні рисунки 10 і 11 демонструють схлопування SG-області при збільшенні позитивної далекодії (Рис. 10) і відсутність SG-області для квазіодновимірної моделі (Рис.11).

На Рис.12 для $z=6$ з розподілом $k = (-1, 1)$ приведена температура залежність середнього спіна m , χ (сприйнятливості) і середнього квадрату поляризації $Q = \langle \langle S_i \rangle_{TERM}^2 \rangle_{conf}$ при $c=0.73$ і $c=0.95$ для різних значень zJ . Видно, що для $c=0.73$ на відміну від $c=0.95$, невеликі значення zJ суттєво впливають на характеристики системи. Фазові переходи між параелектричною фазою і сегнетофазою, а

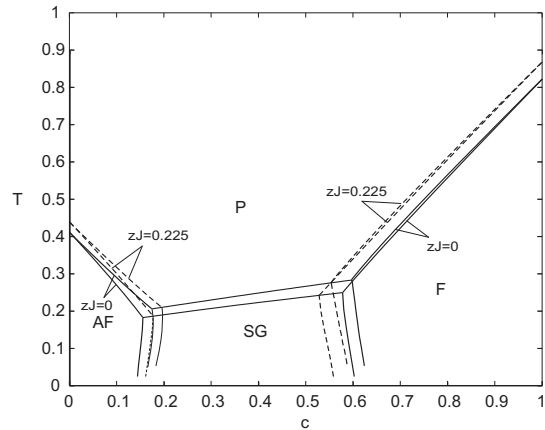


Рис. 9. Фазова діаграма для $z=6$ для розподілу $k = (-0.5, 1)$ і для відповідного гаусового розподілу (нижня крива) при $zJ = 0.0; 0.225$.

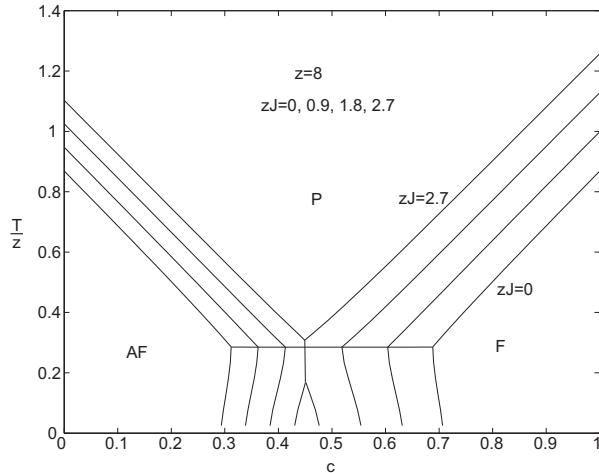


Рис. 10. Фазова діаграма для $z=8$ для симетричного гаусового розподілу k при $zJ = 0, 0.9, 1.8, 2.7$.

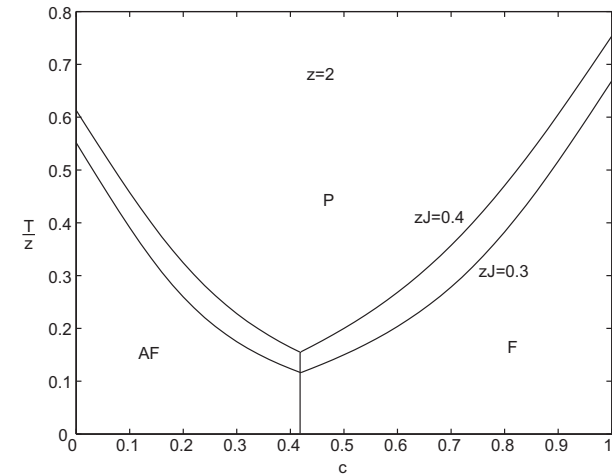


Рис. 11. Фазова діаграма для $z=2$ (псевдоодновимірна модель) для симетричного гаусового розподілу k при $zJ = 0.3, 0.4$. Склофаза відсутня.

також між сегнетофазою і скло фазою для $c=0.73$ (низькотемпературна гілка) відносяться до другого роду.

Для симетричних гаусового розподілу і розподілу $k = (-1, 1)$ для концентрації $c=0.5$ на рис.13 приведені температурні залежності термодинамічних характеристик системи. Відмітимо, що гаусів розподіл не тільки понижує температуру SG-переходу, але також згладжує пік в точці переходу для теплоємності і сприйнятливості.

На рис.14 і 15 приведена фазова діаграма для кубічної ґратки для асиметричного розподілу $k = (-0.5, 1)$ і при різних значеннях дисперсії Q_h внутрішніх випадкових полів при не випадковій малій додатній далекосяжній взаємодії $J(J_- = \frac{2}{3}J)$.

Рис. 16-19 містять температурну залежність середнього квадрату поляризації $Q = \langle \langle S_i \rangle_{TERM}^2 \rangle_{conf}$ і сприйнятливості $\chi = \partial / \partial h \langle \langle S_i \rangle_{TERM} \rangle_{conf}$ для кубічної ґратки для симетричного розподілу $k = (-1, 1)$ і для гаусових внутрішніх полів при $zJ = 0.225$ і $c=0.5$ (перехід від високотемпературної SG-фази to 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 SG фазового переходу (рис.16,17). Між високотемпературною SG-фазою (ви-

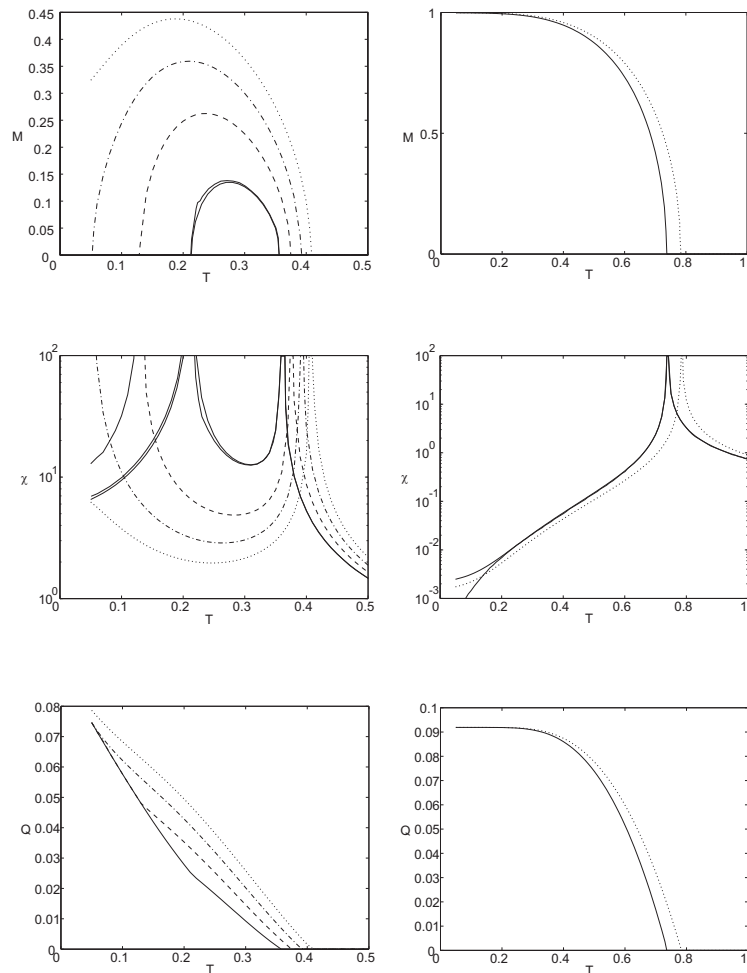


Рис. 12. Температурна залежність середнього спіна m , сприйнятливості χ , середнього квадрату поляризації $Q = \langle \langle S_i \rangle_{TERM}^2 \rangle_{conf}$ для $z=6$ і розподілу $k = (-1, 1)$ при $s=0.73$ (ліва колонка, SG область зліва від лівого піка, F- фаза в центральній області) і $s=0.95$ (права колонка, F – зліва від піка) для $zJ=0.0; 0.075; 0.15; 0.225$ (точкова крива).

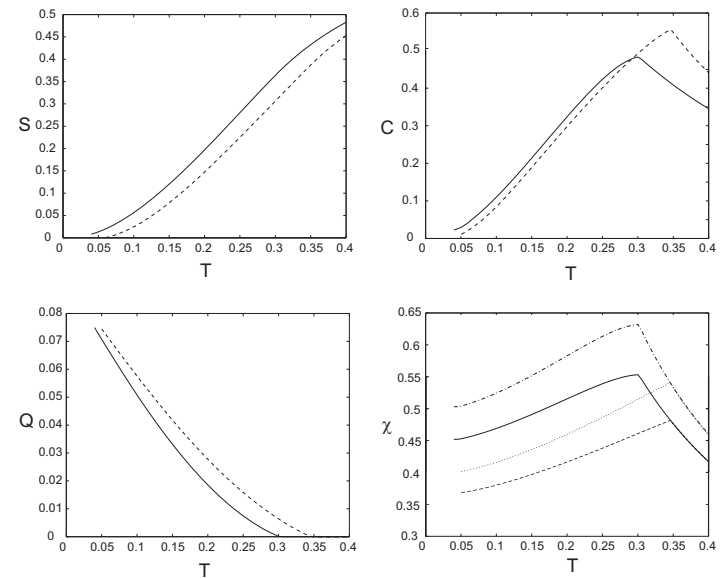


Рис. 13. Температурна залежність ентропії S , теплоємності C , середнього квадрату поляризації Q і сприйнятливості χ для $z=6$, $s=0.5$ (SG фаза) з розподілом $k = (-1, 1)$ і гаусвим розподілом для $zJ=0.0; 0.225$ (в SG фазі залежність від J проявляється тільки для χ).

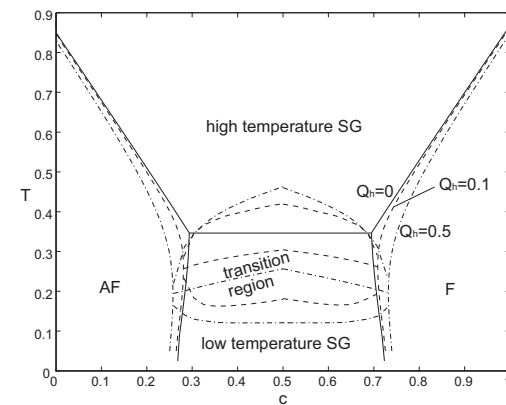


Рис. 14. Фазова діаграма для $z=6$ для розподілу $k = (-1, 1)$ і для гаусового розподілу внутрішніх полів з дисперсією Q_h при $zJ = 0.225$.

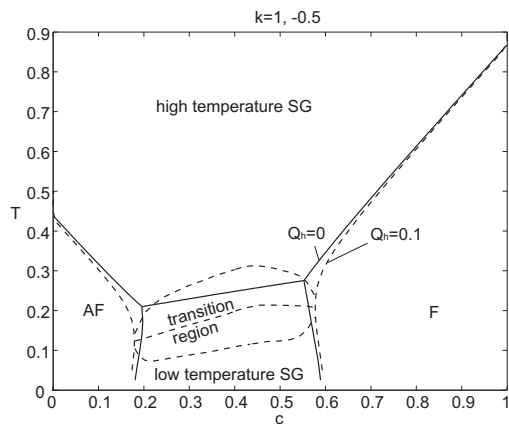


Рис. 15. Фазова діаграма для $z=6$ для розподілу $k = (-0.5, 1)$ і для гаусового розподілу внутрішніх полів з дисперсією Q_h при $zJ = 0.225$.

ще верхньої штрихової лінії на рис.14,15, $q \ll 1$) і низькотемпературною SG-фазою (нижче найнижчої штрихованої лінії на рис.14,15), є перехідна область. Ми визначили t - границі перехідної області як верхню і нижню точки перегину в температурній залежності сприйнятливості (рис.17). В той же час внутрішні випадкові поля слабо змінюють форму піка сприйнятливості при переході між SG фазою і феромагнітною фазою (рис. 19).

4. Висновки

Запропонована модель спінового скла з довільною областю конкуруючих взаємодій в межах наближення двохчастинкового кластера для вільної енергії і в рамках реплічно-симетричного підходу. При врахуванні M координаційних сфер вільна енергія містить функції розподілу $R(\sigma, z_n - 1)$ (функція розподілу всіх кластерних полів за виключенням одного поля з n -ої координаційної сфери) не вище M -го порядку. Для них в наближенні некорельованих кластерних полів виведена система M інтегральних рівнянь. При врахуванні лише першої координаційної сфери з координаційним числом $z=4,6$ для функції розподілу короткодії $P(k) = (1 - c)\delta(k + 1) + c\delta(k - 1)$ чисельно вивчені розв'язки для функції $R(\sigma, z - 1)$. При низьких температурах вона, крім неперервної частини, містить δ -подібні піки зі

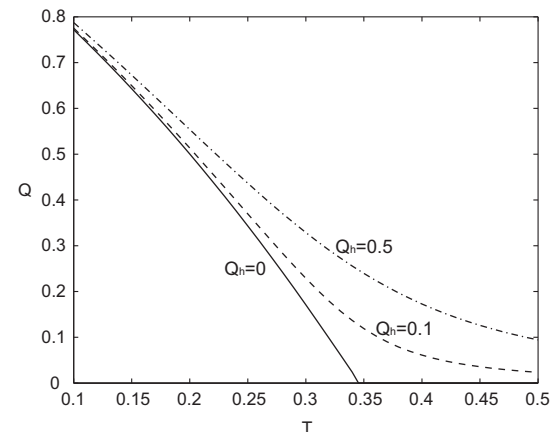


Рис. 16. Температурна залежність середнього квадрата намагніченості $Q = \langle \langle S_i \rangle_{TERM}^2 \rangle_{conf}$ для $z=6$ для розподілу $k = (-1, 1)$ і для гаусового розподілу внутрішніх полів з дисперсією Q_h при $zJ = 0.225$ і $c=0.5$ (перехід з високотемпературної SG-фази до низькотемпературної SG-фази).

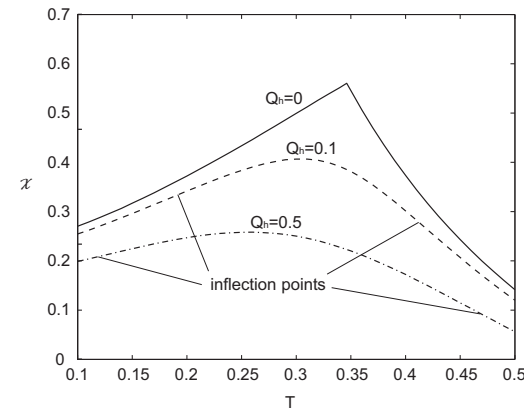


Рис. 17. Температурна залежність сприйнятливості $\chi = \frac{\partial}{\partial h} \langle \langle S_i \rangle_{TERM} \rangle_{conf}$ для $z=6$ для розподілу $k = (-1, 1)$ і для гаусового розподілу внутрішніх полів з дисперсією Q_h при $zJ = 0.225$ і $c=0.5$ (перехід з високотемпературної SG-фази до низькотемпературної SG-фази).

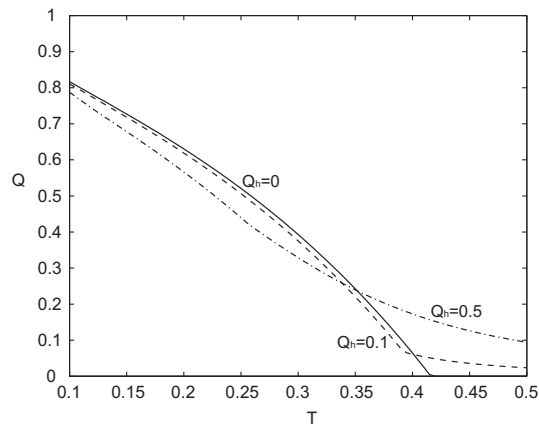


Рис. 18. Температурна залежність середнього квадрата намагніченості $Q = \langle \langle S_i \rangle_{TERM}^2 \rangle_{conf}$ для $z=6$ для розподілу $k = (-1, 1)$ і для гаусового розподілу внутрішніх полів з дисперсією Q_h при $zJ = 0.225$ і $c=0.735$ (перехід з високотемпературної SG-фази до низькотемпературної SG-фази).

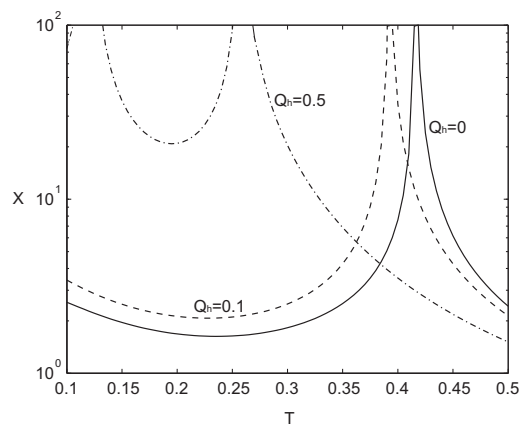


Рис. 19. Температурна залежність сприйнятливості $\chi = \frac{\partial}{\partial h} \langle \langle S_i \rangle_{TERM} \rangle_{conf}$ для $z=6$ для розподілу $k = (-1, 1)$ і для гаусового розподілу внутрішніх полів з дисперсією Q_h при $zJ = 0.225$ і $c=0.735$ (перехід з високотемпературної SG-фази скрізь сегнетоелектричну фазу до низькотемпературної SG-фази).

скінченною шириною біля $\pm(z-1), \pm(z-3), \dots$, а при збільшенні температури виживає лише один пік з огинаючою близькою до гаусівського розподілу. Вільна енергія, обчислена з гаусовою функцією розподілу, що знайдена з умов екстремуму, і вільна енергія, обчислена з функцією розподілу, знайденою з інтегрального рівняння, є близькі. Це дозволяє нам використовувати гаусові наближення для функцій розподілу, які входять у вираз для вільної енергії.

Розглянута модель протонного скла з суттєвими короткосяжними взаємодіями (перша координаційна сфера з розподілом $(-ak, k)$ або з гаусовим розподілом взаємодій) і слабкими далекосяжними взаємодіями (лінійне наближення). Обчислені фазова діаграма, ентропія, параметр порядку, питома теплоємність і сприйнятливості. Асиметрія фазової діаграми виникає завдяки врахуванню далекосяжних взаємодій і завдяки асиметрії функції розподілу короткосяжних взаємодій. В даній моделі в присутності нехаотичної далекосяжної взаємодії вивчено також вплив гаусівських флуктуацій внутрішніх полів з дисперсією $\sim x(1-x)$, які існують в системах з водневими зв'язками типу $\text{Rb}_x(\text{NH}_4)_{1-x}\text{H}_2\text{PO}_4$. Ці поля викликані структурним безладом завдяки різниці між іонними радіусами іонів Rb і NH_4 . Завдяки внутрішнім полям у високотемпературній області замість параелектричної фази існує високотемпературне протонне скло (мале, але відмінне від нуля значення параметра склофази $Q = \langle \langle S_i \rangle_{TERM}^2 \rangle_{conf}$). При даному значенні x при пониженні температури, замість точки переходу з парафази в склофазу, виникає область переходу з високотемпературної склофази (мале Q) до низькотемпературної (велике Q). Показано, що малі флуктуації внутрішніх полів можуть призвести до суттєвого розмивання області такого фазового переходу. В той же час внутрішні випадкові поля слабо змінюють форму піка сприйнятливості при переході між фазою високотемпературного протонного скла і сегнетоелектричною фазою.

Слід зауважити, що експериментально в протонних стеклах типу $\text{Rb}_x(\text{NH}_4)_{1-x}\text{H}_2\text{PO}_4$ нижню границю склування визначають з піка температурного ходу уявної частини низькочастотної діелектричної проникливості. Тому наступна робота буде присвячена розрахунку частотної залежності сприйнятливості протонних стекел з різними типами конкуруючих взаємодій.

5. Подяки

Автори роботи висловлюють подяку проф. І.В.Стасюку за корисне обговорення результатів даної роботи

Література

1. E.Courtens: Fogel-Fulcher Scaling of the Susceptibility in a Mixed-Crystal Proton Glass. Phys.Rev. 1984; **52**: № 1, 69-72.
2. Z. Trybula, J. Stankowski, L. Szczepanska, R. Blinc, Al. Weiss, N.S.Dalal: Proton Glass state in $Rb_{1-x}(NH_4)_xH_2AsO_4$. Physica 1988; **B 153**: 143-146
3. Z.Trybula, V.H.Schmidt, J.E.Drumheller. Coexistence of proton-glass and ferroelectric order in $Rb_{1-x}(NH_4)_xH_2AsO_4$. Phys. Rev. 1991; B **43**: No.1,1287-
4. P. Prelovcek, R. Blinc, Spin glass phase in mixed ferroelectric-antiferroelectric hydrogen bonded systems. J. Phys. C.: Solid State Phys.1982;**15**: L985-L990.
5. E. Matsushita, T. Matsubara: Cluster Theory of Glass in $Rb_{1-x}(NH_4)_xH_2PO_4$. J. Ph. Soc. Jap. 1985; **54**: № 3, 1161-1167
6. R. Pirc, B. Tadic, R. Blinc: Random-Field Smearing of the Proton-Glass Transition Phys. Rev. B. 1987; **36**: № 16, 8607-8615.
7. Do-Hyun Kim, Jong-Jean Kim: Replica Symmetric Solution of Random Field Tunneling Model for Proton Glasses. Ferroelectrics. 2002, **268**: 263-268.
8. D.Sherrington, S.Kirkpatrick: Solvable Model of Spin Glass. Phys. Rev. Lett. 1975; **35**: 1792-1796.
9. S. Kirkpatrick, D. Sherrington: Infinite-Ranged Model of Spin-Glasses. Phys. Rev. 1978; **B17**: 4384.
10. G. Parisi: The order parameter for spin glasses: A function on the interval 0-1. J. Phys. 1980; **A13**: 1101-1112.
11. I.Smolyaninov, M.Glinchuk: The Peculiarities of Glass State Formation and the Role of Random Elastic Fields in Mixed Crystals of the KH_2PO_4 Family. J.Phys.: Cond. Matt. 1994; **6**: 2869-2880.
12. S.F. Edwards and P.W. Anderson: Theory of spin glasses. J.Phys. F. Metal. Phys. 1975; **5**: 965-974.
13. F.Matsubara and M.Sakata: Theory of Random Magnetic Mixture. III. Glass-Like phase. Progr.Theor.Phys. 1976; **55**: 672
14. M. Sasaki, Sh. Katsura. 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 1989; **A155**: 206- 220.
15. M. Sasaki, Sh. Katsura: The Assymetric Continuous Distribution Function of the Effective Field of the Ising Spin Model in the Spin Glass and Ferromagnetic States on the Bethe Lattice. Physica. 1989; **A157**: 1195- 1202.
16. M. Mezard, G. Parisi. The Bethe Lattice Spin Glass Revisited.

Eur.Phys. 2001; **B20**, 217-233.

17. F. Liers, M. Palassini, A.K. Hartmann, M. Jünger.Ground State of the Bethe-lattice Spin Glass and Running Time of an exact optimization. Phys. Rev. 2003; **B68**: 094406 (9 pages).

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/>)

Роман Романович Левицький
Сергій Іванович Сороков
Андрій Степанович Вдович

МОДЕЛЬ СПІНОВОГО СКЛА З СУТТЄВИМИ КОРОТКОСЯЖНИМИ
КОНКУРУЮЧИМИ ВЗАЄМОДІЯМИ

Роботу отримано 21 січня 2005 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії модельних
спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені