Общая физика

УДК 621.391.822

Фликкер-шум и бозонный пик как единый феномен

Б. А. Векленко
Московский энергетический институт (Технический университет),
Москва, Россия

Предложена теория бозонного пика. Показано, что в бозе-системах с пространственно-стохастическими неоднородностями фликкер-шум и бозонный пик имеют общую природу, формируются вследствие обратной связи по шуму при случайных воздействиях на акустические волны и могут существовать совместно. Эти явления описываются одними и теми же уравнениями достаточно общей структуры и, следовательно, могут быть изучены с помощью различных физических моделей. Любая теория, результативно оперирующая с ограниченным сверху акустическим спектром, приводит к формированию бозонного пика, если такой спектр подвержен влиянию пространственно-некоррелированных воздействий. Условия возникновения фликкер-шума слабее, но обладают порогом по интенсивности внешнего воздействия.

Фликкер-шум, или шум $1/\omega$, был обнаружен в 1925 г. [1] первоначально в электрических цепях, а затем в угольных сопротивлениях [2]. Впоследствии оказалось, что область его распространения чрезвычайно широка [3—7]. Он проявляет себя как в физических, так и в биологических и социальных системах. Его наличие не зависит от геометрических размеров тела. По наличию фликкер-шума судят о деградации и старении материалов [7].

Несмотря на столь широкую область распространения, природа его вызывает широкие дискуссии [8—12]. Существует множество микроскопических механизмов, объясняющих его появление, но ни один из них не является общепризнанным [13], поэтому поток экспериментальных и теоретических работ не убывает.

История другой аномалии в спектре шумов, так называемого бозонного пика, не столь продолжительна. Он привлекает к себе пристальное внимание исследователей с 70-х годов прошлого столетия. Бозонный пик широко распространен [14—18], им обладают практически все среды со случайно выраженными неоднородностями. К таковым относятся аморфные тела, белковые образования, переохлажденные жидкости, деформированные кристаллы. Следы бозонного пика прослеживаются даже в воде при комнатной температуре [19—22]. Диапазон температур появления бозонного пика составляет от десятка [18] до тысячи [14] градусов Кельвина. Как и фликкер-шум, он возникает при сравнительно низких частотах. По его наличию судят об относительном присутствии в среде стохастических и детерминированных компонент [23]. Ежегодно исследованию бозонного пика посвящаются десятки работ [24—29]. Возникает множество вопросов, нежели ответов относительно его происхождения. До сих пор нет аналитической теории этого явления, дискутируется вопрос о том, носит ли природа его возникновения локальный [18, 30—35] или же пространственно протяженный [36—38] характер. Автор данной статьи надеется внести определенную ясность в этот пробел.

В настоящее время существуют три наиболее обсуждаемые, физически не связанные между собой версии его появления, это — модель мягкой моды [39], модель спаренных мод (coupling modes) [26, 40] и модель связанных осцилляторов с использованием теории стохастических матриц [41].

Как видно, фликкер-шум и бозонный пик обладают многими формальными аналогиями, что наводит на мысль об их общем начале. В настоящем сообщении мы развиваем эту идею.

В работах [42, 43] указано, что для бозе-систем закономерности фликкер-шума вполне объясняются его термодинамической природой. Это означает существование в природе множества различных микроскопических механизмов, приводящих к его появлению. Ситуация аналогична существованию распределения Максвелла или формулы Саха, результат вывода которых не зависит ни от конкретных механизмов взаимодействия частиц друг с другом, ни от вида учитываемых при выводе химических реакций. Появление бозонного пика в веществах различной физической природы также косвенно свидетельствует о термодинамическом характере его происхождения и множественности конкретных механизмов его формирования.

Покажем, что любая теория, результативно приводящая к фононному акустическому спектру, ограниченному сверху вследствие конечных размеров молекул, ведет к наличию бозонного пика, если только акустический спектр подвергается воздействию пространственно некоррелированного возмущения любой природы. При этом достаточно, чтобы такое возмущение не зависело от времени.

Покажем также глубокое родство причин, вызывающих фликкер-шум и бозонный пик, при определенных условиях приводящих к их совместному появлению. Можно думать, что факт их совместного появления неоднократно наблюдался в экспериментальных работах [22, 23, 44—46], но при анализе данных авторы этих работ упускали из вида возможность существования фликкер-шума. Более того, бозонный пик и фликкер-шум описываются общими уравнениями. Условия возникновения того или другого явления различаются лишь величиной параметров, входящих в эти уравнения.

Для объяснения причин возникновения бозонного пика нам понадобится обобщить предложенный в работе [42] и описывающий фликкер-шум математический формализм применительно к явлениям в протяженных средах.

Будем считать среду, в которой распространяются акустические волны, изотропной, пространственно однородной, и в целях простоты ограничимся скалярным описанием смещения ее частиц из положения равновесия $\varphi(x)$, $x = \mathbf{r}, t$. В этой модели линейным акустическим волнам отвечает следующий гамильтониан:

$$\hat{H} = \frac{\rho}{2}\int\left(\frac{\partial\varphi(x)}{\partial t}\right)^2 d\mathbf{r} + \frac{\chi}{2}\int\frac{\partial\varphi(x)}{\partial r_i}\frac{\partial\varphi(x)}{\partial r_i}d\mathbf{r}, \qquad (1)$$

где ρ и χ — некоторые постоянные, по повторяющимся индексам подразумевается суммирование.

Гамильтониану (1) отвечает уравнение

$$\nabla^2\varphi - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} = 0, \quad v = \sqrt{\frac{\chi}{\rho}}, \qquad (2)$$

где v — скорость звука.

Уравнение (2) описывает акустические волны с дисперсионным соотношением $\omega_k = v\mathbf{k}$, где $\mathbf{k}$ — волновой вектор, ω_k — частота.

Предположим, что поле $\varphi(x)$ подвержено воздействию распространенных в пространстве случайных сигналов $\xi(x)$. На смену гамильтониану (1) теперь приходит выражение

$$\hat{H} = \frac{\rho}{2}\int\left(\frac{\partial\varphi_f(x)}{\partial t}\right)^2 d\mathbf{r} + \frac{\chi}{2}\int\frac{\partial\varphi_f(x)}{\partial r_i}\frac{\partial\varphi_f(x)}{\partial r_i}d\mathbf{r} + \frac{1}{2}\int\xi(x)\varphi_f(x)\varphi_f(x)d\mathbf{r} + \int f(x)\varphi_f(x)d\mathbf{r}, \qquad (3)$$

где $f(x)$ — некоторая регулярная вспомогательная функция, цель введения которой объясняется ниже. В конце расчетов эта функция полагается равной нулю.

Результаты настоящей работы слабо зависят от конкретного вида гамильтониана взаимодействия. Вид этого гамильтониана выражен формулой (3), впрочем, он достаточно общий и выбран в целях простоты расчетов.

Так как наблюдаемый в экспериментах по неупругому рассеянию фотонов или нейтронов бозонный пик описывается в терминах коррелятора $<\varphi(x)\varphi(x')>$, где в условиях термодинамического равновесия усреднение производится по распределению Гиббса, то нас будет интересовать преобразование Фурье от этого коррелятора

$$S(\mathbf{k},\omega) = \int e^{-i\mathbf{kr}+i\omega t} <\varphi(x)\varphi(0)> d\mathbf{r}dt.$$

Так как система находится в состоянии термодинамического равновесия, то для вычисления $S(\mathbf{k}, \omega)$ воспользуемся флуктуационно-диссипационной теоремой (ФДТ) [47], математическая запись которой в нашем случае выглядит так [42]

$$S(\mathbf{k},\omega) = i\frac{T}{\omega}\left[G_r(\mathbf{k},\omega) - G_r^*(\mathbf{k},\omega)\right],$$
$$S(\mathbf{k},\omega) = S(\mathbf{k},-\omega). \qquad (4)$$

Бозонный пик представляет собой классическое образование, поэтому в (4) мы ограничиваемся областью классических частот. При этом надо иметь в виду, что численно квантовые добавки могут оказаться существенными. Что касается запаздывающей функции Грина $G_r(\mathbf{k},\omega)$, то согласно формуле Кубо [48] она находится как коэффициент пропорциональности между $<\varphi_f(x)>$ и $f(x)$

$$<\varphi_f(x)> = \int G_r(x,x')f(x')dx'; \quad dx' = d\mathbf{r}'dt'. \qquad (5)$$

Из равенства (4) делаем вывод о том, что любое тело, обладающее фононным спектром и релаксационными процессами на нулевой частоте $\mathrm{Im}G_r(\mathbf{k},0) \neq 0$, подвержено шуму $1/\omega$. Такое замечание чрезвычайно упрощает исследование фликкер-шума путем вычисления более простой функции, каковой является $G_r(\mathbf{k},\omega)$.

Функцию $<\varphi_f>$ найдем, воспользовавшись отвечающим гамильтониану (3) уравнением движения

$$\nabla^2\varphi_f(\hat{x})-\frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\varphi_f(x)}{\partial t^2}-\frac{1}{\chi}\xi(x)\varphi_f(x)=\frac{f(x)}{\chi}. \quad (6)$$

Решение уравнения (6) можно представить в виде

$$\varphi_f(x)=\varphi(x)+\int\hat{G}_r(x,x_1)f(x_1)dx_1, \quad (7)$$

где $\varphi(x)$ представляет собой решение однородного уравнения. Функция $\hat{G}_r(x,x')$ находится из выражения

$$\nabla^2\hat{G}_r(x,x')-\frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\hat{G}_r(x,x')}{\partial t^2}-$$
$$-\frac{1}{\chi}\xi(x)\hat{G}_r(x,x')=\frac{1}{\chi}\delta(x-x'). \quad (8)$$

После усреднения по ансамблю обеих частей равенства (7) и сопоставления результата с формулой Кубо (5) в предположении $<\xi(x)>=0$, находим

$$G_r(x,x')=<\hat{G}_r(x,x')>.$$

В отсутствие возмущающего случайного поля $\xi(x)=0$ и

$$G_r^0(\mathbf{k},\omega)=\frac{1}{\chi}\frac{1}{-k^2+\dfrac{\omega^2}{v^2}+2i0\omega}$$

оказывается, что

$$S(\mathbf{k},\omega)=\frac{\pi T}{2k\omega\chi}\left[\delta\left(\frac{\omega}{\mathrm{v}}-k\right)-\delta\left(\frac{\omega}{\mathrm{v}}+k\right)\right].$$

Для нахождения $<\hat{G}_r(x,x')>$ в общем случае усредним по ансамблю обе части уравнения (8). Введем вспомогательный функционал

$$\hat{S}=\exp\left\{-i\int\rho(x)\xi(x)dx\right\},$$

где $\rho(x)$ — некоторая гладкая классическая функция.

Умножим уравнение (8) на $\hat{S}$ справа и произведем усреднение обеих частей этого уравнения по ансамблю систем.

Для вспомогательной функции

$$G_r(x,x'|\rho)=\frac{<\hat{G}_r(x,x')\hat{S}>}{<\hat{S}>}$$

возникает следующее уравнение Швингера

$$\nabla^2 G_r(x,x'|\rho)-\frac{1}{\mathrm{v}^2}\frac{d^2G_r(x,x'|\rho)}{dt^2}-\frac{i}{\chi}\frac{\delta G_r(x,x'\rho)}{\delta\rho(x)}-$$
$$-\frac{1}{\chi}\frac{<\xi(x)\hat{S}>}{<\hat{S}>}G_r(x,x'|\rho)=\frac{1}{\chi}\delta(x-x'). \quad (9)$$

Очевидно, что $G_r(x,x'|\rho)=G_r(x,x')$ при $\rho = 0$.

Считая $\delta G_r(x,x'|\rho)/\delta\rho(z)$ неизвестной, получим для нее свое уравнение, проварьировав (9) по $\rho(z)$

$$\nabla^2\frac{\delta G_r(x,x'|\rho)}{\delta\rho(z)}-\frac{1}{v^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\frac{\delta G_r(x,x|\rho)}{\delta\rho(z)}-$$
$$-\frac{i}{\chi}\frac{\delta^2G_r(x,x'|\rho)}{\delta\rho(x)\delta(z)}-\frac{1}{\chi}\frac{<\xi(x)\hat{S}>}{<\hat{S}>}\frac{\delta G_r(x,x'|\rho)}{\delta\rho(z)}-$$
$$-\frac{1}{\chi}\left[-i\frac{<\xi(x)\xi(z)\hat{S}>}{<\hat{S}>}+i\frac{<\xi(x)\hat{S}><\xi(z)\hat{S}>}{<\hat{S}>^2}\right]\times \quad (10)$$
$$\times G_r(x,x'|\rho)=0.$$

Теперь возникла новая неизвестная функция в виде второй вариационной производной от $G_r(x,x,|\rho)$. Для этой функции можно получить свое уравнение, еще раз проварьировав уравнение (10). Таким образом, возникает незамкнутая цепочка уравнений. Чем позднее мы разорвем такую цепочку, тем точнее будет результат. Мы ограничимся двумя уравнениями (9) и (10). Это значит, что более точные решения, полученные с учетом последующих опущенных уравнений, лишь улучшат результат. Если в уравнении (9) опустить вариационную производную и ограничиться только одним этим уравнением, то получим приближение Хартри–Фока. Используемая нами схема выходит за рамки этого приближения.

С помощью (9) уравнение (10) можно разрешить следующим образом:

$$\frac{\delta G_r(x,x'|\rho)}{\delta\rho(z)}=-i\int G_r(x,x_1|\rho)\times$$
$$\times\left[\frac{<\xi(x_1)\xi(z)\hat{S}>}{<\hat{S}>}-\frac{<\xi(x_1)\hat{S}><\xi(z)\hat{S}>}{<\hat{S}>^2}\right]G_r(x_1,x'|\rho)dx_1.$$
$$(11)$$

Если бы в уравнении (10) вместо вариационных производных входили обыкновенные производные, то равенство (11) представляло бы его точное решение. Подстановка (11) в (9) показывает, что одна вариационная производная остается нескомпенсированной. Приближенное равенство (11) представляет собой так называемое однопетлевое приближение.

Полагая $\rho = 0$ и учитывая, что $<\xi(x)>=0$, из (9) и (11), получаем замкнутое интегродифференциальное уравнение относительно искомой $G_r(x,x')$, эквивалентное следующему интегральному уравнению

$$G_r(x,x')=G_r^0(x,x')+$$
$$+\int G_r^0(x,x_1)M_r(x_1,x_2)G_r(x_2,x')dx_1dx_2, \quad (12)$$

причем

$$\nabla^2 G_r^0(x,x') - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 G_r^0(x,x')}{\partial t^2} = \frac{1}{\chi}\delta(x-x')$$

и

$$M_r(x,x') = \frac{1}{\chi} G_r(x,x') < \xi(x-x')\xi(0) >. \qquad (13)$$

Ограничимся однопетлевым приближением, достоинствами которого являются его универсальность и независимость вида системы (12)—(13) от статистических свойств случайного поля $\xi(x)$. Точность этого приближения применительно к исследуемому кругу задач обсуждалась в работе [42], где в предположении о гауссовом характере случайного поля $\xi(x)$ для оператора $M_r(x,x')$ было получено точное уравнение. Там же показано, что решение точного уравнения в асимптотической области отличается от решения найденного в однопетлевом приближении в $\sqrt{2}$ раз. Такая точность вполне достаточна для полуколичественных исследований физических явлений. Ниже показана связь системы уравнений (12)—(13) с уравнениями, полученными в работах [40, 41].

Предположим, что случайное внешнее поле не зависит ни от времени, ни от пространственных координат. Это означает, что пространственно оно сильно коррелированно, длина корреляции стремится к бесконечности и $<\xi(x)\xi(x')> \to g,$ где g — некоторая константа. Система уравнений (12)—(13) решается в явном виде. После преобразования Фурье имеем

$$G_r(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{\chi}\,\frac{1}{-k^2 + \dfrac{\omega^2}{v^2} - M_r(\mathbf{k},\omega)}; \qquad (14)$$

$$M_r(\mathbf{k},\omega) = \frac{g}{\chi} G_r(\mathbf{k},\omega). \qquad (15)$$

Подставляя (14) в (15), получаем следующее алгебраическое нелинейное уравнение для массового оператора

$$M_r(\mathbf{k},\omega) = \frac{g}{\chi^2}\,\frac{1}{\dfrac{\omega^2}{v^2} - k^2 - M_r(\mathbf{k},\omega)}, \qquad (16)$$

которое легко решается,

$$M_r(\mathbf{k},\omega) = -\frac{k^2 - \dfrac{\omega^2}{v^2}}{2} + \sqrt{\frac{\left(k^2 - \dfrac{\omega^2}{v^2}\right)^2}{4} - \frac{g}{\chi^2}}.$$

При $g \to 0$ необходимо, чтобы $M_r \to 0$. Этим диктуется знак перед корнем.

Если $\dfrac{g}{\chi^2} > \dfrac{\left(k^2 - \dfrac{\omega^2}{v^2}\right)^2}{4},$

то

$$M_r(\mathbf{k},\omega) = -\frac{k^2 - \dfrac{\omega^2}{v^2}}{2} - i\,\mathrm{sgn}\,\omega\sqrt{\frac{g}{\chi^2} - \frac{\left(k^2 - \dfrac{\omega^2}{v^2}\right)^2}{4}}. \qquad (17)$$

Знак перед корнем определяется положительностью коррелятора $S(k, \omega)$, находимого согласно ФДТ (4). По определению,

$$M_r(\mathbf{k},\omega) = \int e^{-i\mathbf{kr}+i\omega t} M_r(\mathbf{r},t,0,0)\, d\mathbf{r}dt.$$

Мнимая часть этого оператора представляет собой нечетную функцию ω. Подставляя (17) в математическую запись ФДТ (4), получим

$$S(k,\omega) = \frac{2\chi}{\omega g} T\,\mathrm{sgn}\,\omega\sqrt{\frac{g}{\chi^2} - \frac{\left(k^2 - \dfrac{\omega^2}{v^2}\right)^2}{4}}. \qquad (18)$$

Таким образом, любое, сколь угодно малое воздействие пространственно-коррелированного случайного поля на акустические волны приводит к частотному уширению акустического спектра, центрированного около частот $\pm kv$. Для положительных частот этот спектр заключен между

$$\omega_{1,2} = v\sqrt{k^2 \mp \sqrt{4\frac{g}{\chi^2}}}.$$

При $g \to 0$ мы возвращаемся к формуле для $S(k, \omega)$, описывающей идеальные фононы. При выполнении неравенства

$$\frac{g}{\chi^2} > \frac{k^4}{4} \qquad (19)$$

и при $\omega \to 0$, согласно (18), коррелятор $S(k, \omega)$ приобретает характерную для фликкер-шума особенность $1/\omega$.

Как показывает уравнение (16), фликкер-шум возникает в результате наличия в системе обратной связи по шуму. Другими словами, реакция системы на случайное воздействие $<\xi(x)\xi(x')>$ оказывается столь существенной, что приходится выходить за рамки линейного отклика и учитывать в процессе формирования отклика эффект самодействия. Именно по этой причине теория фликкер-шума до сих пор сталкивается с трудностями. Процесс формирования фликкер-шума имеет порог и возникает лишь при выполнении условия (19).

Покажем, что бозонный пик формируется в точности таким же образом и описывается той же системой уравнений (12)—(13). Условия его возникновения, с одной стороны, слабее, он не обладает порогом, и выполнения условия типа (19) не требуется. С другой стороны, он требует выполнения дополнительных условий.

Итак, независящее от времени пространственно-коррелированное случайное поле $\xi(x)$ влечет за собой уширение частотного спектра $S(\mathbf{k}, \omega)$, которое в экспериментах по неупругому рассеянию света проявляется как уширение мандельштам-бриллюеновских компонент. При сильном возмущении (19) в рассматриваемом спектре на частоте рассеиваемого излучения возникает широкая линия с характерным для фликкер-шума спектральным контуром. Бозонный пик в рассмотренной ситуации не возникает.

Пусть теперь случайное внешнее возмущение вновь не зависит от времени, но в пространственно разнесенных точках оно не коррелированно, т. е.

$$<\xi(x)\xi(x')> = \eta\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'),$$

где η — некоторая постоянная.

Такая ситуация с экспериментальной точки зрения представляется более достоверной. При этом массовый оператор оказывается равным

$$M_r(x,x') = \frac{\eta}{\chi}G_r(x,x')\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}').$$

После преобразования Фурье имеем

$$M_r(\mathbf{k},\omega) = \frac{\eta}{\chi}\int G_r(\mathbf{k},\omega)\frac{d\mathbf{k}}{2\pi^{\ 3}} = \frac{\eta}{\chi}\int_0^{k_D} k^2 G_r(k,\omega)\frac{dk}{2\pi^2}. \qquad (20)$$

Предел интегрирования по k мы ограничили дебаевской длиной волны, обусловленной конечными размерами молекул вещества. Наличие конечного верхнего предела интегрирования имеет для объяснения бозонного пика принципиальное значение. Ниже будем считать параметр k не превышающем k_D, что в рассматриваемой модели не имеет смысла. Первая итерация уравнений (14) и (20) при малых η и ω показывает, что $\mathrm{Im}G_r(k,\omega) \sim \omega$. Из той же системы уравнений следует, что $\mathrm{Im}G_r(k,\omega) = 0$ при $\omega > vk_D$.

Таким образом, $\mathrm{Im}G_r(k,\omega)$ в интервале $0 < \omega < vk_D$ обладает максимумом, т. е. бозонным пиком. Для выявления качественных закономерностей при больших η интеграл в (20) грубо аппроксимируем следующим образом:

$$\int_0^{k_D} k^2 G_r(\mathbf{k},\omega)dr \approx \frac{k_D^3}{4}G_r(\frac{k_D}{2},\omega),$$

вынеся подынтегральную функцию за знак интеграла в средней точке интервала интегрирования. Разумеется, что полученные таким образом выражения носят оценочный характер.

О количественной аналитической теории бозонного пика в настоящее время говорить не приходится [18, 39, 49]. В отсутствие аналитической теории бозонного пика подобного рода аппроксимациями пренебрегать не следует, тем более, что найденные здесь результаты значительно информативнее, чем формулы, сконструированные из размерностных соображений, чем нередко пользуются в отсутствие последовательной теории. Ниже мы укажем на связь наших результатов с расчетами других исследователей.

Для массового оператора возникает следующее алгебраическое уравнение:

$$M_r(k,\omega) = \frac{\eta k_D}{8\pi^2\chi^2}\frac{1}{\dfrac{\omega^2}{v^2} - \dfrac{k_D^2}{4} - M_r\left(\dfrac{k_D}{2},\omega\right)}.$$

Оператор $M_r(k, \omega)$ теряет зависимость от аргумента k и оказывается равным

$$M_r(k,\omega) = -\frac{\left(\dfrac{k_D}{2}\right)^2 - \dfrac{\omega^2}{v^2}}{2} + \sqrt{\frac{1}{4}\left(\frac{k_D^2}{4} - \frac{\omega^2}{v^2}\right)^2 - \frac{\eta k_D^3}{8\pi^2\chi^2}}, \qquad (21)$$

если только

$$\left(\frac{k_D^2}{4} - \frac{\omega^2}{v^2}\right)^2 > \frac{\eta k_D^3}{2\pi^2\chi^2}.$$

Согласно выражению (21) имеем

$$S(k,\omega) = i\frac{T}{\omega}\times$$
$$\times\left[\frac{1}{\dfrac{(\omega+i0)^2}{2v^2} - k^2 + \dfrac{k_D^2}{8} - \sqrt{\dfrac{1}{4}\left(\dfrac{k_D^2}{4} - \dfrac{(\omega+i0)^2}{v^2}\right)^2 - \dfrac{\eta k_D^3}{8\pi^2\chi^2}}} - c.c.\right]. \qquad (22)$$

Если же

$$\left(\frac{k_D^2}{4} - \frac{\omega^2}{v^2}\right)^2 < \frac{\eta k_D^3}{2\pi^2\chi^2}, \qquad (23)$$

то

$$M_r(k,\omega) = -\frac{\left(\frac{k_D}{2}\right)^2 - \frac{\omega^2}{v^2}}{2} - i\,\mathrm{sgn}\,\omega \times$$

$$\times\sqrt{\frac{\eta k_D^3}{8\pi^2\chi^2} - \frac{1}{4}\left(\frac{k_D^2}{4} - \frac{\omega^2}{v^2}\right)^2},$$

и согласно (4) имеем

$$S(k,\omega) = \frac{\frac{2T}{\omega\chi}\mathrm{sgn}\,\omega\sqrt{\frac{\eta k_D^3}{8\pi^2\chi^2} - \frac{\left(\frac{k_D^2}{4} - \frac{\omega^2}{v^2}\right)^2}{4}}}{\left(k^2 - \frac{k_D^2}{4}\right)\left(k^2 - \frac{\omega^2}{v^2}\right) + \frac{\eta k_D^3}{8\pi^2\chi^2}}. \quad (24)$$

Принимая во внимание симметрию $S(k,\omega) = S(k,-\omega)$, будем рассматривать лишь положительные частоты. Из (24) следует, что при $\eta \neq 0$ коррелятор $S(k,\omega)$ как функция частоты всегда обладает пиком в районе $\omega^2 = v^2\frac{k_D^2}{4}$, ограниченным слева и справа частотами

$$\frac{\omega_{1,2}^2}{v^2} = \frac{k_D^2}{4} \mp \sqrt{\frac{\eta k_D^3}{2\pi^2\chi^2}}.$$

Этот пик отождествляется с бозонным пиком. Более того, если бы этот пик не был обнаружен экспериментально, то согласно предложенному рассмотрению его удалось бы предсказать. Связь местонахождения бозонного пика с дебаевской частотой неоднократно указывалась в работах [23, 39]. Мы не настаиваем на единственности предложенного объяснения бозонного пика, но отмечаем, что предложенный механизм его появления не может не существовать.

Особо отметим, что одним из условий возникновения бозонного пика является пространственная локальность провоцирующего его случайного поля $\xi(x)$. Таким образом, решение широко дискутируемого вопроса о пространственной корреляции причин, вызывающих бозонный пик, склоняется в сторону работ [30—35]. Физическая природа случайного поля $\xi(x)$ при этом несущественна. Поэтому рассмотрение множества конкретных моделей может рассчитывать на успех.

Вместе с тем заметим, что заключение о локальном характере причин, вызывающих бозонный пик, не противоречит сущности работ [36, 37], приводящих иную идеологию. Дело в том, что в работах [36, 37] используется допущение о пространственно независимых флуктуациях упругих сил, связывающих осцилляторы, формирующие тело. Другими словами, построенный из упругих сил коррелятор содержит $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$-образную составляющую. Именно она и обеспечивает появление бозонного пика. По этой причине обсуждаемый вопрос носит скорее словесный характер, вызванный расплывчатостью утверждений. Вопрос о локальности надо решать на количественном уровне, определив длину когерентности l_ξ.

Если случайное возмущение велико

$$\sqrt{\frac{\eta k_D^3}{2\pi^2\chi^2}} > \frac{k_D^2}{4}, \quad (25)$$

то со стороны малых частот бозонный пик простирается до нуля, и в согласии с (24) в системе возникает характерная для фликкер-шума особенность $1/\omega$. При выполнении условия (25) бозонный пик сращивается с фликкер-шумом, что неоднократно наблюдалось в экспериментальных исследованиях [44—46].

Если же $\sqrt{\frac{\eta k_D^3}{2\pi^2\chi^2}} < \frac{k_D^2}{4}$,

то фликкер-шум отсутствует, и в областях $\omega < \omega_1$ и $\omega > \omega_2$, свободных от бозонного пика, на частотах

$$\frac{\omega^2}{v^2} = k^2 - \frac{\eta k_D^3}{8\pi^2\chi^2\left(\frac{k_D^2}{4} - k^2\right)} \quad (26)$$

возникают акустические бесконечно узкие пики, обусловленные нулями знаменателя (22). Вне бозонного пика со стороны больших $k > k_D/2$ мы имеем стандартный акустический пик на частоте $\omega = vk$. По мере уменьшения параметра k и приближения его к $k_D/2$ положение этого пика смещается влево вплоть до ω_2, претерпевая возмущение, обусловленное вторым членом правой части (26). По достижении точки ω_2 этот пик пропадает, поскольку мы попадаем в область существования бозонного пика $\omega_1 < \omega < \omega_2$, в которой условие (23) теряет силу.

По мере дальнейшего уменьшения параметра k акустический пик вновь возникает на частоте ω_1. Далее его положение стремится к нулю, что достигается при некотором критическом значении

$$k_c^2 = \frac{k_D^2}{8} + \sqrt{\left(\frac{k_D^2}{8}\right)^2 + \frac{\eta k_D^3}{8\pi^2\chi^2}}.$$

При $k < k_c$ акустический пик отсутствует.

Если же коррелятор стохастических воздействий $<\xi(x)\xi(x')>$ носит ограниченно протяженный характер, описываемый некоторой конечной длиной когерентности l_ξ, то мы сталкиваемся с промежуточным случаем по сравнению с двумя изученными выше. Здесь как бозонный, так и акустический пики будут уширенными, что отвечает экспериментально наблюдаемой ситуации.

Интересно отметить, что система уравнений, аналогичная (12)—(13), была получена в работе [41] исходя из модели взаимодействующих осцилляторов с использованием техники стохастических матриц. В отличие от предложенной теории в [41] под $<\xi(x)\xi(x')>$ понимается детерминированная функция, описывающая потенциал взаимодействия межу осцилляторами. Но после того как эта функция в [41] была аппроксимирована гауссовой формой, можно забыть о ее физической трактовке и рассматривать численные расчеты работы [41] как решение системы уравнений (12)—(13) с соответствующим коррелятором $<\xi(x)\xi(x')>$. При этом возникает исследованный в [41] бозонный пик, что косвенно оправдывает использованные выше аналитические аппроксимации. В работе [41], развивающей так называемую модель связанных осцилляторов, исследование ограничивается только пропагатором $G_r(\mathbf{k}, \omega)$. Коррелятор $S(\mathbf{k}, \omega)$ авторов не интересует. По этой причине фликкер-шум ускользает от их внимания.

Предложенный выше вариант объяснения бозонного пика соприкасается и с другими вариантами его объяснения, в частности, с моделью мягкой моды, предложенной в работе [39]. Обе теории используют два сильно взаимодействующих друг с другом поля, одно из которых описывает акустические волны. В модели мягкой моды [39] второе поле вводится феноменологически как некоторое осциллирующее детерминированное образование, описываемое своей массой и частотой. В нашей трактовке это поле носит чисто стохастическую природу, оно не зависит от времени и может описывать наличие примесей, вакансий и дислокаций. Но что более существенно, в работе [39] мягкая мода служит источником акустических волн. Это позволяет использовать линейную систему уравнений со всеми ее математическими достоинствами. В нашем варианте теории поле $\xi(x)$ выступает лишь в роли рассеивателя. Теория принципиально нелинейная. Итак, теория мягкой моды и предлагаемая теории основаны на разных принципах, но нельзя исключать возможность одновременного наличия в природе обоих механизмов образования бозонного пика.

Если положить $<\xi(x)\xi(x')>\sim G_r(x,x')$, то система уравнений (12)—(13) совпадет с системой уравнений, используемой в теории спаренных мод [40] на основании иных физических предпосылок. При этом степень нелинейности сильно повышается. Такая пропорциональность следует и из системы (12)—(13), если спектр акустических мод считать нелинейным.

Стохастическая теория ангармонического осциллятора, рассмотренная в работе [42], действительно приводит к квадратичной зависимости M_r от G_r.

Как показывает работа [50], учет ангармоничности может оказаться очень существенным. Возвращаясь к работе [40], отметим, что при рассмотрении твердой фазы после соответствующей перенормировки авторами была получена линейная зависимость массового оператора от искомого коррелятора. Такой вариант теории еще более сближает итоговые уравнения работы [40] с системой уравнений (12)—(13). Принципиальное отличие заключается в том, что в работе [40] уравнения выписываются непосредственно для коррелятора $S(\mathbf{k}, \omega)$, но не для пропагатора $G_r(\mathbf{k}, \omega)$. При этом точность теории оказывается недостаточной для исследования фликкер-шума.

В целом можно констатировать возникновение нового увлекательного направления, связанного с исследованием нелинейного уравнения Дайсона

$$G_r(\mathbf{k},\omega)=\frac{1}{-k^2+\dfrac{\omega^2}{v^2}-M_r(\mathbf{k},\omega)},$$

в котором $M_r(\mathbf{k}, \omega)$ зависит от $G_r(\mathbf{k}, \omega)$.

Исследование этого уравнения находится в начальной стадии, поэтому не удивительно, что в нем содержатся отгадки столь таинственных явлений, как фликкер-шум и бозонный пик. Дальнейшее его исследование, возможно, принесет с собой новые неожиданности.

Совместное использование нелинейной системы (12)—(13) и ФДТ оказалось очень продуктивным, именно оно позволило объяснить возникновение бозонного пика и фликкер-шума с единых позиций. Ранее на это обстоятельство внимание не обращалось.

В экспериментальной работе [44] авторы исследовали степень деполяризации бозонного пика и (в их терминологии) центрального пика в рассеиваемом свете. Они констатировали равенство степеней деполяризации этих излучений и сделали вывод об общности причин их возникновения. Такой вывод можно рассматривать как экспериментальное подтверждение нашего вывода об общности механизмов формирования бозонного пика и фликкер-шума.

Вернемся к бозонному пику. Найденное выше аналитическое выражение для коррелятора $S(\mathbf{k}, \omega)$

позволяет вычислить вид этого коррелятора в координатном пространстве. Так, например, для положительных частот $\omega_1 < \omega < \omega_2$ имеем

$$S(r,\omega) = \int e^{i\mathbf{kr}} S(k,\omega) \frac{d\mathbf{k}}{2\pi^{3}} =$$

$$= \frac{T}{\omega\chi}\sqrt{\frac{\eta k_D^3}{8\pi^2\chi^2} - \frac{1}{4}\left(\frac{k_D^2}{4} - \frac{\omega^2}{v^2}\right)^2} \times$$

$$\times \int_0^{k_D} \frac{\sin kr}{\pi^2 r} \frac{kdk}{\left(k^2 - \frac{k_D^2}{4}\right)\left(k^2 - \frac{\omega^2}{v^2}\right) + \frac{\eta k_D^3}{8\pi^2\chi^2}}.$$

Полюсы знаменателя без труда находятся из биквадратного уравнения, и при $kr >> 1$ следует, что

$$S(r,\omega) \sim \frac{\exp\left(-\frac{r}{l_{ac}(\omega)}\right)}{r}. \quad (27)$$

Если к тому же стохастическое поле слабое

$$\frac{\eta k_D^3}{2\pi^2\chi^2} < \left(\frac{k_D^2}{4}\right)^2,$$

то длина когерентности $l_{ac}(\omega)$ определяется следующим выражением:

$$l_{ac}^{-1}(\omega) = \frac{1}{k_D}\sqrt{\frac{\eta k_D^3}{8\pi^2\chi^2} - \frac{1}{4}\left(\frac{k_D^2}{4} - \frac{\omega^2}{v^2}\right)^2}. \quad (28)$$

При этом длина когерентности акустических образований как функция частоты изменяется в пределах от $l_{ac\,\min} = \sqrt{\frac{8\pi^2\chi^2}{\eta k_D}}$ до бесконечности. Соотношения (27) и (28) устанавливают количественную связь между бозонным пиком и релаксационными процессами в средах.

Обращаем внимание на присутствие в теории существенно разных длин когерентности l_ξ и $l_{ac}(\omega)$, причем первая из них ответственна за формирование бозонного пика, а вторая описывает его свойства.

Автор статьи выражает свою признательность доктору Ю. Г. Вайнеру, а также проф. А. А. Рухадзе, А. М. Игнатову и участникам теоретического семинара ИОФ РАН за обсуждение работы.

Литература

1. *Jonson. J. B.*//Phys. Rev., 1925. V. 26. P. 71.
2. *Schottky W.*//Ibid. 1926. V. 28. P. 74.
3. *Бочков Г. Н., Кузовлев Ю. Е.*//УФН. 1983. Т. 141. С. 1511.
4. *Bell D. F.* Noise in the Solid State. — London, Penteeh Press, 1984. — 175 p.
5. *Коган Ш. М.*//УФН. 1985. Т. 145. С. 285.
6. *Weissman M. B.*//Rev. Mod. Phys., 1988. V. 60. P. 537.
7. *Жигальский Г. П.*//УФН. 2003. Т. 173. С. 465.
8. *Handel P. H.*//Phys. Rev. A. 1980. V. 22. P. 745.
9. *Musha T.*//in Proc. 17th Int. Conf. on Noise in Physical System and 1/f Fluctuation, ed. by J. Sicula, Prague, August, 2003. P. 3.
10. *Furucava H.*//Phys. Rev. A. 1986. V. 34. P. 2315.
11. *Pellegrini B.*//in Proc. 15th Int. Conf. on Noise in Physical System and 1/f Fluctuation, ed. by C. Surya, Hong Kong, 1999. P. 303.
12. *Kogan Sh. H., Nogaev K. E.*//Sol. St. Comm., 1984. V. 49. P. 387.
13. *Michaila.H. M.*//in Proc. 16th Int. Conf. on Noise in Physical System and 1/f Fluctuation, ed. by G.bossman, Floride USA, 2001. P. 169.
14. *Benassi P., Krisch M., Masciovecchio C., Mazzacurati V., Monaco G., Ruocco G., Sette F., Verbeni R.*//Phys. Rev. Lett., 1996. V. 77. P. 3835.
15. *Foret M., Courtens E., Vacher R., Suck J. B.* // Ibid. P. 3831.
16. *Ruocco G., Sette F., Di Leonardo R., Fioretto D., Krisch M., Lorenzen M., Masciovecchio C., Monaco G., Pignon F., Scopigno T.*// Ibid. 1999. V. 83. P. 5583.
17. *Buchenau U., Prager M., Nucker N., Dianoux A. J., Ahmad N., Phillips W. A.*// Phys. Rev. B. 1986. V. 34. P. 5665.
18. *Vainer Yu. G., Naumov A. V., Bauer M., Kador L.*//Phys. Rev. Lett., 2006. V. 97. N. 185501.
19. *Aliotta F., Vasi C., Maisano G., Majolino D., Mallamace F., Migliardo P.*//J. Chem. Phys., 1986. V. 84. P. 4731.
20. *Krishnamuru S., Bansil R., Wiafe-Akenten J.*//Ibid. 1983. V. 79. P. 5863.
21. *De Santis A., Frattini R., Sampoli M., Mazzacurati V., Nardone M., Ricci M. A., Ruocco G.*//Mol. Phys., 1987. V. 61. P. 1199.
22. *Benassi.P., Mazzacurati V., Nardone M., Ricci M. A., Ruocco G., De Santis A., Frattini R., Sampoli M.*//Ibid. V. 62. P. 1467.
23. *Ovsyuk N. N., Novikov V. N.*//Phys. Rev. B. 1998 V. 57. P. 14615.
24. *Inoue R., Kanaya T., Nishida K., Tsukushi I., Shibata K.*//Phys. Rev. E. 2006. V. 74. N.021801.
25. *Fontana A., Orsingher L., Rossi F., Buchenau U.*//Phys. Rev. B. 2006. V. 74. №. 172304.
26. *Chong Song-Ho.*// Phys. Rev. E. 2006. V. 74. N. 031205.
27. *Ciliberti S., De Los Rios P., Piazza F.*//Phys. Rev. Lett., 2006. V. 96. N. 198103 .
28. *Scopingo T., Suck J. B., Angelini R., Albergamo F., Roucco G.*//Ibid. N 135501.
29. *Ruffle B., Guimbretiere G., Courtens E., Vacher R., Monaco G.*//Ibid. N. 045502.
30. *Laird B. B., Schober H.* R.//Ibid. 1991. V. 66. P. 636.
31. *Elliot S. R.*// Europhys. Lett., 1992. V. 19. P. 201.
32. *Карпов В. Г., Клингер М. И., Игнатьев Ф. Н.*//ЖЭТФ. 1983. Т. 84. С. 760.
33. *Паршин Д. А.*//ФТТ. 1994. Т. 36. С. 1809.
34. *Buchenau U., Pecharroman C., Zorn R., Frick B.*//Phys. Rev. Lett., 1996. V. 77. P. 659.
35. *Nakamura M., Arai M., Inamura Y., Otomo T., Bennington S. M.*//Phys. Rev. B. 2002. V. 66. N. 024203.

36. *Schirmacher W., Diesemann G., Ganter C.*//Phys. Rev. Lett., 1998. V. 81. P.136.
37. *Taraskin S. N., Loch Y. L., Natarajan G., Elliott S. R.*// Ibid. 2001. V. 86. P. 1255.
38. *Benassi P., Krisch M., Masciovecchio C., Mazzacurati V., Monaco G., Ruocco G., Sette F., Verbeni R.*//Ibid. 1996. V.77. P. 3835.
39. *Klinger M. I., Vatova L.*//Phys. Rev. B. 2005. V. 72. N. 134206.
40. *Gotze W., Mayr M. R.*//Phys. Rev. E. 2000. V. 61. P. 587.
41. *Ciliberti S., Grigera T. S., Martin-Mayor V., Parisi G., Verrocchio P.*//J. Chem. Phys., 2003. V. 119. P. 8577.
42. *Векленко Б. А.*//ЖЭТФ. 2005. Т. 128. С. 662.
43. *Векленко Б. А.*//Шумовые и деградационные процессы в полупроводниковых приборах. — М.: МНТОРЭС. Моск. энерг. ин-т, 2006. С. 16.
44. *Tao N. J., Li G., Chen X., Du W. M., Cummins H. Z.*// Phys. Rev. A. 1991. V. 44. P. 6665.
45. *Russet J. L., Duval E., Boukenter A.*//J. Chem. Phys., 1990. V. 92. P. 2150.
46. *Walrafen G. E.*//Ibid. 1964. V. 40. P. 3249.
47. *Callen H. B., Welton T. A.*//Phys. Rev., 1951. V. 83. P. 34.
48. *Кубо Р.*//В сб. Термодинамика необратимых процессов. — М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1962. С. 345.
49. *Parisi G.*//J. Phys.: Condens Matter. 2003. V. 15. P. 765.
50. *Gurevich V. L., Parshin D. A., Schober H. R.*//Phys. Rev. B. 2003. V. 67. N. 094203.

Статья поступила в редакцию 31 августа 2007 г.

Flicker noise and boson peak as a one and the same phenomenon

B. A. Veklenko
Moscow Power Engineering Institute
(Technical University), Moscow, Russia

The theory of boson peak is proposed. It is shown that in bose systems with space stochastic nonhomogeneousness the flicker noise and boson peak possess one and the same nature. They are formed by nose feed-back under random perturbations of the acoustic waves and may coexist. These phenomena are described by the same equations of a common structure and consequently may be investigated by different physical models. Any theory deals by upper restricted acoustic spectrum forms the boson peak if such spectrum undergoing space noncorrelated perturbations. The appearance conditions of the flicker nose are weaker but they possess the intensity threshold of external perturbations.

УДК 519.92+95:536.758

Структурные свойства макромолекулы в термостате

А. С. Харитонов
Российский государственный социальный университет, Москва, Россия

На примере изменения структуры динамических элементов в макромолекуле, помещенной в термостат, рассматриваются ведение структурного пространства событий и физическая закономерность развития сложных систем.

В работе [1] рассмотрены фрактальные свойства "золотой пропорции" и представлены известные закономерности как усреднение структурных свойств сложных систем. Вместо принципа максимума энтропии как функции двух классов независимых переменных предложен принцип равенства мер хаоса и порядка в трех классах зависимых переменных.

В настоящей работе впервые доказана невыполнимость постулата Л. Больцмана о связи энтропии с вероятностью для описания стационарного состояния сложной системы, состоящей из элементов с переменной структурой и содержащей память о структуре динамических элементов. Доказательство построено на анализе свойств цепной макромолекулы в термостате. Предложено использовать новый исходный постулат о статическом равновесии, основанный на уравновешивании противоположных процессов, описываемых с помощью мер хаоса и порядка, построенных в трех классах взаимозависимых переменных. В этом случае конструкция системы является управляющим устройством, изменяющим пространство разрешенных и запрещенных состояний при постоянстве внешних условий. Установлен феноменологический закон развития, описываемый изменением мер хаоса в трех классах переменных на примере макромолекулы.