

10,04

Фононы и кроссовер Иоффе–Регеля в случайных решетках произвольной размерности

© Д.А. Конюх

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: conyuh.dmitrij@yandex.ru

Поступила в Редакцию 8 июля 2021 г.

В окончательной редакции 13 июля 2021 г.

Принята к публикации 16 июля 2021 г.

В рамках подхода теории случайных матриц показано, что релаксация проекции исходной плоской волны с волновым вектором \mathbf{q} описывается уравнением движения с запаздывающей частью в виде комплексного динамического модуля Юнга $E(\omega)$. В гармонической скалярной модели смещений в отсутствие диссипации энергии кроссовер Иоффе–Регеля возникает универсальным образом в аморфных системах с размерностью $d \geq 3$. Колебания выше кроссовера Иоффе–Регеля имеют диффузионную природу и могут быть описаны уравнением диффузии с затуханием $\Gamma(\mathbf{q}) \propto q^2$.

Ключевые слова: аморфные тела, диффузия колебаний, случайные матрицы.

DOI: 10.21883/FTT.2021.12.51658.06s

1. Введение

Аморфные диэлектрики обладают рядом колебательных свойств, которые принципиальным образом отличаются такие неупорядоченные системы от кристаллических. Процессы релаксации колебаний, влияющие на эти свойства, играют важную роль при исследовании аморфных систем [1]. Низкочастотная область колебаний аморфных сред выражена фононами с большой длиной свободного пробега. Однако в широком диапазоне частот ниже порога локализации колебания распространяются посредством диффузионной передачи энергии от атома к атому [2,3]. Эти колебания отвечают за вторичный рост теплопроводности аморфных диэлектриков при температурах от 20 до 1000 К [1]. Кроссовер между низкочастотными фононами и более высокочастотными диффузными колебаниями известен как кроссовер Иоффе–Регеля, при котором длина свободного пробега фонона становится сравнимой с его длиной волны [3].

Практически во всех стеклах вне зависимости от их химического состава наблюдаются универсальные колебательные особенности вблизи кроссовера Иоффе–Регеля [4,5]. Это бозонный пик, характеризующий избыточную плотность колебательных состояний $g(\omega)$ по сравнению с законом Дебая, согласно которому низкочастотная плотность состояний пропорциональна ω^{d-1} , где d — размерность пространства [6]. Пик, наблюдаемый в приведенной плотности состояний $g(\omega)/\omega^{d-1}$ во многих экспериментах [7–10], и получил название бозонного пика. Кроме этого, данные по неупругому рентгеновскому рассеянию в стеклах показывают диффузионную особенность затухания $\Gamma(\mathbf{q}) \propto q^2$ выше кроссовера Иоффе–Регеля по сравнению с рэлеевской зависимостью $\Gamma(\mathbf{q}) \propto q^{d+1}$ ниже кроссовера [11–13]. Также отмечается

линейная корреляция частоты кроссовера Иоффе–Регеля ω_{IR} с упругими модулями аморфной среды [14,15]. В ряде экспериментальных работ, посвященных исследованию колебаний в двумерных системах, наблюдаются все вышеперечисленные особенности [16–19]. Поэтому описание кроссовера Иоффе–Регеля дает ключ к пониманию процессов колебаний в неупорядоченных средах.

Существуют разные теоретические подходы, используемые для описания данных феноменов аморфных сред [20–25]. Одним из таких подходов является применение теории случайных матриц [26–29]. Можно предполагать, что в аморфных телах, вследствие локального беспорядка, элементы динамической матрицы системы до некоторой степени случайны [30]. В то же время, ближний порядок в стеклах напоминает ближний порядок в соответствующих кристаллах, однако дальний порядок отсутствует. Это позволяет рассматривать только ближнее взаимодействие атомов системы, расположенных при этом в узлах решетки соответствующего кристалла [30]. Такое рассмотрение сильно разреженной случайной динамической матрицы позволяет изучить приведенные особенности колебаний в некоторых двумерных и трехмерных неупорядоченных системах, как с численной, так и с аналитической точек зрения [29,31–33].

Целью настоящей работы является аналитическое описание диффузии колебаний и кроссовера Иоффе–Регеля с помощью теории случайных матриц. При этом найденные выражения и выводы не привязаны к какой-то конкретной неупорядоченной системе (аморфному телу), а носят обобщающий характер для аморфных сред с произвольным локальным расположением атомов и размерностью. В частности, изучение колебательных свойств неупорядоченных систем с разной размерно-

стью представляет интерес при исследовании квазилокальных колебаний. Вклад квазилокальных колебаний в плотность состояний $g_{\text{qlv}} \propto \omega^\beta$, $\beta \approx 4$ для большинства стекол [34,35] не зависит от размерности системы. Изучение систем с размерностью $d > 3$ позволяет отличить моды этих колебаний от рэлеевского рассеяния фононов на беспорядке, которое дает вклад $g \propto \omega^{d+1}$.

2. Представление динамической матрицы \hat{M} в виде коррелированного ансамбля Вишарта

Динамическая матрица \hat{M} строится с учетом основных симметричных свойств механической неупорядоченной системы. Рассматриваемая модель описывает гармонические колебания системы, состоящей из большого числа частиц N вблизи их положения равновесия без диссипации энергии. Для упрощения полагается, что атомы обладают единичными массами, и смещения атомов являются скалярными величинами [29]. В этом случае число степеней свободы системы совпадает с числом атомов N . Динамическая матрица \hat{M} связана с полной энергией взаимодействия частиц такой системы U следующим образом [36]:

$$M_{ij} = \frac{\partial^2 U}{\partial u_i \partial u_j}, \tag{1}$$

где индексы i и j нумеруют атомы (степени свободы), u_i — скалярное смещение i -го атома из положения равновесия.

Нахождение системы вблизи устойчивого положения равновесия означает положительную определенность динамической матрицы \hat{M} [30], поэтому ее можно представить в следующем виде:

$$\hat{M} = \hat{A}\hat{A}^T, \tag{2}$$

где \hat{A} — матрица размером N на K . Каждая строка матрицы \hat{A} — соответствует степени свободы системы, а каждый ее столбец соответствует связи некоторого числа степеней свободы между собой [31]. Вследствие локальной флуктуации связей системы можно считать, что элементы матрицы \hat{A} — случайные числа, имеющие гауссово распределение [30]. Тогда (2) соответствует представлению динамической матрицы \hat{M} в виде ансамбля Вишарта случайных матриц. Такая модель описывает многие универсальные колебательные свойства неупорядоченных систем [29,33]. При этом механическая устойчивость системы не накладывает ограничений на вид матрицы \hat{A} .

Соотношение числа связей K и числа степеней свободы N играет важную роль при исследовании колебаний механических систем [37,38]. В данной модели рассматривается параметр $\kappa = K/N - 1$, показывающий относительное увеличение числа связей над числом

степеней свободы системы. При $\kappa \leq 0$ система не обладает макроскопической жесткостью в соответствии с правилом Максвелла [39]. При $\kappa > 0$ система обладает конечной макроскопической жесткостью, вследствие чего низкочастотные колебания системы существуют в виде плоских волн и подчиняются закону Дебая [29]. Случай $\kappa = 0$ соответствует предельно мягкой системе, в которой все колебания распространяются посредством некоторой диффузионной передачи энергии от атома к атому [29]. Будем варьировать параметр системы κ в широких пределах $0 \leq \kappa < \infty$.

Колебания механической системы не зависят от ее сдвига как целой, в результате чего симметричная динамическая матрица должна подчиняться правилу сумм: $\sum_i M_{ij} = \sum_j M_{ij} = 0$ [36]. Это приводит к правилу $\sum_i A_{ij} = 0$, в результате которого элементы матрицы \hat{A} — являются коррелированными. Статистические свойства некоррелированного ансамбля Вишарта хорошо изучены в рамках теории случайных матриц [40,41]. Однако правило сумм приводит к более сложной задаче о нахождении спектральных свойств коррелированного ансамбля Вишарта. Тем не менее, учет правила сумм является важным, поскольку обеспечивает наличие низкочастотных колебаний в виде плоских волн, подчиняющихся закону Дебая [29].

Для учета этих корреляций будем считать, что все связи статистически одинаковы и независимы, то есть отдельные столбцы матрицы \hat{A} не коррелируют друг с другом. Тогда парные корреляции между матричными элементами A_{ij} имеют вид

$$\langle A_{ik} A_{jl} \rangle = \frac{1}{N} C_{ij} \delta_{kl}, \tag{3}$$

где \hat{C} — корреляционная матрица, скобки $\langle \cdot \rangle$ означают усреднение по различным реализациям динамической матрицы \hat{M} . Усредненная по ансамблю динамическая матрица связана с матрицей корреляций

$$\langle M_{ij} \rangle = \langle \sum_k A_{ik} A_{jk} \rangle = K \langle A_{ik} A_{jk} \rangle = \frac{K}{N} C_{ij}. \tag{4}$$

Если число связей K существенно превосходит число степеней свободы N , то динамическая матрица \hat{M} слабо отличается от усредненной матрицы $\langle \hat{M} \rangle = (\kappa + 1)\hat{C}$. Поэтому интересным представляется случай малой разницы K и N , то есть случай $\kappa \ll 1$.

Статистические свойства случайной матрицы \hat{M} связаны со статистическими свойствами матрицы корреляций \hat{C} [42]. Можно ожидать, что элементы усредненной по различным реализациям динамической матрицы имеют одинаковые значения, вследствие чего матрица корреляций описывает регулярную систему [42]. Тогда волновой вектор системы $|\mathbf{q}\rangle$ является собственным вектором матрицы \hat{C} , а ее собственные значения соответствуют квадратам частот колебаний регулярной системы $\omega_{\text{cor}}^2(\mathbf{q})$. В работах [32,33] были рассмотрены регулярные системы, соответствующие двумерной и трехмерной

кубическим решеткам, для которых дисперсионная зависимость $\omega_{\text{cor}}(\mathbf{q})$ является известной. В данной работе считается, что в общем случае при малых волновых векторах $\omega_{\text{cor}}(\mathbf{q}) \propto q$ вне зависимости от конкретного вида матрицы корреляций и размерности системы.

3. Динамический модуль Юнга

Покажем, что движение профиля смещений атомов $u_{\mathbf{q}}(t)$ может быть описано с помощью уравнения движения с запаздывающей частью. Построенная динамическая матрица \hat{M} (2) описывает малые гармонические колебания в неупорядоченной системе в виде уравнения движения

$$|\ddot{u}(t)\rangle = -\hat{M}|u(t)\rangle, \quad (5)$$

где N -мерный вектор $|u(t)\rangle$ описывает отклонение атомов от их положения равновесия в момент времени t . Уравнение движения (5) может быть решено при задании начальных условий $|u(0)\rangle = 0$, $|\dot{u}(0)\rangle = v_0|\mathbf{q}\rangle$.

В то же время, за счет перераспределения энергии между внутренними степенями свободы системы, проекция $\langle u(t)|\mathbf{q}\rangle$ плоской волны с волновым вектором \mathbf{q} может испытывать релаксацию. Для изучения этого процесса рассмотрим усредненную проекцию плоской волны $u_{\mathbf{q}}(t) = \langle u(t)|\mathbf{q}\rangle$, которая связана с функцией Грина $G_{\mathbf{q}}(z)$ динамической матрицы в виде Фурье-преобразования

$$u_{\mathbf{q}}(t) = -\frac{v_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_{\mathbf{q}}((\omega - i0)^2) e^{i\omega t} d\omega, \quad (6)$$

$$G_{\mathbf{q}}(z) = \sum_n \frac{|\langle n|\mathbf{q}\rangle|^2}{z - \omega_n^2}. \quad (7)$$

Частота ω_n соответствует собственному состоянию $|n\rangle$, z — комплексная переменная.

В работах [33,43] показано, что в термодинамическом пределе $N \rightarrow \infty$ функция Грина $G_{\mathbf{q}}(z)$ имеет следующий вид:

$$G_{\mathbf{q}}(z) = \frac{1}{z - \omega_{\text{cor}}^2(\mathbf{q})E(z)}, \quad (8)$$

где комплексная функция $E(z) = z/Z(z)$ в скалярной модели смещений играет роль динамического комплексного модуля Юнга, вещественная часть которого $\text{Re} E(z)$ описывает упругость, а мнимая часть $\text{Im} E(z)$ — вязкость. При этом комплексные параметры z и Z связаны конформным преобразованием $Z(z)$ следующего вида [44]:

$$\varkappa Z + \frac{Z^2}{N} \text{Tr} \hat{R}_{\text{cor}}(Z) = z, \quad (9)$$

где резольвента $\hat{R}_{\text{cor}}(Z)$ соответствует резольвенте матрицы корреляций

$$\hat{R}_{\text{cor}}(Z) = \sum_{\mathbf{q}} \frac{|\mathbf{q}\rangle\langle\mathbf{q}|}{Z - \omega_{\text{cor}}^2(\mathbf{q})}. \quad (10)$$

Такой вид функции Грина (8) соответствует уравнению движения усредненной проекции плоской волны $u_{\mathbf{q}}(t)$ с запаздывающей частью

$$\ddot{u}_{\mathbf{q}}(t) + \omega_{\text{cor}}^2(\mathbf{q}) \int_{-\infty}^t \mathcal{K}(t - \tau) u_{\mathbf{q}}(\tau) d\tau = 0, \quad (11)$$

в котором запаздывающее ядро является Фурье-преобразованием динамического модуля Юнга

$$\mathcal{K}(t - \tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} E((\omega - i0)^2) e^{i\omega(t - \tau)} d\omega. \quad (12)$$

Комплексный динамический модуль Юнга $E(z)$ может быть найден из конформного преобразования (9) при нахождении зависимости $Z(z)$ в явном виде. Эта зависимость, вообще говоря, является особенной для конкретной регулярной системы, описываемой матрицей корреляций \hat{C} , с соответствующей дисперсией $\omega_{\text{cor}}^2(\mathbf{q})$. В следующем разделе, исходя из достаточно общих предположений о свойствах большинства таких систем, выводится приближенный общий вид $E(z)$.

4. Низкочастотное приближение

С помощью ряда приближений универсальным образом удастся получить запаздывающую часть и уравнение движения профиля смещений в явном аналитическом виде. Нормированный след резольвенты (10) матрицы корреляций может зависеть от комплексного параметра Z сложным образом. Эта зависимость определяется конкретным видом вспомогательной регулярной системы, описываемой матрицей корреляций. Однако будем считать, что низкочастотная область колебаний такой системы вне зависимости от ее конкретного вида и размерности обусловлена фононами с линейным законом дисперсии $\omega_{\text{cor}}(\mathbf{q}) = \Omega q$ при $q \rightarrow 0$. Постоянная Ω определяет характерную частоту колебаний системы.

В двумерных системах $d = 2$ с низкочастотным линейным законом дисперсии имеется логарифмическая расходимость $N^{-1} \text{Tr} \hat{R}_{\text{cor}}(Z) \simeq \ln(-Z) + O(Z)$ при малых $Z \rightarrow 0$. Такая особенность двумерных систем связана с их постоянной плотностью распределения квадратов частот вблизи нуля. Однако в системах с размерностью $d \geq 3$ разложение резольвенты имеет общий вид $N^{-1} \text{Tr} \hat{R}_{\text{cor}}(Z) = -a^2 + f(Z)$, где константа a не зависит от Z . Например, для простой трехмерной кубической решетки константа $a \approx 0.505462$ (постоянная Ватсона) [45], и функция $f(Z) \simeq \sqrt{-Z} + O(Z)$ имеет корневую особенность при малых Z [46]. Поэтому в первом приближении при $Z \rightarrow 0$ ограничимся только константой: $N^{-1} \text{Tr} \hat{R}_{\text{cor}}(Z) \simeq -a^2$. Такое приближение справедливо при $\varkappa \ll 1$ и в общем случае подойдет для качественного анализа систем с размерностью $d \geq 3$, в которых на низких частотах распространяются фононы с линейным

законом дисперсии. Однако для выявления особенностей конкретных систем необходимо искать вид $f(Z)$.

С учетом описанных низкочастотных приближений, конформное преобразование (9) переписывается в виде

$$\kappa - a^2 \frac{z^2}{E(z)} = E(z). \tag{13}$$

Ввиду зависимости (6), для каждого комплексного $z = (\omega - i0)^2$ из уравнения (13) можно найти явный вид динамического модуля Юнга $E((\omega - i0)^2)$. Для простоты опустим $-i0$ в последующих уравнениях и выберем комплексное решение, которое соответствует положительной плотности колебательных состояний $g(\omega) > 0$:

$$E(\omega) = \frac{\kappa}{2} + \sqrt{\frac{\kappa^2}{4} - a^2 \omega^2}. \tag{14}$$

Статический модуль Юнга $E(0) = \kappa$ определяет макроскопическую жесткость среды. Тогда уравнение движения (11) принимает следующий вид:

$$\ddot{u}_{\mathbf{q}}(t) + \frac{\Omega^2 \kappa}{2} \Delta u_{\mathbf{q}}(t) + \Omega^2 a \Delta \dot{u}_{\mathbf{q}}(t) + \int_{-\infty}^t F(\tau) \Delta u_{\mathbf{q}}(t - \tau) d\tau = 0, \tag{15}$$

$$F(\tau) = \frac{\kappa \Omega^2}{2\tau} J_1\left(\frac{\kappa \tau}{2a}\right), \tag{16}$$

где Δ — дискретный оператор Лапласа, действующий на проекцию исходной плоской волны с волновым вектором \mathbf{q} . Такая форма запаздывающей части (16) проявляется в процессах, характеризующихся поведением затухающего гармонического осциллятора [47,48].

5. Кроссовер Иоффе–Регеля

Знак подкоренного выражения в (14) определяет поведение комплексного модуля Юнга $E(\omega)$ и соотношение между упругостью и затуханием в системе. Частота

$$\omega_c = \frac{\kappa}{2a} \tag{17}$$

разделяет колебания на две области: $\omega < \omega_c$ и $\omega > \omega_c$. Проанализируем характерные особенности колебаний в этих диапазонах частот.

В области $\omega \ll \omega_c$ динамический модуль Юнга (14) $E(\omega) \simeq \kappa$, и уравнение движения (15) описывает колебания упругих волн возмущения

$$\ddot{u}_{\mathbf{q}}(t) + k \Delta u_{\mathbf{q}}(t) = 0 \tag{18}$$

с коэффициентом жесткости $k = \Omega^2 \kappa$. Такие колебания являются фононами с линейным законом дисперсии $\omega(q) = q\sqrt{k}$.

Для нахождения закона дисперсии в области частот $\omega < \omega_c$ допустим, что фазовая скорость фононов в этой области частот определяется динамическим модулем Юнга (14): $v_{ph} = \omega/q = \sqrt{\Omega^2 E(\omega)}$. Из этого соотношения следует связь между частотой ω и волновым вектором q :

$$\omega(q) = \Omega^2 a q \sqrt{2q_c^2 - q^2}, \tag{19}$$

где волновой вектор $q_c = \sqrt{\kappa/2\Omega^2 a^2}$ соответствует частоте ω_c . Такой закон дисперсии, полученный в более высоком приближении, хорошо описывает упругие колебания (фононы) во всем диапазоне частот $\omega < \omega_c$.

В области $\omega \gg \omega_c$ динамический модуль Юнга $E(\omega) \simeq ia\omega$, и уравнение движения (15) описывает диффузию профиля скоростей атомов

$$\ddot{u}_{\mathbf{q}}(t) + D \Delta \dot{u}_{\mathbf{q}}(t) = 0 \tag{20}$$

с коэффициентом диффузии $D = \Omega^2 a$. При $\kappa \ll 11$ такая диффузионная особенность колебаний сохраняется практически во всем диапазоне частот $\omega > \omega_c$.

Таким образом, в области колебаний $\omega < \omega_c$ распространяются хорошо определенные звуковые колебания, фононы, имеющие линейный закон дисперсии в низкочастотной области $\omega \ll \omega_c$. В диапазоне частот $\omega > \omega_c$ колебания распространяются за счет некоторой диффузионной передачи энергии от атома к атому в отсутствие явного переноса масс. Частота ω_c разделяет эти две принципиально разные области колебаний. Это позволяет считать, что ω_c соответствует частоте кроссовера Иоффе–Регеля ω_{IR} при переходе от фононов с большой длиной свободного пробега к диффузионным колебаниям [2,3].

6. Плотность колебательных состояний

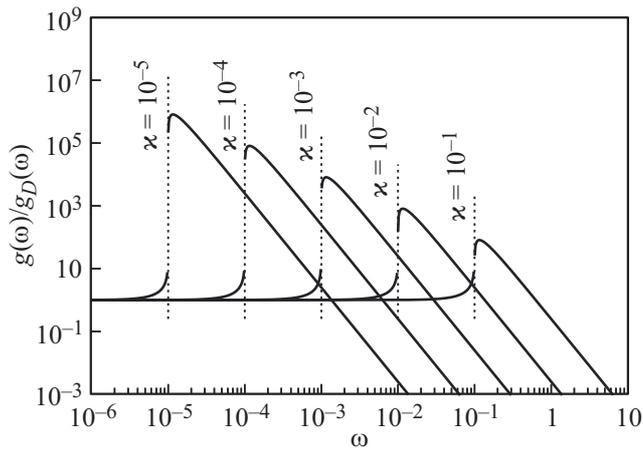
Чтобы найти аналитическое выражение для плотности колебательных состояний d -мерной системы $g_{ph}(\omega)$ в фононной области частот $\omega < \omega_c$, воспользуемся приближением $\omega/q = \sqrt{\Omega^2 E(\omega)}$, в котором динамический модуль Юнга определяется соотношением (14):

$$g_{ph}(\omega) = \frac{s_d}{(2\pi)^d} q^{d-1} \frac{\partial q}{\partial \omega} = \frac{s_d \omega^{d-1}}{(2\pi \Omega \sqrt{a})^d \sqrt{(\omega_c^2 - \omega^2)(\omega_c + \sqrt{\omega_c^2 - \omega^2})^{\frac{d}{2}-1}}}, \tag{21}$$

где коэффициент $s_d = d(\sqrt{\pi})^d / [(d/2)!]$ равен площади d -мерной гиперболы единичного радиуса.

В низкочастотной области $\omega \ll \omega_c$ плотность колебательных состояний (21) имеет дебаевский вид

$$g_D(\omega) = \frac{s_d \omega^{d-1}}{(2\pi \Omega \sqrt{\kappa})^d}. \tag{22}$$



Приведенная плотность колебательных состояний области фононов $g_{\text{ph}}(\omega)/g_{\text{D}}(\omega)$ и области диффузионных колебаний $g_{\text{dif}}(\omega)/g_{\text{D}}(\omega)$ для различных значений параметра κ . Вертикальные пунктирные линии обозначают частоту кроссовера ω_c . Размерность системы $d = 4$.

В более высокочастотной области $\omega \lesssim \omega_c$ имеется избыточный над дебаевским $g_{\text{D}}(\omega) \propto \omega^{d-1}$ вклад в плотность состояний

$$g_{\text{ph}}(\omega) - g_{\text{D}}(\omega) \sim \omega^{d+1}. \quad (23)$$

Такой рост плотности колебательных состояний вблизи кроссовера Иоффе–Регеля ω_c является универсальным для систем с размерностью $d \geq 3$.

В диффузионной области колебаний $\omega > \omega_c$ зависимость частоты от волнового вектора не является функциональной зависимостью, подобной дисперсионному соотношению для фононов (19). Тем не менее, из статистических свойств динамической матрицы и матрицы корреляций следует, что плотность колебательных состояний определяется мнимой частью динамического модуля Юнга [33]. С учетом выражения (14), плотность колебательных состояний в области диффузии колебаний принимает следующий вид:

$$g_{\text{dif}}(\omega) = \frac{2}{\pi\omega} \text{Im} E(\omega) = \frac{2a}{\pi\omega} \sqrt{\omega^2 - \omega_c^2}. \quad (24)$$

Это уравнение соответствует закону Марченко–Пастура [41] для классического некоррелированного ансамбля Вишарта. Правило сумм является необходимым требованием для существования плоско-волновых фононов, поэтому плотность колебательных состояний g_{dif} безусловно описывает диффузионные колебания.

На рисунке показана нормированная на дебаевскую плотность колебательных состояний для случая $d = 4$. Возникающий пик плотности состояний называется бозонным пиком. Как видно, с уменьшением параметра κ , т.е. с ростом беспорядка в системе, высота бозонного пика увеличивается, и кроссовер между двумя областями колебаний становится более резким. Существует узкая область плавного перехода между $g_{\text{ph}}(\omega)$ и $g_{\text{dif}}(\omega)$,

однако она мала по сравнению с ω_c при $\kappa \ll 1$. При критических значениях $\omega = \omega_c$ выражения (21) и (24) имеют асимптотическую расходимость.

Плотность колебательных состояний определяет, в частности, затухание Γ , в следующем возможном виде [46]:

$$\Gamma(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\pi}{2} \omega_{\text{cor}}^2(\mathbf{q}) g(\omega). \quad (25)$$

В фоновой области колебаний, несмотря на отсутствие мнимой части динамического модуля Юнга (14), затухание Γ существует. С учетом выражения для плотности состояний (21) и дисперсионного соотношения (19), можно получить зависимость затухания колебаний от волнового вектора q в фоновой области $q < q_c$:

$$\Gamma(q) = \frac{\pi}{2} \Omega^2 q^2 g_{\text{ph}} = \frac{\pi s_d}{4a(2\pi)^d} q^{d+1} \frac{\sqrt{2q_c^2 - q^2}}{q_c^2 - q^2}. \quad (26)$$

Отсюда следует, что в широком диапазоне $q \ll q_c$ затухание определяется рэлеевским рассеянием фононов на беспорядке и дает вклад $\Gamma \propto q^{d+1}$. При критических значениях $q = q_c$ имеется асимптотическая расходимость.

В диффузионной высокочастотной области колебаний $q \gg q_c$ также можно найти затухание Γ в зависимости от волнового вектора q :

$$\Gamma(q) = \frac{\pi}{2} \Omega^2 q^2 g_{\text{dif}} \simeq D q^2, \quad (27)$$

где коэффициент диффузии $D = \Omega^2 a$. Полученная зависимость $\Gamma \propto q^2$ для диффузионных колебаний является универсальной и не зависит от размерности системы. Эта диффузионная особенность согласуется с результатами экспериментов по неупругому рентгеновскому рассеянию в стеклах [11,12] и с результатами метода молекулярной динамики для аморфного кремния [13].

7. Заключение

С помощью рассмотрения статистических свойств коррелированного ансамбля Вишарта случайных матриц, который описывает колебательные свойства аморфных твердых тел при учете их механической устойчивости и трансляционной инвариантности, в данной работе получены универсальные аналитические выражения, описывающие колебательные особенности таких систем вне зависимости от их размерности и локального расположения ближних атомов в них. Колебания неупорядоченных систем могут быть описаны с помощью уравнения движения усредненной проекции плоской волны $u_{\mathbf{q}}(t)$ с запаздывающей частью в виде динамического комплексного модуля Юнга $E(\omega)$ (11). При таком рассмотрении важным приближением является то, что низкочастотные колебания рассматриваемой среды обусловлены фононами с линейным законом дисперсии.

В работе демонстрируется возникновение кроссовера Иоффе–Регеля в аморфных системах с размерностью $d \geq 3$ как кроссовера между фононами, описываемыми простым уравнением упругости для проекции смещений атомов (18), и диффузионными колебаниями, описываемыми уравнением диффузии для проекции скоростей (20). Полученная частота кроссовера $\omega_c \cong \omega_{IR}$ (17) линейным образом коррелирует с параметром системы κ , который характеризует макроскопическую жесткость неупорядоченной системы.

В случае малых значений $\kappa \ll 1$ система обладает существенным беспорядком и демонстрирует избыточную плотность колебательных состояний $g(\omega)$ по сравнению с дебаевской плотностью состояний $g_D(\omega)$. Это приводит к универсальному появлению бозонного пика в приведенной плотности колебательных состояний $g(\omega)/g_D(\omega)$. Для иллюстрации полученных формул была рассмотрена система с размерностью $d = 4$. Полученные колебательные свойства системы с такой размерностью являются важными для дальнейшего исследования, например, квазилокальных колебаний. В рамках подхода случайных матриц при рассмотрении негауссовской статистики распределения элементов матрицы \hat{A} квазилокальные колебания могут быть получены и исследованы [43].

Затухание в области фононов демонстрирует их рэлеевское рассеяние на беспорядке и дает вклад $\Gamma \propto q^{d+1}$. Однако в более высокочастотной области выше кроссовера Иоффе–Регеля затухание $\Gamma \propto q^2$. Такая зависимость характерна для диффузионного гидродинамического демпфирования и имеет универсальный характер вне зависимости от размерности системы.

Благодарности

Автор благодарит Я.М. Бельтюкова за продуктивное обсуждение работы.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что не имеет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Д.А. Паршин. ФТТ **36**, 7, 1809 (1994).
- [2] P.B. Allen, J.L. Feldman. Phys. Rev. B **48**, 17, 12581 (1993).
- [3] P.B. Allen, J.L. Feldman, J. Fabian, F. Wooten. Phil. Mag. B **79**, 11, 1715 (1999).
- [4] B. Rufflé, G. Guimbertière, E. Courtens, R. Vacher, G. Monaco. Phys. Rev. Lett. **96**, 4, 045502 (2006).
- [5] B. Rufflé, D.A. Parshin, E. Courtens, R. Vacher. Phys. Rev. Lett. **100**, 1, 015501 (2008).
- [6] V.L. Gurevich, D.A. Parshin, H.R. Schober. Phys. Rev. B **67**, 9, 094203 (2003).
- [7] V.K. Malinovsky, A.P. Sokolov. Solid State Commun. **57**, 9, 757 (1986).
- [8] A. Wischniewski, U. Buchenau, A.J. Dianoux, W.A. Kamitakahara, J.L. Zarestky. Phil. Mag. B **77**, 2, 579 (1998).
- [9] P. Benassi, M. Krisch, C. Masciovecchio, V. Mazzacurati, G. Monaco, G. Ruocco, F. Sette, R. Verbeni. Phys. Rev. Lett. **77**, 18, 3835 (1996).
- [10] T. Ohsaka, T. Ihara. Phys. Rev. B **50**, 13, 9569 (1994).
- [11] F. Sette, M.H. Krisch, C. Masciovecchio, G. Ruocco, G. Monaco. Sci. **280**, 5369, 1550 (1998).
- [12] G. Ruocco, F. Sette. J. Phys.: Condens. Matter **13**, 41, 9141 (2001).
- [13] J.K. Christie, S.N. Taraskin, S.R. Elliott. J. Non-Cryst. Solids **353**, 22–23, 2272 (2007).
- [14] V. Vitelli, N. Xu, M. Wyart, A.J. Liu, S.R. Nagel. Phys. Rev. E **81**, 2, 021301 (2010).
- [15] S. Kojima, Y. Matsuda, M. Kodama, H. Kawaji, T. Atake. Chin. J. Phys. **49**, 1, 414 (2011).
- [16] W. Steurer, A. Apfalter, M. Koch, W.E. Ernst, E. Söndergård, J.R. Manson, B. Holst. Phys. Rev. B **78**, 4, 045427 (2008).
- [17] W. Steurer, A. Apfalter, M. Koch, W.E. Ernst, B. Holst, E. Söndergård, J.R. Manson. Phys. Rev. Lett. **99**, 3, 035503 (2007).
- [18] L. Zhang, J. Zheng, Y. Wang, L. Zhang, Z. Jin, L. Hong, Y. Wang, J. Zhang. Nature Commun. **8**, 1, 67 (2017).
- [19] L. Wang, A. Ninarello, P. Guan, L. Berthier, G. Szamel, E. Flenner. Nature Commun. **10**, 1, 26 (2019).
- [20] M. Wyart. EPL (Europhys. Lett.) **89**, 6, 64001 (2010).
- [21] H. Mizuno, H. Shiba, A. Ikeda. PNAS **114**, 46, E9767 (2017).
- [22] A.I. Chumakov, G. Monaco, A. Monaco, W.A. Crichton, A. Bosak, R. Rüffer, A. Meyer, F. Kargl, L. Comez, D. Fioretto, H. Giefers, S. Roitsch, G. Wortmann, M.H. Manghnani, A. Hushur, Q. Williams, J. Balogh, K. Parliński, P. Jochym, P. Piekarczyk. Phys. Rev. Lett. **106**, 22, 225501 (2011).
- [23] S.N. Taraskin, Y.L. Loh, G. Natarajan, S.R. Elliott. Phys. Rev. Lett. **86**, 7, 1255 (2001).
- [24] D.A. Parshin, H.R. Schober, V.L. Gurevich. Phys. Rev. B **76**, 6, 064206 (2007).
- [25] W. Götze, M.R. Mayr. Phys. Rev. E **61**, 1, 587 (2000).
- [26] M. Baggioli, R. Milkus, A. Zacccone. Phys. Rev. E **100**, 6, 062131 (2019).
- [27] T. Grigera, V. Martin-Mayor, G. Parisi, P. Verrocchio. J. Phys.: Condens. Mater **14**, 9, 2167 (2002).
- [28] M.L. Manning, A.J. Liu. EPL **109**, 3, 36002 (2015).
- [29] Y.M. Beltukov, V.I. Kozub, D.A. Parshin. Phys. Rev. B **87**, 13, 134203 (2013).
- [30] Y.M. Beltukov, D.A. Parshin. Phys. Solid State **53**, 1, 151 (2011).
- [31] Y.M. Beltukov, D.A. Parshin. JETP Lett. **104**, 8, 552 (2016).
- [32] D.A. Conyuh, Y.M. Beltukov. Phys. Solid State **62**, 4, 689 (2020).
- [33] D.A. Conyuh, Y.M. Beltukov. Phys. Rev. E **103**, 4–1, 042608 (2021).
- [34] U. Buchenau, Y.M. Galperin, V. Gurevich, D. Parshin, M. Ramos, H. Schober. Phys. Rev. B **46**, 5, 2798 (1992).
- [35] M. Shimada, H. Mizuno, A. Ikeda. Soft Matter **16**, 31, 7279 (2020).
- [36] A.A. Maradudin, E.W. Montroll, G.H. Weiss, I. Ipatova. Theory of lattice dynamics in the harmonic approximation, vol. 3. Academic Press, N.Y. (1963).
- [37] Y.M. Beltukov. JETP Lett. **101**, 5, 345 (2015).
- [38] C.S. O'Hern, L.E. Silbert, A.J. Liu, S.R. Nagel. Phys. Rev. E **68**, 1, 011306 (2003).
- [39] J.C. Maxwell. Phil. Mag. J. Sci. **27**, 182, 294 (1864).
- [40] J. Wishart. Biometrika **20A**, 1/2, 32 (1928).

- [41] В.А. Марченко, Л.А. Пастур. Матем. сборник **72**, 4, 507 (1967).
- [42] J. Bun, J.P. Bouchaud, M. Potters. Phys. Reports **666**, 1 (2017).
- [43] D.A. Conyuh, Y.M. Beltukov. Phys. Rev. B **103**, 10, 104204 (2021).
- [44] Z. Burda, A. Görlich, J. Jurkiewicz, B. Wacław. Eur. Phys. J. B **49**, 3, 319 (2006).
- [45] I.J. Zucker. J. Status Phys. **145**, 3, 591 (2011).
- [46] D.A. Conyuh, Y.M. Beltukov. JETP Lett. **112**, 8, 513 (2020).
- [47] A.V. Mokshin, R.M. Yulmetyev, P. Hänggi. Phys. Rev. Lett. **95**, 20, 200601 (2005).
- [48] A.V. Mokshin. arXiv:1312.2085 [cond-mat, physics:physics] (2013).

Редактор Е.В. Толстякова