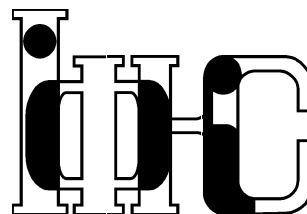


Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

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/>)

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

Сергій Іванович Сороков
Андрій Степанович Вдович
Роман Романович Левицький

ФАЗОВА ДІАГРАМА І НЕЛІНІЙНА СПРИЙНЯТЛИВІСТЬ МОДЕЛІ
ПРОТОННОГО СКЛА З КОНКУРЕНЦІЄЮ ВИПАДКОВИХ
КОРОТКОСЯЖНИХ І ДАЛЕКОСЯЖНИХ ВЗАЄМОДІЙ

Роботу отримано 20 грудня 2012 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

ICMP-12-16U

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

ФАЗОВА ДІАГРАМА І НЕЛІНІЙНА СПРИЙНЯТЛИВІСТЬ
МОДЕЛІ ПРОТОННОГО СКЛА З КОНКУРЕНЦІЄЮ
ВИПАДКОВИХ КОРОТКОСЯЖНИХ
І ДАЛЕКОСЯЖНИХ ВЗАЄМОДІЙ

ЛЬВІВ

УДК: 537.2; 537.3

RACS: 75.10.Nr, 77.22.-d, 77.80.-e, 77.80.Bh

Фазова діаграма і нелінійна сприйнятливість моделі протонного скла з конкуренцією випадкових короткосяжних і далекосяжних взаємодій

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

Анотація. В рамках наближення двочастинкового кластера і реплічної симетрії розраховано лінійну і нелінійні ($\sim E^2$, $\sim E^3$) діелектричні проникності та побудовано $T-x$ фазову діаграму для простої моделі протонного скла з урахуванням флуктуацій конкуруючих короткосяжних і далекосяжних взаємодій. Показано, що без флуктуацій внутрішнього поля нелінійні сприйнятливості мають розбіжність в точці T_0 (виникнення параметра Едвардса–Андерсена). При наявності внутрішнього випадкового поля нелінійна сприйнятливості $\sim E^3$ має згладжений пік в точці T_0 .

Phase diagram and non-linear susceptibility of proton glass model with competition of random short-range and long-range interactions

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

Abstract. Within the framework of the two-particle cluster approximation and the symmetric replica approach, we calculate linear and non-linear ($\sim E^2$, $\sim E^3$) dielectric susceptibilities and construct the $T-x$ phase diagram for a simple proton glass model that takes into account fluctuations of competing short-range and long-range interactions. It is shown that without fluctuations of the internal field the non-linear susceptibilities diverge at T_0 (the point where the Edwards–Andersen parameter appears). In presence of the random internal field, the non-linear susceptibility $\sim E^3$ have a rounded peak at T_0 .

Подається в Condensed Matter Physics

Submitted to Condensed Matter Physics

© Інститут фізики конденсованих систем 2012
Institute for Condensed Matter Physics 2012

1. Вступ

Головні особливості фрустрованих систем, в яких при низьких температурах можливий перехід в склоподібний стан, можна описати на основі ізінго-подібного гамільтоніана H з випадковими параметрами h_i і k_{ij} (i і j – вузли ґратки Браве)

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

Серед таких систем можна виділити спінові стекла ($S_i = \pm 1$, випадкове тільки k_{ij}), протонні стекла типу $Rb_x(NH_4)_{1-x}H_2PO_4$ ($S_i = \pm 1$, випадкові h_i і k_{ij}), дипольні стекла типу $K_{0.989}Li_{0.011}TaO_3$ ($S_i \rightarrow \vec{S}_i$ класичний вектор, випадкові h_i і k_{ij}), релаксори типу $PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O_3$, PMN)...($S_i \rightarrow \vec{S}_i$ класичний вектор зі змінною довжиною, випадкові h_i і k_{ij}) [1].

Для розрахунку фізичних характеристик цих систем використовують наближення, які працюють тільки або для короткосяжних, або для далекосяжних взаємодій. В роботі [2] для випадкової далекосяжної взаємодії, 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 та застосовується реплічно-симетричне (RS- replica symmetric) наближення. В [3] запропоновано розв'язок з порушенням реплічної симетрії (RSB - replica symmetry breaking) для моделі [2], який є стабільний при температурах нижче температури Альмейда-Таулеса. В роботах [4, 5] модель (1) з врахуванням гаусових флуктуацій хаотичного поля (тут вона називається RBRF random-bond-random-field model) в рамках наближення RS застосовується для опису властивостей сумішей типу $Rb_x(NH_4)_{1-x}H_2PO_4$. В роботі [6] запропонована так звана SRBRF - spherical RBRF модель (модель типу (1), в якій зроблено заміну S_i на класичний вектор \vec{S}_i , довжина якого змінюється в межах $[-\infty; +\infty]$). SRBRF модель застосовується для розрахунку лінійної і нелінійної сприйнятливостей релаксорів [6–8]. Зауважимо, що інший підхід для опису термодинамічних властивостей релаксорів, який базується на розрахунках функції розподілу локального поля, створеного домішковими диполями, запропоновано в роботах [9, 10].

Інша група робіт враховує тільки взаємодії між найближчими сусідами $k_{ij} = k$. Для k звичайно використовується гаусова функція розподілу або розподіл $P(k) = c \cdot \delta(k-1) + (1-c) \cdot \delta(k+1)$. Таку ізінгівську модель зручно вивчати на ґратці Бете [11–13], тому що

наближення двохчастинкового кластера для вільної енергії на таких ґратках є точне. Значно пізніше Мезард і Парізі [14] врахували перший крок порушення реплічної симетрії (1RSB) для ґратки Бете. Було показано, що попередні результати [11–13] відповідають RS розв'язку. В роботі [15] на основі алгоритму [14] чисельно показано, що різниця між вільною енергією в межах RS і 1RSB розв'язків є менша ніж 4% для $z=4,6$. Різниця між RS і 1RSB розв'язками зростає при зростанні z .

Важливу інформацію про природу структурного впорядкування дає дослідження температурної поведінки нелінійної сприйнятливості фрустрованих систем. Точка розбіжності цієї сприйнятливості інтерпретується як температура переходу в стан спінового скла [17]. Було точно показано, що для моделі Ізінга при включенні хаотичного поля ця розбіжність зникає [16, 17]. Наближені розрахунки для моделі типу (1), або моделі Ізінга в поперечному полі [18], коли середнє значення $\langle k_{ij} \rangle$ і дисперсія (парний кумулянт) $\langle k_{ij}^2 \rangle^{cum}$ не залежать від i, j і використовується реплічно-симетричне наближення (RS- replica symmetric) показують, що без включення хаотичного поля нелінійна сприйнятливості розбігається при T_m (температура максимуму лінійної сприйнятливості, при якій виникає відмінне від нуля значення параметра Едвардса-Андерсона). При включенні хаотичного поля ця розбіжність зникає. При незначному збільшенні дисперсії цього поля величина піка нелінійної сприйнятливості різко падає, а ширина піку різко зростає. Однак в рамках кластерного наближення дослідження особливостей температурної поведінки нелінійної сприйнятливості досі не проводилось.

Для опису матеріалів типу $Rb_x(NH_4)_{1-x}H_2PO_4$ [19] (або $Rb_{1-x}(NH_4)_xH_2AsO_4$) необхідно адекватно враховувати конкуруючі короткосяжні і випадкові далекосяжні диполь-дипольні взаємодії. В цій суміші тетраедри PO_4 (AsO_4) і їх найближче хаотичне оточення іонами Rb або NH_4 формують енергетичні рівні базисної системи з короткосяжними взаємодіями і хаотичне внутрішнє поле.

В роботах [20–24] на основі наближення чотирьохчастинкового кластера за короткосяжними і середнього поля за далекосяжними взаємодіями було досягнуто задовільний опис температурного ходу поляризації, параметра Едвардса-Андерсона, поздовжньої і поперечної проникностей для матеріалів типу $Rb_x(NH_4)_{1-x}H_2PO_4$. Однак в перехідних концентраційних областях, а також поблизу температур переходу залишаються кількісні і якісні розбіжності між теорією і експериментом. На нашу думку, для виявлення цих розбіжностей потрібно врахувати в гамільтоніані п'єзоелектричний зв'язок і

флуктуації випадкових далекосяжних взаємодій, а також дослідити концентраційну і температурну поведінку нелінійної сприйнятливості даних сумішей. В даній роботі в рамках наближення двохчастинкового кластера і з врахуванням гаусовських флуктуацій далекосяжних взаємодій досліджуються термодинамічні характеристики системи на основі гамільтоніану (1), який відображає основні особливості матеріалів типу $Rb_x(NH_4)_{1-x}H_2PO_4$. В даній роботі досліджено фазову діаграму в залежності від параметрів гамільтоніану, а також особливості поведінки лінійної і нелінійної сприйнятливостей в різних областях фазової діаграми.

2. Термодинамічні властивості моделі протонного скла в кластерному наближенні з врахуванням флуктуації далекосяжної взаємодії

В наближенні двохчастинкового кластера вільну енергію F можна записати таким чином:

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

Тут і далі використовуються такі позначення:

$$\begin{aligned} -\beta F_0(x) &= \ln(2 \operatorname{ch}(\beta x)), \\ -\beta F_{cl}(x_1 | x_2 | k) &= \ln(2(e^{\beta k} \operatorname{ch}(\beta x_1 + \beta x_2) + e^{-\beta k} \operatorname{ch}(\beta x_1 - \beta x_2))), \quad (3) \\ F_0^{(l)}(x) &= \frac{\partial^l}{\partial (\beta x)^l} F_0(x), \\ F_{cl}^{(lm)}(x_1 | x_2 | k) &= \frac{\partial^l}{\partial (\beta x_1)^l} \frac{\partial^m}{\partial (\beta x_2)^m} F_{cl}(x_1 | x_2 | k), \quad (4) \end{aligned}$$

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

Для вільної F/N енергії запропоновано наближення двохчастинкового кластера для першої координаційної сфери і наближення середнього поля для інших координаційних сфер з гаусівськими функціями розподілу кластерних полів. В такій системі можливе утворення різних ґраткових періодичних структур (антисегнетоактивне впорядкування, смугасті структури). Ми вивчатимемо тут тільки

антипорядкування з двома підгратками ($f = 1, 2$). Це дозволяє описувати систему з допомогою двох параметрів стану $\phi = \phi_1 = -\phi_2$, $q = q_f$ для першої координаційної сфери і двох параметрів стану $\phi_L = \phi_{L1} = -\phi_{L2}$, $q_L = q_{Lf}$, які описують всі інші координаційні сфери (для сегнетовпорядкування $\mu = 1$, для антисегнетовпорядкування $\mu = 2$):

$$-\beta \langle F_\mu \rangle / N = -2\bar{z} \langle F_0 \rangle_c + z \langle F_{cl,\mu} \rangle_c - 2\beta \phi_L \langle F_0^{(1)} \rangle_c + 2\beta \bar{J}_\mu \left[\langle F_0^{(1)} \rangle_c \right]^2 - \beta^2 q_L \langle F_0^{(2)} \rangle_c + \frac{1}{2} \beta^2 \bar{I} \left\{ 1 - \left[\langle F_0^{(1)} \rangle_c \right]^2 \right\}. \quad (5)$$

Тут і далі використовуємо такі позначення

$$\begin{aligned} \langle F_0^{(l)} \rangle_c &= \int \int F_0^{(l)} \left(h + \sqrt{2(1-c)cG}g + \Phi_z + \sqrt{\Theta_z}\sigma \right) R(\sigma) R(g) d\sigma dg \\ \langle F_{cl,F/A}^{(lm)} \rangle_c &= \\ &= \int \int \int \int F_{cl}^{(lm)} \left(h + \Phi_z + \sqrt{2(1-c)cG}g_1 + \sqrt{\Theta_z}\sigma_1 | h \pm \Phi_z + \sqrt{2(1-c)cG}g_2 + \sqrt{\Theta_z}\sigma_2 | k \right) \times \\ &\quad \times P(k) R(\sigma_1) R(\sigma_2) R(g_1) R(g_2) dk d\sigma_1 d\sigma_2 dg_1 dg_2 \end{aligned} \quad (6)$$

При цьому

$$\begin{aligned} -\beta F_0(x) &= \ln(2 \cosh(\beta x)) \\ -\beta F_{cl}(x_1 | x_2 | k) &= \ln \left(2 \left(e^{\beta k} \cosh(\beta x_1 + \beta x_2) + e^{-\beta k} \cosh(\beta x_1 - \beta x_2) \right) \right) \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} F_0^{(l)}(x) &= \frac{\partial^l}{\partial x^l} F_0(x) \quad F_{cl}^{(l,m)}(x_1 | x_2 | k) = \frac{\partial^l}{\partial x_1^l} \frac{\partial^m}{\partial x_2^m} F_{cl}(x_1 | x_2 | k) \\ R(\sigma) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \cdot \sigma^2 \right\}, \quad \Phi_z = z\phi + \phi_L; \Theta_z = zq + q_L \end{aligned} \quad (9)$$

Для чисельних розрахунків ми використаємо функцією розподілу $P(k)$ для взаємодії між найближчими сусідами і для фур'є-образу при $q = 0$ від середнього значення взаємодії \bar{J}_μ і середнього парного кумулянта цієї взаємодії \bar{I} (в вільну енергію входить тільки власне значення $\mu = 1$)

$$\begin{aligned} P(k) &= c \cdot \delta(k - k_+) + (1 - c) \cdot \delta(k - k_-); \quad \overrightarrow{de_f} k = (k_+, k_-); \\ \bar{J}_\mu &= cJ_{\mu+} + (1 - c)J_{\mu-}; \quad \overrightarrow{de_f} \bar{J}_\mu = (J_{\mu+}, J_{\mu-}); \quad \bar{I} = \frac{1}{2}(1 - c)I; \end{aligned} \quad (10)$$

З умови екстремуму $\langle F_\mu \rangle / N$ знаходимо систему рівнянь для параметрів Φ_z, Θ_z .

Вирази для середнього спіна η і квадрату спіна $Q = \langle \langle S_i \rangle_{TERM}^2 \rangle_{conf}$ підгратки $f = 1$ (для антифази $\eta_2 = -\eta$) наступні:

$$\eta = \frac{d}{dh} \left\langle \frac{F_\mu}{N} \right\rangle \Big|_{h=0} = \langle F_0^{(1)} \rangle_c \Big|_{h=0}; \quad Q = \left\langle \left[F_0^{(1)} \right]^2 \right\rangle_c \Big|_{h=0}. \quad (11)$$

Лінійна χ , а також нелінійні сприйнятливості χ_2, χ_3 визначаються із наступного співвідношення:

$$\eta(h) = \chi \cdot h + \chi_2 \cdot h^2 + \chi_3 \cdot h^3 \quad (12)$$

При нехтуванні флуктуаціями далекосяжних взаємодій результати розрахунків для фазових діаграм і термодинамічних величин приведені в роботах [25–27]. Тут ми приведемо фазові діаграми у випадку врахування флуктуацій далекодії. На рис.1 приведена фазова діа-

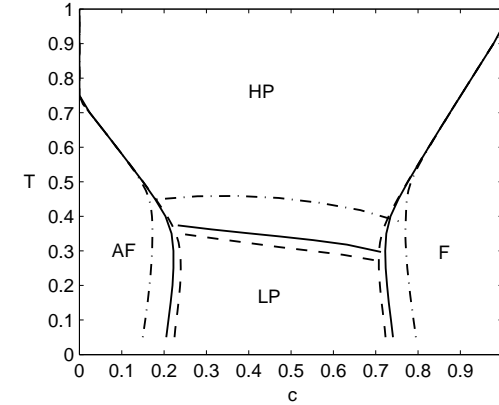


Рис. 1. Фазова діаграма для $z=6$ для розподілу короткосяжних $k = (1, -1)$ і далекосяжних $J_1 = (0.6, -0.6), J_2 = (0.4, -0.4)$ взаємодій для дисперсії внутрішніх полів $G = 0.1$ при різних дисперсіях далекосяжних взаємодій $I=0.1$ (штрихова лінія), $I=1$ (суцільна), $I=5$ (штрих-пунктирна).

грама для кубічної ґратки для симетричного розподілу $k = (-1, 1)$ при різних значеннях дисперсії далекодії $I = 0.1; 1.0; 5.0$. На лініях

$T_c(x)$ і $T_N(x)$ між областями з сегнето- (F) та антисегнетопорядкуванням (AF) відповідно зникає поляризація вузла ($\eta = 0$). Крива, яка розділяє парафазу (P) на верхню (HP) і нижню (LP) області відповідає піку сприйнятливості і позначена $T_m(x)$. Лінія переходу в стан протонного скла $T_0(x)$ знаходиться з розбіжності нелінійної сприйнятливості $\chi_3 = d^3\eta/dh^3|_{h=0}$. Як ми побачимо нижче, ця розбіжність виникає тільки при відсутності флуктуацій внутрішніх полів ($G = 0$) і при цій температурі $T_0(x)$ з'являється відмінне від нуля значення параметра Q . Наявність малої дисперсії $G = 0.1$ внутрішніх випадкових полів приводить до згладжування піку сприйнятливості (Рис.2). При цьому параметр Q неперервно спадає з температурою, а розбі-

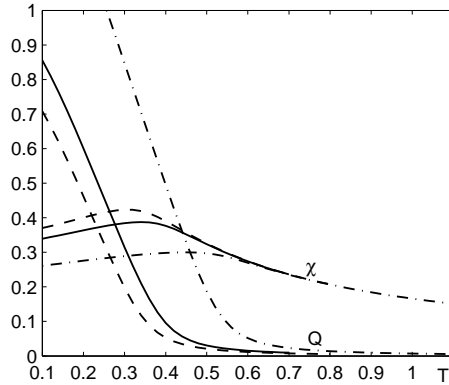


Рис. 2. Температурна залежність середнього квадрату намагніченості $Q = \langle \langle S_i \rangle_{TERM}^2 \rangle_{conf}$ і сприйнятливості $\chi = \partial/\partial h \langle \langle S_i \rangle_{TERM} \rangle_{conf}$ (лінії з максимумами) для $z=6$ для розподілу короткосяжних $k = (1, -1)$ і далекосяжних $J_1 = (0.6, -0.6), J_2 = (0.4, -0.4)$ взаємодій для дисперсії внутрішніх полів $G = 0.1$ при різних дисперсіях далекосяжних взаємодій $I=0.1$ (штрихова лінія), $I=1$ (суцільна), $I=5$ (штрих-пунктирна).

жність χ_3 зникає. Як і слід було очікувати, при збільшенні флуктуації далекої дії зменшуються концентраційні області сегнето- (F) та антисегнетовпорядкуванням (AF). Зауважимо, що асиметричність фазової діаграми виникає завдяки наявності далекої дії. Розглянемо тепер більш детально для кубічної ґратки модель, коли між параметрами далекої дії виконується умова $\bar{J}_1 = \bar{J}_2 = (J_+, J_-)$. Це можливо,

коли далекодія включає тільки вклад з другої координаційної сфери. При цьому дисперсія далекої дії однозначно виражається через параметри J_+, J_- наступним чином $I = (J_+ - J_-)^2$. Вивчено вплив флуктуацій внутрішніх полів на термодинамічні характеристики та лінійну і нелінійну сприйнятливості даної моделі протонного скла. На рис.3 приведена фазова діаграма, а на рис.4 для $c = 0.5$ – температурна залежність параметра Едвардса-Андерсона Q і лінійної

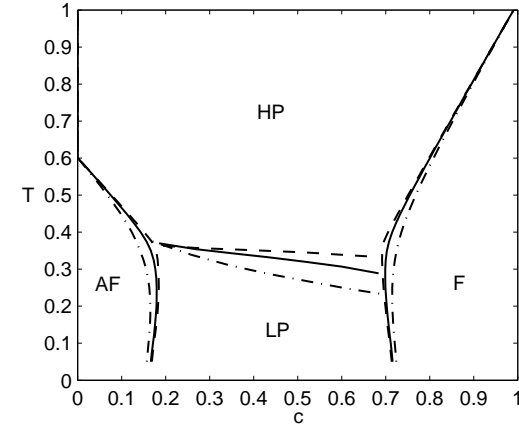


Рис. 3. Фазова діаграма для $z=6$ для розподілу короткосяжних $k = (1, -1)$ і далекосяжних $J_1 = (1, -1), J_2 = (1, -1)$ взаємодій при різних дисперсіях внутрішніх полів $G=0.01$ (штрихова лінія), $G=0.1$ (суцільна), $G=0.5$ (штрих-пунктирна).

сприйнятливості χ для розподілу $k = (-1, 1)$ при різних значеннях дисперсії $G = 0.01; 0.1; 0.5$. Отже, при збільшенні флуктуацій внутрішніх полів, як і при збільшенні флуктуацій далекосяжної взаємодії на фазовій діаграмі звужуються концентраційні області сегнето- і антисегнетофази. Однак, внутрішні поля, як видно з наведених фазових діаграм, зменшують температуру $T_m(x)$.

Зупинимось тепер для даної моделі протонного скла на аналізі впливу флуктуацій внутрішніх полів на нелінійну сприйнятливості. Можна показати аналітично, що при відсутності флуктуаційного поля ($G = 0$) друга $\chi_2 = d^2\eta/dh^2|_{h=0}$ (відмінна від нуля тільки в сегнето- та антисегнетофази) і третя $\chi_3 = d^3\eta/dh^3|_{h=0}$ нелінійні сприйнятливості мають розбіжності в точці $T_0(x)$, в якій виникає відмінне від нуля значення параметра Едвардса-Андерсона Q . На рис.

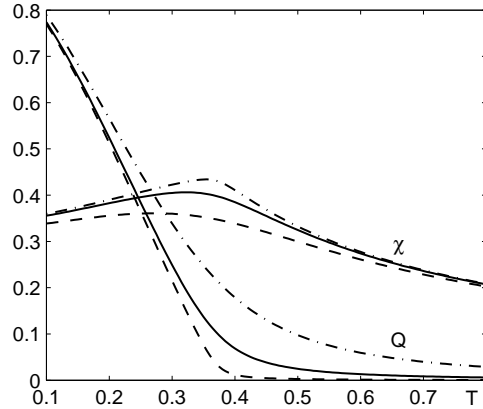


Рис. 4. Температурна залежність середнього квадрату намагніченості $Q = \langle \langle S_i \rangle_{TERM}^2 \rangle_{conf}$ і сприйнятливості $\chi = \partial / \partial h \langle \langle S_i \rangle_{TERM} \rangle_{conf}$ (лінії з максимумами) для $z=6$ при $c=0.5$ для розподілу короткосяжних $k = (1, -1)$ і далекосяжних $J_1 = (1, -1), J_2 = (1, -1)$ взаємодій при різних дисперсіях внутрішніх полів $G=0.01$ (штрихова лінія), $G=0.1$ (суцільна), $G=0.5$ (штрих-пунктирна).

5 для $c = 0.5$ і для різних значень G представлена температурна залежність лінійної χ і нелінійної $-\chi_3$ сприйнятливостей. Розбіжність χ_3 існує тільки при $G = 0$. При цьому, невеликі флуктуації внутрішніх полів приводять до більш суттєвого подавлення піку χ_3 , ніж для лінійної сприйнятливості. Ці результати якісно співпадають з результатами роботи [17]. В даній роботі досліджуються фазові діаграми моделі Ізінга з r -кратною короткосяжною взаємодією на відповідних ґратках Бете в рамках першого кроку порушення реплічної симетрії. На приведений там фазовій діаграмі для моделі Ізінга (двократна взаємодія) без флуктуацій поля лінія $T_0(x)$ співпадає з результатами в рамках нашої моделі, якщо в ній знехтувати далекодією. Зауважимо, що врахування порушення реплічної симетрії впливає тільки на вузьку область сегнетофази, яка є суміжна з областю скла. В цій області формується так звана змішана феромагнітна (сегнетоактивна по нашій термінології) фаза. Температурна поведінка сприйнятливостей в області переходу з парафази в сегнетоелектричну має інший характер. В точці фазового переходу $T_c(x)$ всі три сприйнятливості χ , χ_2 , χ_3 розбігаються при будь-якому зна-

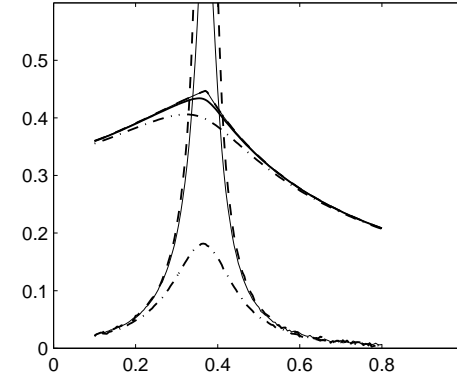


Рис. 5. Температурна залежність сприйнятливості $\chi = \partial / \partial h \langle \langle S_i \rangle_{TERM} \rangle_{conf}$ і нелінійної сприйнятливості $-\chi_3 = \partial^3 / \partial h^3 \langle \langle S_i \rangle_{TERM} \rangle_{conf}$ для $z=6$ при $c=0.5$ для розподілу короткосяжних $k = (1, -1)$ і далекосяжних $J_1 = (1, -1), J_2 = (1, -1)$ взаємодій при різних дисперсіях внутрішніх полів $G=0.0$ (штрихова лінія), $G=0.01$ (суцільна), $G=0.1$ (штрих-пунктирна).

ченні дисперсії внутрішніх полів G . Як видно з рис.6, 7, 8 параметр G лише зсуває точку розбіжності $T_c(x)$. Зауважимо, що при переході з параелектричної до антисегнетоелектричної фази ці сприйнятливості не мають особливостей в точці $T_N(x)$. В даній роботі проведено також дослідження впливу конкуренції випадкових короткосяжних і далекосяжних взаємодій на фазову діаграму системи. На рис.9 представлені діаграми, коли виконується $k_+ > 0; J_+ > 0$ ($\bar{J}_\mu = J_-$ при $c=1$), а $k_- < 0; J_- < 0$ ($\bar{J}_\mu = J_-$ при $c=0$). Отже, $J_+ > 0$ розширює область сегнетоактивної фази, яка формується за рахунок $k_+ > 0$, а $J_- > 0$ звужує область антисегнетоактивної фази, яка формується за рахунок $k_- < 0$. Як бачимо з рис.9 при $J_- = -2$ антифаза зникає навіть при $c=0$. Останнє неважко пояснити, так як у випадку антипорядкування вузловий параметр впорядкування η_i має протилежний знак для найближчих сусідів і однаковий на відстані 2-ї координаційної сфери і дуже малі значення k_-/J_- руйнують антипорядкування. Отже антипорядкуванню будуть сприяти такі знаки $k_- < 0; J_- > 0$, а набір параметрів $k_+ > 0; J_+ < 0$ буде пригнічувати сегнетофазу в порівнянні з набором $k_+ > 0; J_+ > 0$. Ця ситуація представлена на рис.10. Як видно з рис.10 при великих

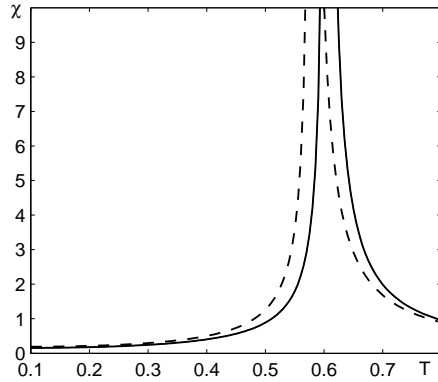


Рис. 6. Температурна залежність сприйнятливості $\chi = \partial/\partial h \langle \langle S_i \rangle_{TERM} \rangle_{conf}$ для $z=6$ при $s=0.8$ для розподілу короткосяжних $k = (1, -1)$ і далекосяжних $J_1 = (1, -1), J_2 = (1, -1)$ взаємодій при різних дисперсіях внутрішніх полів $G=0.0$ (суцільна), $G=0.1$ (штрихова).

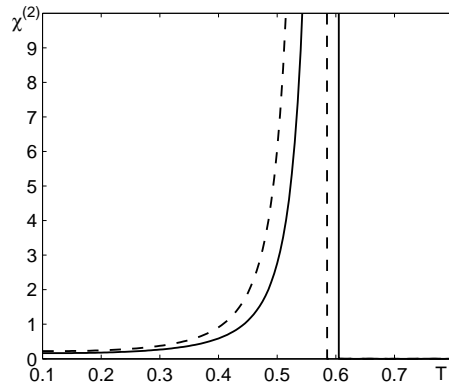


Рис. 7. Температурна залежність нелінійної сприйнятливості $-\chi_2 = \partial^2/\partial h^2 \langle \langle S_i \rangle_{TERM} \rangle_{conf}$ для $z=6$ при $s=0.8$ для розподілу короткосяжних $k = (1, -1)$ і далекосяжних $J_1 = (1, -1), J_2 = (1, -1)$ взаємодій при різних дисперсіях внутрішніх полів $G=0.0$ (суцільна), $G=0.1$ (штрихова).

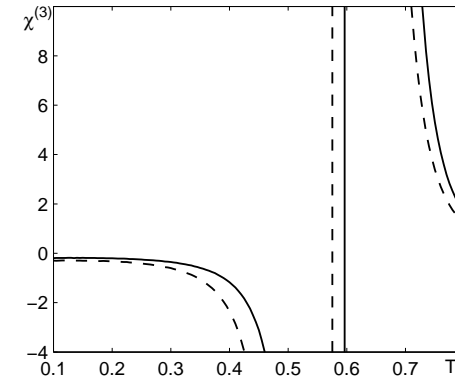


Рис. 8. Температурна залежність нелінійної сприйнятливості $-\chi_3 = \partial^3/\partial h^3 \langle \langle S_i \rangle_{TERM} \rangle_{conf}$ для $z=6$ при $s=0.8$ для розподілу короткосяжних $k = (1, -1)$ і далекосяжних $J_1 = (1, -1), J_2 = (1, -1)$ взаємодій при різних дисперсіях внутрішніх полів $G=0.0$ (суцільна), $G=0.1$ (штрихова).

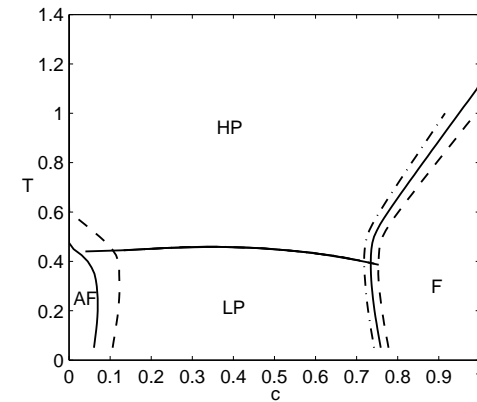


Рис. 9. Фазова діаграма при $z=6$ для розподілу короткосяжних $k = (1, -1)$ взаємодій для дисперсії внутрішніх полів $G = 0.1$ при розподілі далекосяжної взаємодії: $J_1 = J_2 = (1, -1)$ (штрихова), $J_1 = J_2 = (1.5, -1.5)$ (суцільна), $J_1 = J_2 = (2, -2)$ (штрихпунктирна).

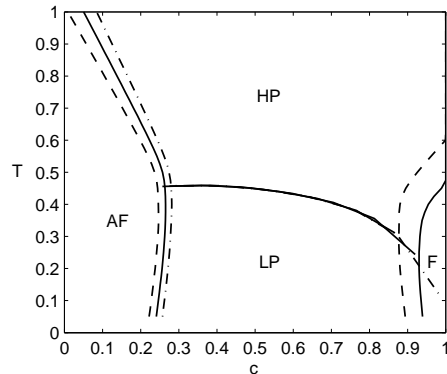


Рис. 10. Фазова діаграма при $z=6$ для розподілу короткосяжних $k = (1, -1)$ взаємодій для дисперсії внутрішніх полів $G = 0.1$ при розподілі далекосяжної взаємодії: $J_1 = J_2 = (-1, 1)$ (штрихова), $J_1 = J_2 = (-1.5, 1.5)$ (суцільна) ($J_1 = J_2 = (-2, 2)$ (штрихпунктирна)).

значеннях $J_+ = -2$ сегнетофаза зникає навіть при $c=1$. Наші діаграми при $J_- = -2$ на рис.9 і при $J_- = 2$ на рис.10 не є повними, тому що при сильних конкуренціях $k_- < 0$; $J_- < 0$ і $k_+ > 0$; $J_+ < 0$ можливі інші типи впорядкування, зокрема смужчаті [28, 29], які ми тут не розглядаємо. В цих роботах [28, 29] розглядалися можливі типи впорядкування для моделі Ізінга з відємною диполь-дипольною взаємодією (для найближчих сусідів і наступних вона рівна $-D_1$ і $-D_2$) і короткосяжною додатною $\delta > 0$ на ідеальній плоскій ґратці. Сумарна взаємодія для найближчих сусідів $k_- = -D_1 + \delta < 0$ і при збільшенні параметра δ приводить до зменшення відношення $k_- / -D_2$ і температура Нееля спадає до певного значення $T_N(\delta_1)$. При $\delta > \delta_1$ система при $T_1(\delta)$ переходить з парафазу у смугастий стан (вздовж осі x або y , оскільки вона ізотропна) з періодом ґратки a . При подальшому зростанні δ період смуги може стати $2a$; $3a$ Очевидно, що розглянута в роботах [28, 29] модель подібна до нашої при $c \rightarrow 0$ (рис.9). При зменшенні відношення k_- / J_- антивпорядкування в нашій моделі також зникає. Це саме відбувається і в області малих c . На нашу думку, і в невпорядкованих системах з конкуруючими короткосяжними і далекосяжними взаємодіями при певних співвідношеннях між параметрами можливі смужчаті стани. Але ці стани будуть предметом окремих досліджень.

3. Висновки

В межах наближення двохчастинкового кластера і в рамках реплічно-симетричного підходу вивчено модель протонного скла з врахуванням флуктуацій короткосяжних і далекосяжних взаємодій і хаотичного деформаційного поля. Показано, що нелінійна сприйнятливості χ_3 розбігається в точці $T_0(x)$ (перехід з параелектричної фази у склофазу), тільки, якщо поле відсутнє. При цій температурі з'являється ненульове значення параметра Едвардса-Андерсона Q . Невеликі флуктуації внутрішніх полів приводять до суттєвого подавлення температурного піку χ_3 і до ненульового значення Q вище температурних максимумів χ і χ_3 . В точці фазового переходу $T_c(x)$ (перехід з параелектричної до сегнетоелектричної фази) всі три сприйнятливості χ , χ_2 , χ_3 розбігаються при будь-якому значенні дисперсії внутрішніх полів G . При переході з параелектричної до антисегнетоелектричної фази ці сприйнятливості не мають особливостей в точці $T_N(x)$. Досліджено вплив конкуренції між випадковими короткосяжними і далекосяжними взаємодіями на термодинамічні характеристики і фазові діаграми модельного протонного скла. Показано, що на така конкуренція може приводити до сильної асиметрії фазової діаграми і навіть до зникнення антисегнетоелектричних або сегнетоелектричних областей. При цьому, в концентраційній області антисегнетофазу середнє значення далекосяжної взаємодії $\bar{J}_\mu < 0$ протидіє, а $\bar{J}_\mu > 0$ сприяє утворенню антисегнетоактивної фази.

4. Подяки

Робота виконана за підтримки Державного фонду фундаментальних досліджень, Проект "Фазові переходи та фізичні властивості систем $\text{KN}_2\text{PO}_4\text{-NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ з конкуруючими сегнето-антисегнетоелектричними взаємодіями" № F40.2/099.

Література

1. Miga S., Dec J., Kleeman W., Non-Linear Dielectric Response of Ferroelectrics, Relaxors and Dipolar Glasses. Pp.181-202. In: Ferroelectrics- characterization and modelling. InTech, Rijeka, Croatia. 2011. 586p.
2. Sherrington D., Kirkpatrick S. Solvable Model of Spin Glass. // Phys.Rev. Lett. – 1975.–Vol. 35. – P. 1792-1796.

3. Parisi G. The order parameter for spin glasses: A function on the interval 0-1. // J. Phys. A. – 1980.–Vol. 13. – P. 1101-1112.
4. 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.
5. Banerjee V., Dattagupta S. Dielectric relaxation in a deuteron glass. // Phys.Rev B. – 2003. – Vol. 68. – P. 054202.
6. Pirc R., Blinc R. Spherical random-bond-random-field model of relaxor ferroelectrics. // Phys.Rev.B. – 1999. – Vol. 60, N 19. – P. 13470-13477.
7. Blinc R., J. Dolinsek J., Gregorovic A., Zalar B., Filipic C., Kutnjak Z., Levstik A., Pirc R. NMR and the spherical random bond-random field model of relaxor ferroelectrics//Journal of Physics and Chemistry of Solids –2000.–Vol.61.– P.177-183
8. Pirc R., Blinc R., Kutnjak Z. Nonlinear dielectric response of relaxor ferroelectrics.//Phys.Rev.B. – 2002. – Vol. 65, – P. 214101-1-7.
9. Glinchuk M.D., Stephanovich V.A. Random field and their influence on the phase transition in disordered ferroelectrics // J.Phys.: Condens.Matter. – 1994. – Vol. 6. – P.6317-6327.
10. Glinchuk M.D., Stephanovich V.A. Theory of the nonlinear susceptibility of relaxor ferroelectrics // J.Phys.: Condens.Matter. – 1998. – Vol. 10. – P.11081-11094.
11. Matsubara F., Sakata M. Theory of Random Magnetic Mixture. III. Glass-Like phase. // Progr.Theor.Phys. – 1976.–Vol. 55, N. 3. – P. 672-682.
12. 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.
13. 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.
14. Mezard M., Parisi G. The Bethe Lattice Spin Glass Revisited. // Eur.Phys B. – 2001.–Vol. 20. – P. 217-233.
15. 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.
16. Krzakala F., Ricci-Tersenghi F.3 and Zdeborov L. Elusive Glassy Phase in the Random Field Ising Model// Phys. Rev. Lett. –2010–104, 207208-207211

17. Matsuda Y., Nishimori H., Zdeborova L., Krzakala F. Random-field p-spin glass model on regular random graphs// J. Phys. A: Math. Theor. -2001–v.44, P.185002.
18. Kim Do-Hyun, Kim Jong-Jean. Nonlinear Susceptibility in Random Field Tunneling Model for Proton Glass// // Ferroelectrics. - 2002. - Vol. 268, - P. 269 - 274.
19. Courtens E. Competing structural ordering and transitions to glass in mixed crystals of $\text{Rb}_{1-x}(\text{NH}_4)_x\text{H}_2\text{PO}_4$. //J. Phys. (Paris) Lett.– 1982.– Vol. 43.– L199.
20. Levitskii R.R., Sorokov S.I., Stankowski J., Trybula Z., Vdovych A.S. Thermodynamics and complex dielectric permittivity of mixed crystals of the $\text{Rb}_{1-x}(\text{NH}_4)_x\text{H}_2\text{PO}_4$ type. // Condens. Matter Phys. – 2008. – Vol. 11, No. 3(55). – P. 523-542.
21. Sorokov S.I., Levitskii R.R., Vdovych A.S. Microscopic Theory of $\text{Rb}_{1-x}(\text{NH}_4)_x\text{H}_2\text{PO}_4$ Type Compounds // Ferroelectrics. – 2009. – Vol. 379, Issue 1. – P. 101 - 106.
22. Sorokov S. I., Levitsky R.R., Vdovych A.S. Thermodynamics, dielectric permittivity and phase diagrams of the $\text{Rb}_{1-x}(\text{NH}_4)_x\text{H}_2\text{PO}_4$ type proton glasses // Condens. Matter Phys. - 2010. - Vol. 13, No 1. - P. 13706: 1-26.
23. Sorokov S. I., Levitsky R.R., Vdovych A.S., Korotkov L.N. Thermodynamic and Dielectric Properties of $\text{K}_{1-x}(\text{NH}_4)_x\text{H}_2\text{PO}_4$ Mixed Crystal // Ferroelectrics. - 2010. - Vol. 397, Issue 1. - P. 43 - 53.
24. Сороков С.І. Термодинамика и диэлектрические свойства смешанных кристаллов $\text{Rb}_{1-x}(\text{NH}_4)_x\text{H}_2\text{PO}_4$ //ИЗВ.РАН, сер.физ.,- 2010 - т.74, №9.-с.1268-1272.
25. Levitskii R.R., Sorokov S.I., Vdovych A.S. Spin model with different types of competing interactions. // Ferroelectrics. – 2005. – Vol. 316. – P. 111-119.
26. Sorokov S.I., Levitskii R.R., Vdovych A.S. Spin-glass model with essential short-range competing interactions. // Condens. Matter Phys. – 2005, – Vol. 8, No. 3(43). – P. 603-622.
27. Сороков С.І., Вдович А.С., Левицький Р.Р. Релаксація та термодинамічні властивості моделі протонного скла з суттєвими короткосяжними конкуруючими взаємодіями // Журн. фіз. досл. - 2009. - Т.13, N 1. - 1701 (9с.).
28. Pighin S.A., Cannas S.A. Phase diagram of an Ising model for ultrathin magnetic films: Comparing mean field and Monte Carlo predictions // Phys. Rev. B. – 2007. – Vol. 75. – P. 224433 (1-9).
29. Cannas S.A., Michelon M.F., Stariolo D.A., Tamarit F.A. Ising nematic phase in ultrathin magnetic films: Monte Carlo study // Phys.

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; “Referatyvnyj Zhurnal”; “Dzherelo”.

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii.

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk (Associate Editor), *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Coventry*; R. Folk, *Linz*; L.E. Gonzalez, *Valladolid*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch (Associate Editor), *Lviv*; M. Holovko (Associate Editor), *Lviv*; O. Ivankiv (Managing Editor), *Lviv*; Ja. Ilnytskyi (Assistant Editor), *Lviv*; N. Jakse, *Grenoble*; W. Janke, *Leipzig*; J. Jedrzejewski, *Wroclaw*; Yu. Kalyuzhnyi, *Lviv*; R. Kenna, *Coventry*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; O. Lavrentovich, *Kent*; M. Lebovka, *Kyiv*; R. Lemanski, *Wroclaw*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Loktev, *Kyiv*; E. Lomba, *Madrid*; O. Makhnats, *Chernivtsi*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod (Associate Editor), *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; O. Pizio, *Mexico*; N. Plakida, *Dubna*; G. Ruocco, *Rome*; A. Seitsonen, *Zürich*; S. Sharapov, *Kyiv*; Ya. Shchur, *Lviv*; A. Shvaika (Associate Editor), *Lviv*; S. Sokolowski, *Lublin*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; J. Strečka, *Košice*; S. Thurner, *Vienna*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; V. Vlachy, *Ljubljana*; 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)2761978; Fax: +38(032)2761158
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>