

Бозонный пик в различных моделях случайных матриц

Я. М. Бельтюков⁺¹⁾, Д. А. Паршин*

⁺ Физико-технический институт им. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

* С.-Петербургский Политехнический университет Петра Великого, 195251 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 1 сентября 2016 г.

Одним из наиболее интересных универсальных свойств аморфных твердых тел (стекол) является так называемый бозонный пик в приведенной плотности колебательных состояний $g(\omega)/\omega^2$. Он характеризует избыточную по сравнению с дебаевской плотность состояний при низких частотах ω . Причина его возникновения до конца неясна и, на первый взгляд, не носит универсального характера. В настоящей работе мы покажем, что при достаточно общих предположениях бозонный пик естественным образом возникает в самых различных моделях устойчивых случайных динамических матриц обладающих трансляционной симметрией. Варьируя параметры распределения и степень беспорядка в системе, мы можем сдвигать этот пик как в сторону больших, так и в сторону меньших частот (вплоть до нулевой частоты). Во всех исследованных случаях частота бозонного пика ω_b оказалась прямо пропорциональной модулю Юнга системы E .

DOI: 10.7868/S0370274X16200066

Как хорошо известно, практически все стекла, независимо от их химического состава, обладают универсальными свойствами в широкой области температур (или энергий). При низких температурах, ниже 1 К, наряду с фононами, за эти свойства ответственны так называемые двухуровневые системы. Помимо фононов и двухуровневых систем в стеклах имеются квазилокальные (гармонические) колебания. Они отвечают за универсальные свойства стекол при высоких температурах (энергиях) [1].

Одним из таких широко известных свойств является бозонный пик в приведенной плотности колебательных состояний $g(\omega)/\omega^2$ [2]. Он характеризует избыточную по сравнению с дебаевской плотность колебаний при низких частотах ω (на порядок меньше дебаевской частоты). Этот пик обычно проявляется при измерениях теплоемкости $C(T)$ как функции температуры T в виде максимума в $C(T)/T^3$, в комбинационном рассеянии света и рентгеновских лучей, а также в неупругом рассеянии нейтронов. Как правило, положение бозонного пика ω_b коррелирует с частотой кроссовера Иоффе–Регеля ω_{IR} , при которой длина свободного пробега акустических фононов сравнивается с их длиной волны [3–7]. Несмотря на огромное число работ, посвященных бозонному пику, его общепринятая физическая интерпретация до сих пор отсутствует. В настоящей работе для изучения природы бозонного пика мы хотим применить новый,

достаточно общий подход, основанный на использовании случайных матриц. Мы покажем на нескольких примерах, что в рамках этого подхода бозонный пик является его неизменным атрибутом.

Естественно предположить, что в аморфных телах, вследствие локального беспорядка, симметричная динамическая матрица M , определяющая квадраты собственных частот колебаний, тоже до некоторой степени носит элемент случайности. Наряду с этим она обладает и некоторыми регулярными общими свойствами. Во-первых, поскольку потенциальная энергия взаимодействия атомов U в любом твердом теле (кристаллическом или аморфном) зависит лишь от разности их смещений из положений равновесия, на матрицу M наложены требования *трансляционной инвариантности* [8]. В скалярной модели с одинаковыми массами атомов $m_i = 1$ сумма элементов в каждой строке и в каждом столбце матрицы M должна быть равна нулю:

$$\sum_{i=1}^N M_{ij} = \sum_{j=1}^N M_{ij} = 0, \quad (1)$$

где N – число атомов.

Во вторых, условия трансляционной инвариантности (1) являются *необходимыми* (но недостаточными) условиями существования в твердом теле низкочастотных акустических мод (акустических фононов). Для возникновения таких колебаний также необходимо, чтобы макроскопическая жесткость системы (модуль Юнга) была бы отлична от нуля.

¹⁾e-mail: ybeltukov@gmail.com

И наконец последнее, но не менее важное условие, матрица M должна удовлетворять требованию *механической устойчивости*, т.е. все ее собственные значения (квадраты собственных частот) должны быть неотрицательными. Тогда в такой системе в рамках стандартной теории упругости могут распространяться низкочастотные звуковые волны. Ниже мы рассмотрим три различных простейших, но достаточно общих, трехмерных скалярных модели, в которых выполнены все эти условия и в плотности состояний $g(\omega)$ которых имеется бозонный пик.

Для начала заметим, что устойчивость симметричной случайной динамической матрицы M будет гарантирована, если мы представим ее в виде [9]

$$M = AA^T. \quad (2)$$

Здесь A – некоторая вещественная, в простейшем варианте – квадратная $N \times N$, но не обязательно симметричная, *случайная* матрица общего вида. Например, ее можно построить на какой-нибудь кристаллической решетке, узлы которой являются равновесными положениями атомов. Но ее можно сконструировать и для произвольного, некристаллического расположения атомов в пространстве. Координаты узлов не входят в динамическую матрицу. А следовательно, от них не зависит и спектр частот колебаний. Он определяется только значениями матричных элементов вспомогательной матрицы A .

Для простоты построим эту квадратную $N \times N$ матрицу A на простой кубической решетке (с постоянной решетки $a_0 = 1$), в узлах которой находятся одинаковые атомы, и учтем их взаимодействие только с их ближайшим окружением [9]. Недиагональные матричные элементы A_{ij} будут отличны от нуля в том и только в том случае, если атомы i и j являются ближайшими соседями. В противном случае они равняются нулю. Значения всех недиагональных ненулевых матричных элементов будем считать независимыми случайными величинами, распределенными по Гауссу с единичной дисперсией, $\langle A_{ij}^2 \rangle = V^2 = 1$, и средним значением, равным нулю, $\langle A_{ij} \rangle = 0$. Все частоты в работе будут измеряться в единицах $V = 1$. Для выполнения условий трансляционной инвариантности (1) диагональные элементы матрицы A удовлетворяют условию

$$A_{kk} = - \sum_{i \neq k} A_{ik}. \quad (3)$$

Это означает, что сумма элементов в каждом k -м столбце матрицы A должна быть равна нулю.

Казалось бы, мы выполнили все условия для построения матрицы M , однако, как показано в [9], акустические фононы в такой решетке распространяться не могут и бозонный пик отсутствует (точнее его

частота равна нулю). Оказывается, что в этой системе модуль Юнга E сильно флуктуирует от образца к образцу и $E \rightarrow 0$, когда число атомов $N \rightarrow \infty$. Другими словами, для распространения фононов система не обладает необходимой жесткостью.

Причина такого странного поведения заключается в том, что согласно правилу Максвелла [10] такая система является изостатичной [11], т.е. критически мягкой, и не обладающей макроскопической жесткостью. Это обусловлено тем, что число степеней свободы N в ней (в скалярной модели это совпадает с числом атомов) в точности равно числу связей K наложенных на систему. Убедиться в этом можно следующим образом.

С помощью динамической матрицы M запишем потенциальную энергию системы U в виде квадратичной формы по смещениям атомов u_i ($i = 1 \dots N$) из положений равновесия

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N M_{ij} u_i u_j. \quad (4)$$

Подставим сюда матрицу M в виде произведения (2). Тогда U можно представить в виде суммы (по k) N квадратичных слагаемых

$$U = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \left(\sum_{i=1}^N A_{ik} u_i \right)^2. \quad (5)$$

Это доказывает положительную определенность квадратичной формы (4). Суммирование по *строкам* i матрицы A идет в формуле (5) от 1 до N , т.е. по числу атомов, или по числу степеней свободы. Суммирование же по *столбцам* k матрицы A в формуле (5) идет по k от 1 до N . Здесь индекс k нумерует различные квадратичные слагаемые.

Каждое такое слагаемое в потенциальной энергии U (определяемое некоторым столбцом матрицы A) может рассматриваться как *связь*, наложенная на систему [12]. Число таких связей K (число столбцов в матрице A) совпадает с числом атомов, т.е. с числом степеней свободы N , поскольку по построению матрица A является квадратной. Поэтому система $M = AA^T$ с такой квадратной матрицей A хотя и является механически устойчивой, но не обладает макроскопической жесткостью, и в ней не может распространяться звук. Ситуация не изменится, если при конструировании случайной квадратной матрицы A на простой кубической решетке учесть еще дополнительно соседи, следующие за ближайшими, и даже еще более далекие. Поскольку при фиксированном индексе k это увеличивает только число ненулевых слагаемых A_{ik} по индексу i , но не меняет числа свя-

зей — числа квадратичных слагаемых по индексу k , которое будет по-прежнему равняться N .

Сделать систему макроскопически жесткой можно, добавив в нее реальные дополнительные связи. Поскольку каждая такая связь характеризуется неким столбцом матрицы A , надо просто увеличить число ее столбцов K и сделать $K > N$. В результате квадратная $N \times N$ матрица A превратится в прямоугольную $N \times K$ матрицу \mathcal{A} , число строк (степеней свободы) в которой меньше чем число столбцов (связей). В свою очередь увеличить число столбцов в матрице A сравнительно легко, если добавить к не обладающей жесткостью динамической матрице AA^T , которую мы построили, любую другую (регулярную или случайную) положительно определенную матрицу $N \times N$, обладающую трансляционной инвариантностью. Сумма двух таких матриц тоже будет положительно определенной и обладать конечной жесткостью (даже если каждое из слагаемых ею не обладает). Сделать это можно множеством различных способов. Ниже мы рассмотрим три из них.

Первый способ. Представим матрицу M в виде

$$M = \mathcal{A}\mathcal{A}^T = AA^T + \mu M_0. \quad (6)$$

Здесь A — та же самая случайная квадратная матрица $N \times N$, построенная ранее на простой кубической решетке и обладающая трансляционной инвариантностью. Матрица M_0 — регулярная кристаллическая динамическая матрица $N \times N$, построенная на той же решетке с единичными пружинками между ближайшими соседями и обладающая конечной жесткостью. Параметр $\mu \geq 0$ задает жесткость этих пружинки. При $\mu = 0$ мы возвращаемся к случаю (2).

Не выписывая в явном виде прямоугольную матрицу \mathcal{A} , нетрудно убедиться, что количество строк в ней равно N , т.е. числу атомов или числу степеней свободы. Количество столбцов (связей) равно $4N$. Из них N столбцов — это столбцы матрицы A , а дополнительные $3N$ столбцов (связей) обеспечивает кристаллическая матрица M_0 . Действительно, в простой кубической решетке каждый атом связан с 6 ближайшими соседями единичной пружинкой. Поскольку каждая пружинка делится поровну между двумя атомами, мы и получаем $3N$ дополнительных связей. Таким образом, матрица \mathcal{A} — это матрица $N \times 4N$. Как показано в [13], модуль Юнга в такой системе при $\mu > 0$ отличен от нуля и $E \propto \sqrt{\mu}$ (при $\mu \ll 1$), поэтому в ней могут распространяться фононы.

Нормированная на единицу плотность состояний $g(\omega)$ в этой модели для $N = 200^3$ и четырех значений параметра μ изображена на рис. 1а. Для вычисления плотности состояний мы использовали разложение по полиномам Чебышева (англ. Kernel Polynomial

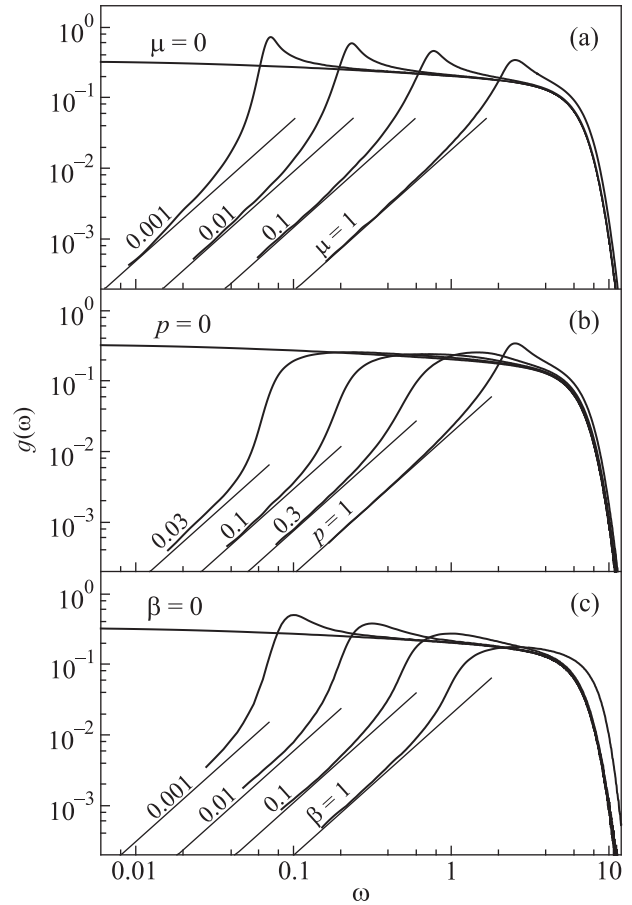


Рис. 1. Нормированная на единицу плотность состояний $g(\omega)$ для трех матричных моделей и четырех значений соответствующих параметров μ , p и β , построенных на простой кубической решетке с периодическими граничными условиями и $N = 200^3$. (а) — $M = AA^T + \mu M_0$. (б) — $M = AA^T + M_0(p)$. (с) — $M = AA^T + \beta BB^T$. Прямые линии показывают квадратичную дебаевскую плотность состояний (7), вычисленную по модулю Юнга для каждой из рассмотренных моделей и четырех значений вышеупомянутых параметров

Method — KPM) [14]. Прямые линии показывают дебаевский вклад

$$g_D(\omega) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{E^{3/2}}, \quad (7)$$

рассчитанный по модулю Юнга $E(\mu)$ для четырех значений μ в [13]. Там же показано, что фононы занимают область частот от нуля до максимума $\omega_{\max} \sim \sqrt{\mu}$ в плотности состояний. Колебания с частотами выше максимума являются диффузорами. Они распространяются по системе посредством диффузии. Частота Иоффе–Регеля ω_{IR} по порядку величины совпадает с ω_{\max} и с частотой бозонного пика ω_b .

Как показано в [13], в этой области частот возникает сильное рассеяние фононов на квазилокальных колебаниях. Бозонный пик в приведенной плотности состояний $g(\omega)/g_D(\omega)$ показан на рис. 2а для тех же четырех значений μ .

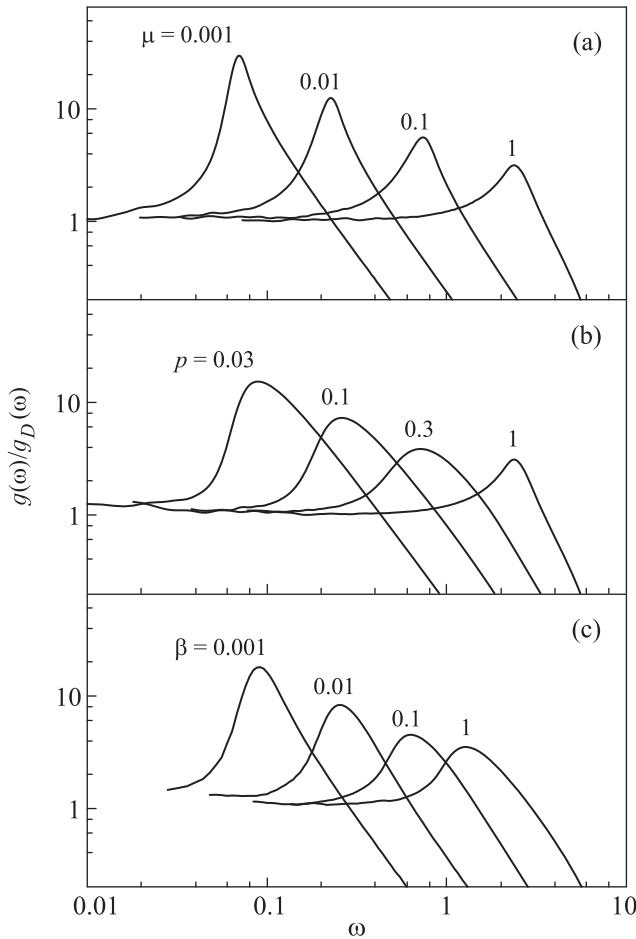


Рис. 2. Бозонные пики в приведенной плотности состояний $g(\omega)/g_D(\omega)$ в трех матричных моделях, вычисленные из плотности состояний $g(\omega)$, показанной на рис. 1. (a) – $M = AA^T + \mu M_0$. (b) – $M = AA^T + M_0(p)$. (c) – $M = AA^T + \beta BV^T$ для четырех значений параметров μ , p и β , соответственно

Второй способ. Представим матрицу M в виде

$$M = AA^T = AA^T + M_0(p). \tag{8}$$

Это отличается от предыдущего случая тем, что теперь $\mu = 1$ и все пружинки в кристаллической матрице M_0 обладают единичной жесткостью. Чтобы изменить (уменьшить) число связей, будем случайным образом вырезать пружинки из матрицы M_0 . Вырезание одной пружинки эквивалентно удалению одной связи, т.е. одного столбца в матрице A . Долю оставшихся в системе пружинки обозначим через p .

А матрицу M_0 с вырезанными пружинками обозначим как $M_0(p)$. Нетрудно видеть, что в матрице A имеется N строк и $N(1 + 3p)$ столбцов. Как показано в [13], модуль Юнга $E(p)$ в такой системе при $p > 0$ отличен от нуля и в ней могут распространяться фононы. Перколяционный переход по p не играет роли, поскольку в динамической матрице M имеется еще дополнительное слагаемое AA^T . При малой концентрации оставшихся пружинки $p \ll 1$ модуль Юнга оказывается пропорциональным p : $E \propto p$. И хотя в этом случае пружинки практически изолированы друг от друга в пространстве и в совокупности не обладают никакой жесткостью, отличная от нуля жесткость всей системы обеспечивается ими совместно с вкладом от матрицы AA^T , которая сама по себе тоже не обладает никакой жесткостью.

Нормированная на единицу плотность состояний $g(\omega)$ в этой модели для четырех значений параметра p изображена на рис. 1b. Прямые линии показывают дебаевский вклад (7), рассчитанный по модулю Юнга $E(p)$ в [13]. Бозонный пик в приведенной плотности состояний $g(\omega)/g_D(\omega)$ для тех же значений p показан на рис. 2b.

Третий способ. Представим матрицу M в виде

$$M = AA^T = AA^T + \beta BV^T. \tag{9}$$

Здесь A – опять та же самая случайная квадратная матрица $N \times N$, построенная на простой кубической решетке и обладающая трансляционной инвариантностью. Матрица B , независимая от A случайная квадратная матрица $N \times N$ с нулевым средним недиагональных элементов и единичной дисперсией, построенная на простой кубической решетке, точно так же, как и матрица A . Параметр $\beta \geq 0$ может меняться. При $\beta = 0$ мы возвращаемся к случаю (2).

Нетрудно видеть, что в этом случае число строк матрицы A по-прежнему равно числу степеней свободы N , а число столбцов (т.е. число связей) равно $2N$. При этом понятно, что N связей (столбцов) берется от матрицы A и N от матрицы B . Как показано в [13], в такой системе могут распространяться фононы, поскольку модуль Юнга при $\beta > 0$ отличен от нуля и $E \propto \sqrt{\beta}$ (при $\beta \ll 1$). Заметим, что каждое из слагаемых в формуле (9) обладает нулевой жесткостью, но, действуя в совокупности, они имеют отличный от нуля модуль Юнга.

Нормированная на единицу плотность состояний $g(\omega)$ в этой модели изображена на рис. 1c для четырех значений параметра β . Прямые линии показывают дебаевский вклад (7), рассчитанный по модулю Юнга $E(\beta)$ в [13] для этих четырех значений β .

Бозонный пик в приведенной плотности состояний $g(\omega)/g_D(\omega)$ для тех же значений β показан на рис. 2с.

Анализ полученных данных показывает, что частота бозонного пика ω_b коррелирует со значением модуля Юнга системы E . На рис. 3 показано положение

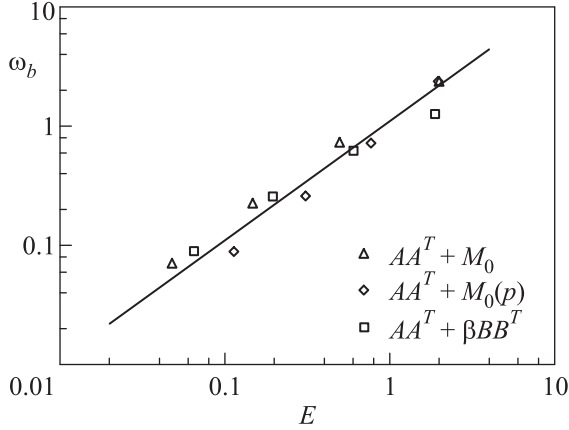


Рис. 3. Связь частоты бозонного пика ω_b и модуля Юнга E в трех рассмотренных матричных моделях и четырех различных значениях параметров μ , p и β , приведенных на рис. 1, 2

ние бозонного пика ω_b в трех рассмотренных нами матричных моделях (6), (8) и (9) и значения модуля Юнга E в этих же моделях для четырех различных значений параметров μ , p и β (для которых был вычислен бозонный пик). Из этого рисунка следует, что частота бозонного пика во всех случаях пропорциональна соответствующему значению модуля Юнга

$$E \sim \omega_b. \quad (10)$$

Такая же связь бозонного пика с модулем сдвига G наблюдалась и в гранулярных средах [15] вблизи точки перехода, называемой в англоязычной литературе *jamming transition*. В этой точке модуль сдвига обращается в ноль. Наличие этой корреляции позволяет единым образом качественно объяснить физическую причину появления бозонного пика в наших матричных моделях.

При малых частотах $\omega < \omega_b \ll 1$ плотность состояний $g(\omega)$ описывается дебаевской формулой (7). Учитывая это и то, что $\omega_b \sim E$, мы получаем на частоте бозонного пика во всех трех случаях

$$g_D(\omega_b) \sim \sqrt{\omega_b}. \quad (11)$$

С другой стороны, для больших частот $\omega > \omega_b$, как следует из рис. 1, плотность состояний примерно постоянна и $g(\omega) \sim 1$. Такое поведение обуславливает наличие пика в приведенной плотности состояний

$g(\omega_b)/g_D(\omega_b) \sim 1/\sqrt{\omega_b} \gg 1$. При этом высота пика растет при уменьшении ω_b , что находится в согласии с имеющимися экспериментальными данными [2].

Подводя итоги, мы показали, что бозонный пик появляется довольно естественным образом в различных моделях устойчивых случайных матриц, обладающих трансляционной инвариантностью, при достаточно общих предположениях, наложенных на систему. Согласно первой модели, исследованной наиболее подробно в [13], он возникает в области частот, порядка частоты Иоффе–Регеля, где фононы, по-видимому, испытывают сильное рассеяние на квазилокальных колебаниях и в результате чего переходят в диффузоры. Таким образом, в области бозонного пика существенным образом меняется характер распространения колебательных мод. Вероятно, что такая же картина будет справедлива и в двух оставшихся моделях. Во всех исследованных случаях частота бозонного пика по порядку величины совпадает со значением модуля Юнга системы.

Один из авторов (Я.М.Б.) благодарит фонд Династия и Совет по грантам Президента Российской Федерации за финансовую поддержку (стипендия СП-3299.2016.1).

1. Д. А. Паршин, ФТТ **36**, 1809 (1994).
2. V. L. Gurevich, D. A. Parshin, and H. R. Schober, Phys. Rev. B **67**, 094203 (2003).
3. V. L. Gurevich, D. A. Parshin, J. Pelous, and H. R. Schober, Phys. Rev. B **48**, 16318 (1993).
4. D. A. Parshin and C. Laermans, Phys. Rev. B **63**, 132203 (2001).
5. B. Rufflé, G. Guimbretière, E. Courtens, R. Vacher, and G. Monaco, Phys. Rev. Lett. **96**, 045502 (2006).
6. B. Rufflé, D. A. Parshin, E. Courtens, and R. Vacher, Phys. Rev. Lett. **100**, 015501 (2008).
7. H. Shintani and H. Tanaka, Nat. Mater. **7**, 870 (2008).
8. A. A. Maradudin, E. W. Montroll, G. H. Weiss, and I. P. Ipatova, *Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation*, Academic Press, N.Y. (1971).
9. Я. М. Бельтюков, Д. А. Паршин, Письма в ЖЭТФ, **93**, 660 (2011).
10. J. C. Maxwell, Philosophical Magazine **27**, 294 (1865).
11. C. S. O'Hern, L. E. Silbert, A. J. Liu, and S. R. Nagel, Phys. Rev. E **68**, 011306 (2003).
12. Я. М. Бельтюков, Письма в ЖЭТФ **101**, 377 (2015).
13. Y. M. Beltukov, V. I. Kozub, and D. A. Parshin, Phys. Rev. B **87**, 134203 (2013).
14. Y. M. Beltukov, C. Fusco, D. A. Parshin, and A. Tanguy, Phys. Rev. E **93**, 023006 (2016).
15. V. Vitelli, N. Xu, M. Wyart, A. J. Liu, and S. R. Nagel, Phys. Rev. E **81**, 021301 (2010).