

Замороженный структурный беспорядок в псевдоспиновой модели с барьерами

В. Л. Коварский, А. Ю. Кузнецов, А. В. Христов

*Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины,
Украина, 83114, г. Донецк, ул. Р. Люксембург, 72
E-mail: kovar@host.dipt.donetsk.ua*

Статья поступила в редакцию 24 мая 1999 г., после переработки 8 ноября 1999 г.

Обоснована и развита псевдоспиновая модель структурно-разупорядоченного кристалла. Учен энергетический барьер между состояниями на узле. Методом Монте-Карло изучено метастабильное стеклообразное состояние в модели. Определены температурные зависимости средней энергии, параметра порядка, параметра Эдвардса-Андерсона и автокорреляционной функции. Показано, что стеклообразное состояние сохраняется до определенной температуры, после чего идет расстеклование. Обнаружены особенности в поведении теплоемкости и восприимчивости, а также аномальное замедление релаксации в области расстеклования. Обсуждается роль энергетического барьера в образовании стеклообразного состояния.

Обґрунтовано та розвинуто псевдоспінову модель структурно-упорядкованого кристалла. Враховано енергетичний бар'єр між станами на вузлі. Методом Монте-Карло вивчено метастабільний склоподібний стан в моделі. Визначено температурні залежності середньої енергії, параметру порядку, параметру Едвардса-Андерсона та автокореляційної функції. Показано, що склоподібний стан зберігається до певної температури, після чого йде розсклування. Виявлено особливості в поведінці теплоємності та сприйнятливості, а також аномальне сповільнення релаксації в області розсклування. Обговорюється роль енергетичного бар'єра в утворенні склоподібного стану.

PACS: 64.60.Cn; 64.70.Pf; 61.43.Vn

Структурный беспорядок в кристаллах и сопутствующие ему явления хорошо аппроксимируются псевдоспиновой моделью, в простейшем случае — моделью Изинга [1,2]. В подобных моделях обычно предполагается, что энергетический барьер между состояниями бесконечно велик (по сравнению с энергией парного взаимодействия), поэтому все термодинамические результаты имеют силу лишь в предположении бесконечно больших времен наблюдения, в течение которых успевают произойти все переходы, необходимые для установления очередного термодинамического равновесия. Таким образом, в традиционном подходе изначально отсутствует возможность исследования кинетических свойств системы без дополнительных, феноменологических предположений. Поскольку псевдоспиновая модель обычно вводится в указанном выше предположении, создается впечатление, что эта модель является исключительно результатом приближения бесконечных барьеров и неприменима в других условиях.

В предлагаемой работе развивается псевдоспиновый подход, не зависящий от приближения бес-

конечно больших барьеров. Показано, что псевдоспиновый формализм можно ввести на уровне точных результатов, пользуясь представлением динамических переменных энергия—время. Показано также, что в этом случае требуется ввести как минимум три состояния псевдоспина, два из которых соответствуют движению в одной из потенциальных ям, а третье описывает надбарьерное движение. Рассмотрен приближенный вариант модели, полученный в предположении малых переходных вероятностей (частот). Методами компьютерного моделирования изучены кинетические особенности приближенной модели и свойства метастабильного стеклоподобного состояния, которое возникает при быстром охлаждении системы из разупорядоченного состояния.

Работа представляет собой развитие и обоснование предложенного ранее полуинтуитивного подхода, в котором было показано влияние конечного энергетического барьера между состояниями на свойства равновесного фазового перехода [3], а также на динамические, тепловые и структурные особенности разупорядоченной кри-

сталлической системы [4,5]. Результаты работ [3–5] использовались для интерпретации некоторых экспериментальных данных [6–8] с точки зрения понятий «замороженной динамики» и метастабильной разупорядоченной фазы.

Будем исходить из гамильтониана

$$H = \sum_i U(q_i) - \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} q_i q_j, \quad (1)$$

где $U(q_i)$ — одночастичный потенциал на узле i , он имеет двухминимумный рельеф и в данной работе аппроксимируется кусочно-параболической зависимостью:

$$U(q) = U_0 \left(\left| \frac{q}{a} \right| - 1 \right)^2, \quad (2)$$

q_i — узловая обобщенная координата, J_{ij} — константа парного взаимодействия. Перейдем к новым каноническим переменным энергия–время по формулам

$$E_i = \frac{p_i^2}{2m_i} + U(q_i) \quad t_i = \int \frac{dq_i}{\sqrt{2[E_i - U(q_i)]/m_i}}, \quad (3)$$

где интеграл берется на одной из траекторий одночастичного движения с фиксированной полной энергией E_i . В случае невзаимодействующих узлов переменная E_i совпадает с полной энергией одночастичной задачи, а t_i с точностью до константы совпадает с текущим временем. Решения уравнений движения в данном случае имеют три различных вида в зависимости от области значений (E_i, t_i) , поэтому обратное преобразование $(p_i, q_i) \rightarrow (E_i, t_i)$, вообще говоря, неоднозначно:

$$q_i = \begin{cases} q_+(E_i, t_i), & E_i < U_0, \quad q_i > 0 \\ q_-(E_i, t_i), & E_i < U_0, \quad q_i < 0 \\ q_0(E_i, t_i), & E_i > U_0 \end{cases}. \quad (4)$$

С помощью спиновых матриц

$$\hat{S}_{zi} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

представим обобщенную координату и энергию в матричном виде:

$$\hat{q}_i(E_i, t_i) = \frac{q_+(E_i, t_i) + q_-(E_i, t_i)}{2} \times \\ \times [\theta(E_i) - \theta(E_i - U_0)] \hat{S}_{zi}^2 +$$

$$+ \frac{q_+(E_i, t_i) - q_-(E_i, t_i)}{2} [\theta(E_i) - \theta(E_i - U_0)] \hat{S}_{zi} + \\ + q_0(E_i, t_i) (1 - \hat{S}_{zi}^2) \theta(E_i - U_0); \quad (5)$$

$$\hat{E}_i = E_i \left\{ \hat{S}_{zi}^2 [\theta(E_i) - \theta(E_i - U_0)] + \right. \\ \left. + (1 - \hat{S}_{zi}^2) \theta(E_i - U_0) \right\}.$$

Собственные значения s_i матрицы \hat{S}_{zi} , равные $s_i = +1; -1; 0$, соответственно отвечают состояниям движения в правой и левой ямах и над барьером. Ступенчатая функция $\theta(x)$ позволяет автоматически учесть пределы изменения переменной E_i в различных областях.

Гамильтониан (1), выраженный в новых переменных, запишется в виде

$$\hat{H} = \sum_i \hat{E}_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \hat{q}_i \hat{q}_j. \quad (6)$$

Таким образом, псевдоспиновое представление в данной задаче может быть введено на уровне точных результатов. Для дальнейших расчетов на основе (6) вводится приближенная модель (границы применимости и другие варианты приближений будут подробно проанализированы в следующей работе). Предполагая, что частоты движения в пределах одночастичных траекторий много больше частот перехода между этими траекториями, можно усреднить (6) по «быстрым» переменным t_i . В результате получаем

$$\hat{H} = \sum_i \hat{E}_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \hat{S}_{zi} \hat{S}_{zj}. \quad (7)$$

Псевдоспиновые и энергетические переменные в данном случае разделяются. Действительно, неравновесная свободная энергия

$$F = \int \text{Sp} [\hat{P}(\hat{H} + T \ln \hat{P})] dE_i dt_i \quad (8)$$

минимизируется относительно параметров E_i , в результате чего получаем

$$\hat{P} = \hat{\rho}(\{\hat{S}_i\}) \prod_i \hat{\rho}(E_i), \quad (9)$$

где $\hat{\rho}(E_i)$ представляет собой больцмановское распределение по энергиям:

$$\hat{\rho}(E_i) = \exp(-E_i/T) \left\{ Z_1^{-1} \hat{S}_{zi}^2 [\theta(E_i) - \theta(E_i - U_0)] + \right.$$

$$+ Z_0^{-1} (1 - \hat{S}_{zi}^2) \theta(E_i - U_0) \}. \quad (10)$$

Парциальные статистические суммы Z_1 , Z_0 берутся соответственно по областям внутриямного и надбарьерного одночастичного движения:

$$Z_+ = Z_- \equiv Z_1 = \int_0^1 e^{-\epsilon/\tau} g(\epsilon) d\epsilon, \quad Z_0 = \int_1^\infty e^{-\epsilon/\tau} g(\epsilon) d\epsilon, \quad (11)$$

где $g(\epsilon)$ — плотность состояний с приведенной энергией $\epsilon \equiv E/U_0$; $\tau \equiv T/U_0$ — приведенная температура. Проинтегрировав свободную энергию (8) по переменным $\{E_i, t_i\}$, получим выражение, аналогичное (8), с псевдоспиновой матрицей плотности $\hat{\rho}$ ($\{\hat{S}_i\}$) и эффективным гамильтонианом

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \hat{S}_{zi} \hat{S}_{zj} - T \ln \left(\frac{Z_1}{Z_0} \right) \sum_i \hat{S}_{zi}^2 - TN \ln Z_0, \quad (12)$$

где N — полное число узлов в решетке. Второе и третье слагаемые в этом выражении представляют собой одноузельную свободную энергию, усредненную по трем областям одночастичного движения. Действительно, с помощью операторов заполнения областей одночастичного движения

$$\left. \begin{aligned} \hat{n}_{i+} - \hat{n}_{i-} &= \hat{S}_{zi} \\ \hat{n}_{i+} + \hat{n}_{i-} &= \hat{S}_{zi}^2 \\ \hat{n}_{i+} + \hat{n}_{i-} + \hat{n}_{i0} &= 1 \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

каждый одноузельный член из (12) можно записать в виде

$$-T \ln \left(\frac{Z_1}{Z_0} \right) \hat{S}_{zi}^2 - T \ln Z_0 = -T \sum_{\alpha=\{+,-,0\}} \hat{n}_{i\alpha} \ln Z_\alpha, \quad (14)$$

что представляет собой взвешенную сумму квазиравновесных парциальных свободных энергий $F_{i\alpha} = -T \ln Z_\alpha$.

Модель (12) может служить основой для исследования эффектов надбарьерного движения и замороженного беспорядка в структурно-разупорядоченных кристаллах. Она представляет собой модель Изинга, дополненную состоянием надбарьерного движения $s_i = 0$ и находящуюся под действием эффективного «поля анизотропии» (14), зависящего от температуры. В дальнейшем мы будем называть эту модель псевдоспиновой моделью с барьерами (ПМБ).

С помощью компьютерного эксперимента были изучены свойства ПМБ и показано, что в данной модели действительно имеется стеклообразное состояние замороженного беспорядка. Расчеты проводили на двумерной решетке 30×30 узлов с несимметричными граничными условиями — все граничные псевдоспины были сонаправлены: $s_i = 1$. Рассматривалось взаимодействие только ближайших соседей, причем было принято $j \equiv J_{\langle ij \rangle} / U_0 = 1$. Стартовую конфигурацию приготавливали однородным перемешиванием спиновых чисел $s_i = \pm 1$, взятых в равных пропорциях. Размер решетки $N = 30^2$ позволял системе эффективно воспринимать поле анизотропии, задаваемое граничными условиями.

В качестве техники моделирования использовался алгоритм термостата. Так как пространство состояний на узле подразделяется на две области (правая и левая потенциальные ямы, связанные областью надбарьерного движения), то имеем два стохастических процесса, протекающих в обеих областях, но связанных общим каналом — надбарьерной областью. Для этого случая возможно выписать основное уравнение, распадающееся на два эволюционных уравнения для каждой из двух областей [9], где состояниями на узле будут значения псевдоспина:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(x)}{\partial t} &= \sum_{x'} [W(x|x')p(x') - W(x'|x)p(x)] + \\ &+ \sum_y [W(x|y)p(y) - W(y|x)p(x)], \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(y)}{\partial t} &= \sum_{y'} [W(y|y')p(y') - W(y'|y)p(y)] + \\ &+ \sum_x [W(y|x)p(x) - W(x|y)p(y)], \end{aligned}$$

где x, x' — состояния в первой области, а y, y' — состояния во второй области; $p(x), p(y)$ — вероятности соответствующих состояний; векторы состояний имеют размерность N . Вторые члены в обоих уравнениях отвечают за переходы между двумя областями. В нашем случае переходы осуществляются через надбарьерное состояние, эволюционно принадлежащее обеим областям. Соответственно модифицируя метод термостата, получаем все вероятности переходов на узле: псевдоспин на i -м узле из состояния $s_i = \pm 1$ может перейти в состояние с $s_i = 0$ с вероятностью

$$W_{\pm 1 \rightarrow 0} = \frac{\exp(-E_i^0/\tau)}{\exp(-E_i^{\pm}/\tau) + \exp(-E_i^0/\tau)}, \quad (16)$$

где

$$E_i^{\pm} = \mp \frac{1}{2} j s_i \sum_k s_k - \tau \ln(Z_1/Z_0) s_i^2, \quad E_i^0 = 0,$$

или может остаться в прежнем состоянии с вероятностью

$$W_{\pm 1} = \frac{\exp(-E_i^{\pm}/\tau)}{\exp(-E_i^{\pm}/\tau) + \exp(-E_i^0/\tau)}. \quad (17)$$

Из состояния $s_i = 0$ спин может перейти в любое из состояний $s_i = \pm 1$ с вероятностью

$$W_{0 \rightarrow \pm 1} = \frac{\exp(-E_i^{\pm}/\tau)}{\exp(-E_i^-/\tau) + \exp(-E_i^+/\tau) + \exp(-E_i^0/\tau)} \quad (18)$$

или остаться в прежнем состоянии с вероятностью

$$W_0 = \frac{\exp(-E_i^0/\tau)}{\exp(-E_i^-/\tau) + \exp(-E_i^+/\tau) + \exp(-E_i^0/\tau)}. \quad (19)$$

Введенные вероятности переходов удовлетворяют условию детального баланса в равновесии $\partial p(x)/\partial t = \partial p(y)/\partial t = 0$, что проверяется непосредственной подстановкой вероятностей переходов в систему (15).

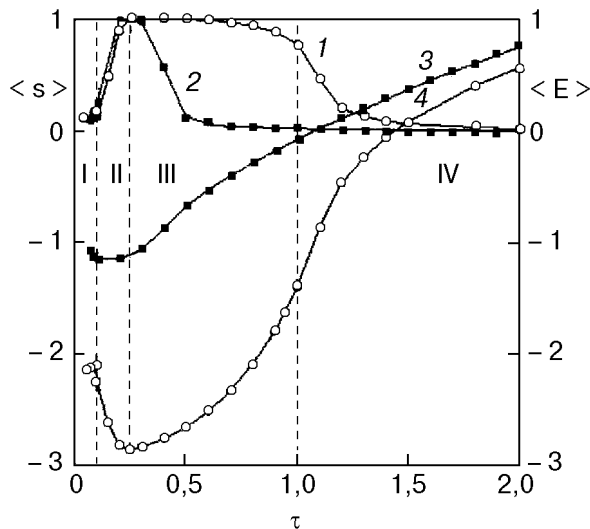


Рис. 1. Температурные зависимости среднего значения спина $\langle s \rangle$ (1, 2) и средней энергии $\langle E \rangle$ (3, 4). Пунктирные линии разграничивают температурные диапазоны; $j = 1$ (○) и 0,1 (■).

В процессе моделирования через каждые 10 итераций измерялись средняя энергия $\langle E(t) \rangle$ на узел, мгновенное среднее значение псевдоспина $\langle s(t) \rangle$, параметр порядка, соответствующий параметру Эдвардса—Андерсона для спиновых стекол $q(t)$, функция автокорреляций псевдоспина $\langle s_j(0)s_j(t) \rangle$:

$$\langle E(t) \rangle = \frac{H}{N}; \quad \langle s(t) \rangle = \sum_j \frac{s_j(t)}{N};$$

$$q(t) = \sum_{j=1}^N \left[\int_{t_i}^t s_j(t') dt' / (t - t_i) \right]^2 / N; \quad (20)$$

$$\langle s_j(0)s_j(t) \rangle = \frac{\sum_j \int_{t_i}^{t_f-t} s_j(t') s_j(t' + t) dt}{N(t_f - t - t_i)}.$$

Соответственно, усредняя по времени, имеем

$$\langle E \rangle = \int_{t_i}^{t_f} \frac{\langle E(t') \rangle dt'}{t_f - t_i}, \quad (21)$$

$$\langle s \rangle = \int_{t_i}^{t_f} \frac{\langle s(t') \rangle dt'}{t_f - t_i}, \quad (22)$$

где t_i — время начала измерений, t_f — предельное количество итераций, отсчитываемое от t_i . Было взято $t_i = 100$ шагов на каждый узел, а $t_f = 5000$ шагов на узел. Введенная функция автокорреляций для больших времен наблюдения переходит в параметр Эдвардса—Андерсона $q(t)$.

Измеряя флуктуации энергии и среднего значения спина, можно рассчитать теплоемкость и обобщенную восприимчивость:

$$C = N \sum_{l=1}^{n_l} \frac{[\langle E(t_l) \rangle - \langle E \rangle]^2}{n_l \tau^2}, \quad (23)$$

$$\chi = N \sum_{l=1}^{n_l} \frac{[\langle s(t_l) \rangle - \langle s \rangle]^2}{n_l \tau^2},$$

где $n_l = (t_f - t_i)/\Delta t$, $\Delta t = 10$ итераций.

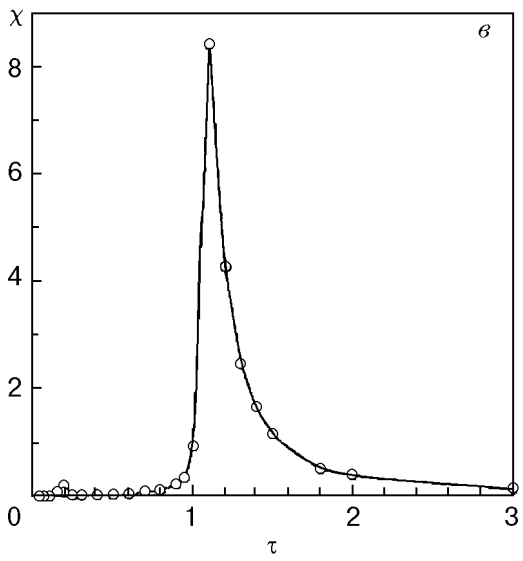
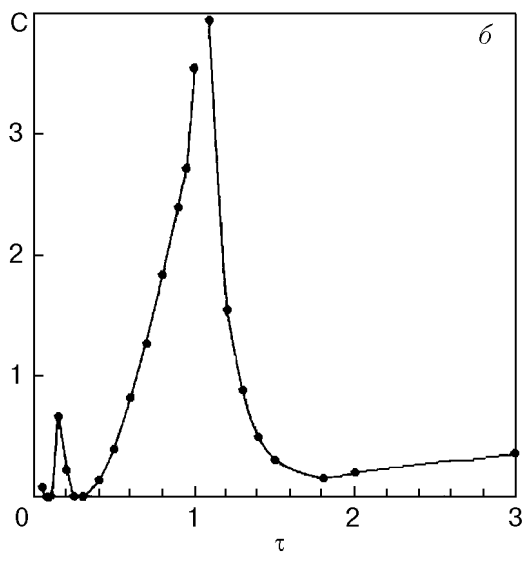
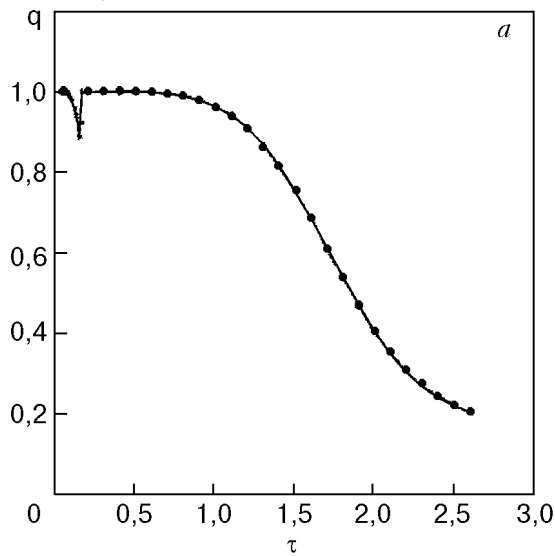


Рис. 2. Температурные зависимости параметра Эдвардса – Андерсона q (а), теплоемкости C (б) и обобщенной восприимчивости χ (в).

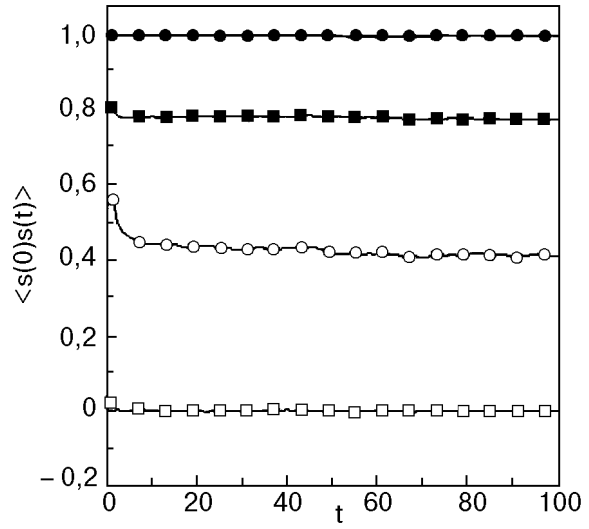
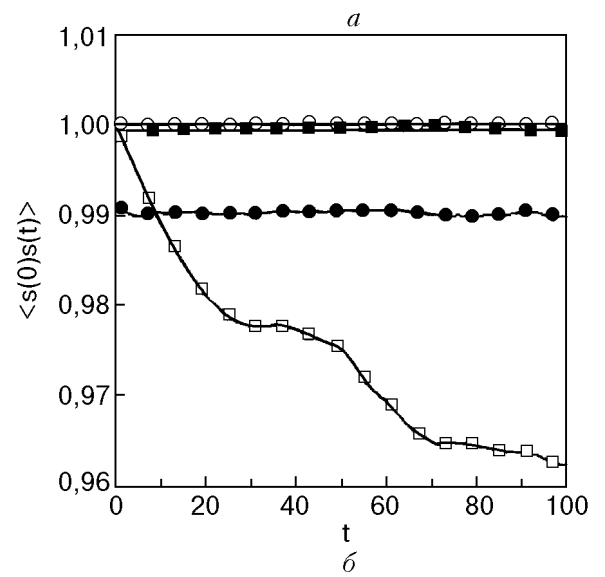


Рис. 3. Временные зависимости $\langle s(0)s(t) \rangle$ для I–III температурных диапазонов при $\tau = 0,1$ (○); 0,2 (□); 0,3 (■); 0,5 (●) (а) и для III–IV диапазонов при $\tau = 0,5$ (●); 0,9 (■); 1,0 (○); 1,1 (□) (б).

На рис. 1 показаны полученные в численном эксперименте температурные зависимости среднего значения псевдоспина (22) и средней энергии (21). На рис. 2 представлены температурные зависимости параметра Эдвардса – Андерсона (20), теплоемкости и обобщенной восприимчивости, вычисленные по формулам (23). Изменения автокорреляций во времени показаны на рис. 3, а их температурный ход – на рис. 4. Исходя из поведения кривых можно выделить четыре температурных диапазона:

- I – метастабильная фаза стекла: $\tau \leq 0,1$;
- II – зона перехода от метастабильной фазы к упорядоченной (расстеклование): $0,1 < \tau < 0,25$;
- III – зона упорядоченной фазы: $0,25 \leq \tau \leq 1$;
- IV – зона разупорядочения: $\tau > 1$.

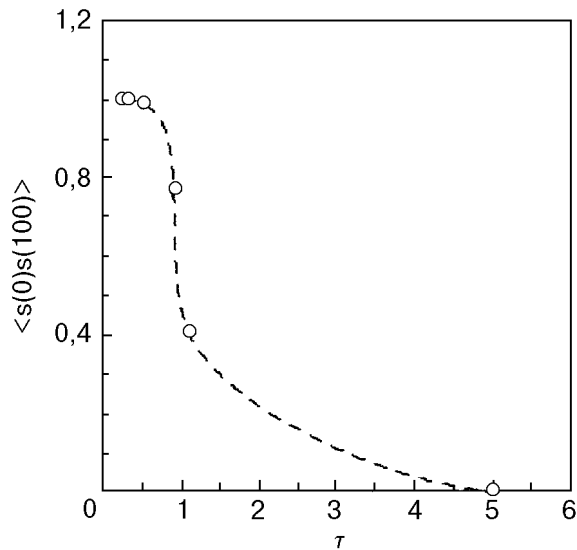


Рис. 4. Температурная зависимость $\langle s(0)s(t) \rangle$ в III–IV температурных диапазонах. Время наблюдения $t = 100$ соответствует насыщению функции автокорреляции для данных температур.

Дальнейшее изложение результатов удобно провести, рассматривая отдельно каждый температурный диапазон.

I. Главная особенность метастабильной фазы — замораживание спиновой динамики. Параметр Эдвардса — Андерсона $q(\tau)$, характеризующий степень спиновой динамики на узле, равен единице в пределах погрешности эксперимента (рис. 2). Функция автокорреляции не имеет особенностей и вырождается в константу (рис. 3). Вся возможная спиновая динамика в этом диапазоне связана не с тепловыми флуктуациями, а с обменным взаимодействием — подстройкой псевдоспина к его локальному окружению. При этом потенциальный барьер на узле играет роль запирающего механизма, эффективно запрещая температурные переходы между псевдоспиновыми состояниями. И стартовая конфигурация, достигнув состояния, в котором любой единичный «поворот» псевдоспина не может уменьшить энергию связи с его соседями, «замерзает» в этом состоянии. Таким образом, учет надбарьерных одноузельных состояний порождает механизм получения локальных энергетических минимумов системы. На верхней границе данного температурного диапазона механизм тепловых флуктуаций становится актуальным, и, постепенно переходя от одного локального минимума к другому, система может достигать абсолютного энергетического минимума. В случае спиновых стекол локальные минимумы получали введением дополнительных правил тестирования одноузельных состояний системы [10], что с фи-

зической точки зрения выглядит достаточно произвольно.

Ранее в [4,5] был предложен феноменологический подход к изучению метастабильного состояния в рамках ПМБ. Рассматривалась кристаллическая решетка, представляющая собой однородную смесь равномерно распределенных узлов двух типов. В случае узлов типа 1 накладывался запрет на заселение левой потенциальной ямы, а для типа 2 — правой. Тем самым достигался тот же эффект ограничения влияния тепловых флуктуаций, но менее физическим методом. Соответственно, в первом температурном диапазоне присутствовали надбарьерные состояния, отсутствующие в том же диапазоне в численном эксперименте, в котором тепловые флуктуации не запрещены, но эффективно «отсекаются» потенциальным барьером на узле.

II. В зоне расстеклования тепловые флуктуации становятся достаточными, чтобы система покинула локальный энергетический минимум, но еще недостаточными, чтобы она могла непосредственно, минуя локальные минимумы, перейти в упорядоченную фазу. Система мигрирует в фазовом пространстве, перебирая всевозможные минимумы в энергетическом рельефе состояний. Соответственно на кривых теплоемкости (рис. 2,б) и восприимчивости (рис. 2,в) возникает пик, предваряющий главный максимум, связанный с переходом порядок — беспорядок.

Параметр $q(\tau)$ в этом диапазоне резко уменьшается с 1 до $\approx 0,7$, что указывает на размораживание спиновой динамики. Однако рост числа надбарьерных узельных состояний пока незначителен — приблизительно 0,24–1,5 переходов в надбарьерные состояния за одну итерацию, что не позволяет системе в целом лавинообразно достичь своего основного состояния.

Функция автокорреляции обнаруживает зависимость от времени наблюдения (рис. 3,а). Кинетика на узлах характеризуется очень медленной неэкспоненциальной релаксацией подобно случаю спинового стекла для температур выше T_c [11].

III–IV. В зоне упорядоченной фазы тепловые флуктуации достигают по энергии масштаба локальных минимумов, поэтому система «проваливается» в основное состояние экспоненциально по времени. В зоне разупорядочения тепловые флуктуации разрушают порядок, не позволяя системе находиться в основном состоянии. Поведение зависимостей среднего значения псевдоспина $\langle s(\tau) \rangle$ и средней энергии $\langle E(\tau) \rangle$ в этих температурных областях достаточно тривиально. Функция автокорреляции в этих диапазонах экспоненциально релаксирует к предельному значению, зависящему

от температуры (см. рис. 3,б). В этом случае можно построить зависимость $\langle s(0)s(t) \rangle$ от температуры τ , зафиксировав t (рис. 4).

Максимум среднего значения псевдоспина достигается при $\tau = 0,25$. Наименьшую подвижность псевдоспина следует ожидать в упорядоченном состоянии системы, где тепловые флуктуации еще не могут «раскачать» псевдоспины, оказавшиеся в окружении с наименьшей обменной энергией. Функция автокорреляции и параметр Эдвардса — Андерсона прямо указывают на это.

В рассматриваемых экспериментах приведенная константа парного взаимодействия $j = 1$. Были проведены сравнительные измерения с $j = 0,1$ (см. рис. 1). Видно, что с понижением j влияние механизма обменного взаимодействия ослабевает по сравнению с влиянием механизма тепловых флуктуаций, что влечет сужение упорядоченной фазы по температуре, смещение фазового перехода в область более низких температур, а также смещение вниз по температуре границы зоны расстеклования.

Выводы

1. Энергетический барьер между состояниями на узле порождает существование метастабильного стеклообразного состояния в области низких температур.

2. Разрушение стеклообразного состояния происходит в определенном температурном интервале и сопровождается рядом термодинамических и кинетических особенностей.

3. Возникают особенности в поведении теплоемкости и обобщенной восприимчивости в зоне расстеклования.

4. Автокорреляционная функция псевдоспинов в области расстеклования резко убывает во времени, а после прохождения этой температурной зоны вновь восстанавливается. Релаксация состояний на узлах в области расстеклования сильно замедлена и имеет неэкспоненциальный характер.

Таким образом, псевдоспиновая модель с барьерами позволяет в рамках псевдоспинового подхода описывать стеклообразное состояние и эффекты надбарьерного движения в структурно-разупорядоченных кристаллах. Отметим, что стеклообразное состояние в структурно-разупорядоченном кристалле изучалось ранее на упрощенных моделях, допускающих точные решения. Так, рассмат-

ривалась модель ϕ^4 , содержащая малое число узлов (решетка 4×4 , прямой численный расчет) [12], модель ϕ^4 с бесконечным радиусом взаимодействия [13], одномерная цепочка с взаимодействием ближайших соседей и кусочно-параболическим одноузельным потенциалом [14].

1. В. Г. Вакс, А. И. Ларкин, *ЖЭТФ* **49**, 975 (1965).
2. R. Blinc and B. Žekš, *Adv. Phys.* **21**, 693 (1972).
3. В. Л. Коварский, Б. Я. Сухаревский, *ФНТ* **18**, 1274 (1992).
4. В. В. Еременко, В. Л. Коварский, И. В. Рубан, Б. Я. Сухаревский, *ФНТ* **15**, 444 (1989).
5. В. Л. Коварский, А. В. Христов, *ФНТ* **21**, 874 (1995).
6. Ф. А. Бойко, Г. Ю. Бочковая, С. А. М. Быков, Б. Я. Сухаревский, *ФНТ* **12**, 1105 (1986).
7. Б. Я. Сухаревский, В. Г. Ксенофонтов, В. Л. Коварский, А. Н. Ульянов, И. В. Вилкова, *ЖЭТФ* **87**, 1336 (1984).
8. Н. Д. Гаврилова, С. В. Павлов, *Изв. АН СССР. Неорганич. материалы* **27**, 566 (1991).
9. C. W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Science*, Springer, Berlin-Heidelberg-New York-Tokyo (1985).
10. E. S. Rodrigues and P. M. C. Olivera, *J. Stat. Phys.* **74**, 1265 (1994).
11. K. Binder and K. Schröder, *Phys. Rev.* **B14**, 2142 (1976).
12. А. А. Овчинников, И. Л. Шамовский, *ДАН СССР* **293**, 910 (1987).
13. А. А. Ovchinnikov and V. A. Onischuk, *Physica A* **167**, 756 (1990).
14. P. Reichert and R. Schilling, *Phys. Rev.* **B32**, 5731 (1985).

Frozen structure disorder in the barrier pseudospin model

V. L. Kovarsky, A. Yu. Kuznetsov,
and A. V. Khristov

A pseudospin model of structure disordered crystal is proposed with due account of the finite energy barrier between the states at a site. This energy barrier is described by the third state of pseudospin $S_z = 0$ in the framework of the three-component model with pseudospin $S = 1$. The metastable glass state in the model is studied by the Monte-Carlo technique. Temperature dependencies of average energy, order parameter, Edwards-Anderson parameter and autocorrelation function are determined. It is shown that the glass state is stable up to a certain temperature after which the glass structure is broken down. Some peculiarities in the behavior of heat capacity and susceptibility and an abnormal deceleration of relaxation in the region of glass structure destruction are observed.