Отзыв официального оппонента

о диссертации Ярослава Михайловича Бельтюкова
“Теория случайных матриц и колебательные свойства аморфных твердых тел”,
представленной на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.07 – “физика конденсированного состояния”

Диссертация посвящена описанию колебательных степеней свободы в аморфных телах в терминах теории случайных матриц. Эти случайные матрицы удается ввести таким образом, что условие устойчивости системы (положительной определенности динамической матрицы M) выполняется автоматически, причем соблюдается требование трансляционной инвариантности (энергия системы не меняется при одновременном одинаковом смещении всех атомов). Предлагаемые модели, отвечающие различным способам введения случайных матриц, исследуются в основном численно, проводится сравнение с имеющимися экспериментальными данными.

Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. В подробном и хорошо написанном введении описывается современное состояние физики колебательных степеней свободы в аморфных телах (как теории, так и с эксперимента).

В первой главе диссертации вводятся основные объекты и исследуются их базовые свойства. Динамическая матрица представляется в виде $M = AA^T$, где A – квадратные матрицы $N \times N$, со случайными элементами A_{ij}.

1. В простейшем варианте все матричные элементы A_{ij} считаются независимыми, распределенными по Гауссу с нулевым средним и стандартным отклонением Ω. Такой случай исследовался ранее другими авторами в другом контексте, не связанном с колебаниями; плотность состояний для такой системы хорошо известна (закон Марченко-Пастура, в случае квадратных матриц сводящийся к формуле Вигнера). Эта модель соответствует нефизическому случаю бесконечного радиуса взаимодействия (все атомы с равной вероятностью взаимодействуют со всеми).

2. Для того, чтобы сделать модель несколько более реалистичной, следующим шагом в диссертации рассматриваются “разреженные

матрицы", в которых каждая строка содержит ровно n ненулевых элементов, причем положение этих элементов выбирается случайно, что грубо соответствует замене исходной решетки на "решетку Бете" – квазидревесный граф с конечным координационным числом. Проведенные численные симуляции показали, что при больших $n \gg 1$ плотность колебательных состояний (ПКС) $g(\omega)$, с точностью до масштабного преобразования, описывается тем же распределением, что и для неразреженных матриц, а при малых $n \sim 1$ довольно существенно отличается от него, особенно в области малых частот, где видна тенденция к образованию особенности в $g(\omega)$.

3. Дальнейшее улучшение модели сводится к тому, что, во-первых, ненулевые матричные элементы A располагаются теперь не в случайных местах, а на связях между ближайшими соседями, а во-вторых, случайными являются только недиагональные элементы A, а диагональные определяются из соотношения $\sum_j A_{ij} = 0$, которое обеспечивает трансляционную инвариантность и наличие голдстоуновских мод в системе (фононов). Результаты симуляций такой улучшенной модели оказались похожими на предыдущий случай, причем роль n играет размерность пространства d: при больших d хорошо работает формула Вигнера, а при малых d возникают отклонения, в основном, в области малых ω.

Усредненные по реализациям ПКС $g(\omega)$ и модуль Юнга E, а также свойства (степень локализации) соответствующих колебательных мод для рассмотренных моделей исследованы в диссертации численно. В частности, показано, что при увеличении размера системы N модуль Юнга в среднем уменьшается: $E \propto 1/N$, так что в термодинамическом пределе система оказывается чрезвычайно мягкой, и в ней не могут распространяться фононы. Этим, в частности, объясняется отсутствие типичного дебаевского поведения ПКС $g(\omega) \propto \omega^{d-1}$ при малых частотах.

Для устранения этого недостатка вместо $M = AA^T$ в диссертации предлагается рассматривать $M = AA^T + \mu M_0$, где M_0 отвечает обычной (не случайной) матрице жесткости решетки. Численные симуляции показали, что $\lim_{N\to\infty} E \propto \sqrt{\mu}$, причем, при конечном $\mu \neq 0$ всегда имеется область малых частот $\omega < \omega_{\mathrm{IR}} \sim \Omega\sqrt{\mu}$, в которой доминируют фононы и для ПКС справедлива дебаевская формула. В точке $\omega = \omega_{\mathrm{IR}}$ приведенная ПКС $g(\omega)\omega^{-(d-1)}$ достигает максимума (бозонный пик), а затем $g(\omega)$ долго остается примерно постоянной, заметно падая только при $\omega \sim \Omega$.

Таким образом, введение небольшого второго слагаемого в M приводит к образованию мягкой фононной щели в ПКС, относительная ширина этой щели $\sim \sqrt{\mu}$.

Численная оценка степени делокализации, а также исследование статистики уровней показали, что почти все моды (включая даже и те, для которых $\omega \sim \Omega \gg \omega_{\mathrm{IR}}$ и для которых не выполнен критерий Иоффе-Регеля, т.е. длина свободного пробега много меньше длины волны) делокализованы, относительное число локализованных мод мало и они сосредоточены в области больших частот.

В качестве альтернативного способа введения конечной жесткости в систему также кратко рассмотрена модель, в которой $M = AA^T + \beta BB^T$, где A и B две разные случайные матрицы из одного ансамбля. Интересно, что эта модель ведет себя очень похоже на предыдущую: $\lim_{N\to\infty} E \propto \sqrt{\beta}$, $\omega_{\mathrm{IR}} \sim \Omega\sqrt{\beta}$ при малых β. Удивительно, что свойства матриц $M = AA^T$ и $M = AA^T + BB^T$ столь сильно различаются. Почему? Мне кажется, что ответ на этот вопрос мог бы пролить некоторый свет и на факт аномальной мягкости матрицы $M = AA^T$. Вместе с тем нужно отметить, что параметризация случайной динамической матрицы с помощью μ или β оказалась удобным способом управления макроскопической жесткостью. Интересно было бы также понять, не оказывает ли параметр β столь же сильного влияния и на локализационный переход: а вдруг патологически слабая локализация при $\beta = 0$ имеет то же происхождение, что и патологическая мягкость? Тогда при $\beta \sim 1$ локализация должна заметно усиливаться...

Первая глава – главная в диссертации, она содержит формулировку основных моделей и их важнейших свойств. **Результаты, представленные в ней, чрезвычайно интересны и нетривиальны**. К сожалению (и это является **недостатком проделанной в главе работы**) диссертант не смог или не посчитал нужным придумать какой-либо аналитический вывод для им полученных численно простых и красивых законов (зависимость E от N и μ или β, характер особенности в плотности состояний при $\omega \to 0$ и т. д.). Также, на мой взгляд, недостает убедительного качественного объяснения обращения жесткости системы в нуль в термодинамическом пределе и факта отсутствия локализации в области частот $\omega_{\mathrm{IR}} < \omega < \Omega$. Все эти вопросы, как мне кажется, представляют увлекательное поле для будущей деятельности диссертанта.

Во второй главе диссертации проанализированы процессы диффузионного переноса энергии колебательными степенями свободы в аморфном веществе. Численное исследование динамического структурного фактора $S(\mathbf{k}\omega)$ подтвердило, что при низких частотах $\omega < \omega_{\rm IR}$ импульс и энергия в системе переносятся фононами с линейным законом дисперсии $\omega(\mathbf{k}) \approx vk$, где скорость фононов $v \propto \mu^{1/4}$. Длина свободного пробега $l(\omega) \propto \omega^{-4}$, по-видимому, связана с упругим рассеянием фононов либо на статическом беспорядке, либо на квазилокальных колебаниях. [Кстати, по моему мнению, выбор между двумя этими возможностями можно было бы сделать, рассматривая температурную зависимость $l(\omega, T)$]. Коэффициент диффузии фононов $D(\omega) = vl(\omega)/3$ описывает их движение на больших временах $t \gg \tau \equiv l(\omega)/v$. При увеличении частоты длина свободного пробега быстро уменьшается, и при $\omega \sim \omega_{\rm IR}$ сравнивается с длиной волны – нарушается критерий Иоффе-Регеля и говорить о фононах, как о плоских волнах, становится невозможно. Длина волны $\lambda_{\rm IR} \propto \mu^{-1/4}$ "предельных" фононов с $\omega \sim \omega_{\rm IR}$ является минимальным пространственным масштабом, на котором еще можно представлять фононы, как квазиклассические частицы.

При $\omega > \omega_{\rm IR}$ эффективными возбуждениями в системе становятся "диффузоны" – квазичастицы, движение которых является диффузионным на всех масштабах времени (в отличие от фононов, которые диффундируют только на больших временах $t > \tau$, а на малых $T < \tau$ движутся баллистически). Коэффициент диффузии для диффузонов в интервале $\omega_{\rm IR} \ll \omega \ll \Omega$ практически не зависит от частоты и резко падает только при приближении к порогу локализации. В диффузонной области $\omega > \omega_{\rm IR}$ структурный фактор хорошо описывается формулой случайных блужданий (что соответствует коэфициенту диффузии, не зависящему от частоты) и практически не зависит от величины μ (при малых μ). Действительно, при этих частотах динамическая жесткость системы определяется в основном первым слагаемым AA^T в динамической матрице, в то время как второй член μM_0 существен только для статических и низкочастотных (фононных) эффектов.

С использованием найденных ПКС и коэффициента диффузии, была определена теплопроводность системы $\kappa(T)$. Показано, что при $T < \omega_{\rm IR}$ перенос тепла происходит за счет диффузии фононов; в этой области температур $\kappa \propto T$. В области высоких температур $T > \omega_{\rm IR}$ тепло переносится диффузонами и коэффициент κ перестает зависеть от температуры.

В качестве небольшого замечания к материалу второй главы могу упомянуть недовыясненность механизма рассеяния фононов. Вызывает вопросы гипотеза о “рассеянии фононов на квалилокальных колебаниях”. Казалось бы, рассеяние одних собственных мод системы на других (а и фононы, и квазилокальные – или любые другие – колебания являются собственными модами системы) возможно только при учете нелинейности. А она ведь, кажется, нигде не вводилась?

В третьей главе диссертации разработанный формализм, использующий теорию случайных матриц, применяется к задаче о колебаниях дисперсной системы вблизи jamming transition (со стороны “твердого тела”). Матрицу жесткости в этой задаче предлагается описывать формулой $M = AA^T$, где A – случайная прямоугольная матрица, число строк которой N_f совпадает с числом колебательных степеней свободы, а число столбцов K – с числом пар соприкасающихся частиц. Их отношение $K/N_f = z/2d$ выражается через среднее координационное число z и размерность пространства d. С другой стороны, легко показать, что в точке jamming transition как раз $z = z_c \equiv 2d$, поэтому вблизи перехода матрица A близка к квадратной: $K/N_f - 1 = (z - z_c)/z_c$, причем $(z - z_c)/z_c \ll 1$.

Так же, как и в случае неупорядоченной решетки, рассмотренной в предыдущих разделах, предположение о полной независимости элементов случайной матрицы A, вообще говоря, не реалистично (бесконечный радиус взаимодействия, древесный характер связей, отсутствие трансляционной инвариантности). Вместе с тем, в третьей главе диссертации принято именно это простейшее предположение, так как уже в его рамках удается объяснить важнейшие свойства системы, наблюдаемые экспериментально. В то же время опыт, полученный при решении предыдущей задачи, позволяет довольно надежно предсказать, к каким эффектам должна привести модификация модели, устраняющая указанные недостатки.

К прямоугольным матрицам применим закон Марченко-Пастура. В нашем случае (при $z - z_c \ll 1$) он сводится, грубо говоря, к следующему: в области $\omega_- < \omega < \omega_+$ ПКС $g(\omega) \approx g_0$ примерно постоянна, и примерно равна нулю вне этого интервала. Зависимости входящих сюда величин от близости к переходу имеют вид $\omega_- \propto (z - z_c)^{\gamma-1}$, $\omega_+ \propto (z - z_c)^{\gamma-2}$, $g_0 \sim \omega_+^{-1}$, где γ – параметр, зависящий от модели (для двух наиболее распространенных моделей $\gamma = 2$ и $\gamma = 5/2$). Самое важное во всем этом – тот факт, что величина ω_-, имеющая смысл ширины щели в ПКС, стремится к нулю при приближении к переходу. И это именно то, что наблюдается на эксперименте. Кроме того, как известно из эксперимента, в самой точке перехода сдвиговый модуль упругости в конечной системе ведет себя, как $1/N$, в полном соответствии с результатом, полученным в первой главе диссертации. Конечно, на эксперименте низкочастотная щель в ПКС – мягкая, а не жесткая, как предсказывается законом Марченко-Пастура. Ясно, что этот недостаток связан с отсутствием фононов в упрощенной модели (а именно фононные состояния располагаются внутри мягкой щели) и есть все основания надеяться, что он будет устранен, если навязать системе трансляционную инвариантность, как это было сделано в первой главе диссертации.

Насколько мне известно, jamming transition до сих пор рассматривался только с позиций теории среднего поля. А между тем, пространственные флуктуации разных параметров (например, величины z), несомненно, должны играть важную роль. Было бы, мне кажется, очень интересно посмотреть, к чему они могут приводить с точки зрения колебательных свойств системы. Разумеется, роль пространственных флуктуаций может проявиться только в более реалистичной модели с конечным радиусом взаимодействия. Это, конечно, не замечание к диссертации, а просто указание на возможное направление развития.

В четвертой главе диссертации с помощью прямой симуляции исследованы колебательные свойства реального вещества – аморфного кремния. Взаимодействие атомов смоделировано с помощью потенциала Стиллинджера-Вебера, включающего как изотропную двухчастичную часть, так и эффективное трехчастичное взаимодействие, ответственное за сдвиговую жесткость системы и, соответственно, за поперечные фононы. Трехчастичное взаимодействие считается слабым (его относительная сила регулируется подгоночным параметром Λ), поэтому поперечные фононы оказываются гораздо более низкочастотными, чем продольные, в полном соответствии с экспериментальными наблюдениями. Соответственно, в низкочастотной части ПКС доминируют именно поперечные колебательные возбуждения. Очень грубо, картина выглядит так: на самых низких частотах превалируют поперечные фононы, затем имеется бозонный пик на $\omega = \omega_{\mathrm{IR}}^{(T)}$, за которым поперечные фононы преобразуются в поперечные же диффузоны и, наконец, при еще более высоких частотах в игру вступают продольные колебательные возбуждения. Эти продольные возбуждения по началу являются фононами, но при увеличении частоты до $\omega = \omega_{\mathrm{IR}}^{(L)} \gg \omega_{\mathrm{IR}}^{(T)}$ наблюдается второй бозонный пик, теперь уже для продольных колебаний, выше которого эти колебания тоже становятся диффузонами. Наконец, при некоторой частоте, отвечающей порогу подвижности, возбуждения становятся локализованными, что проявляется о обращении в нуль соответствующего коэффициента диффузии.

В дополнение к описанной грубой картине была обнаружена очень интересная тонкая структура поперечного бозонного пика, показывающего тенденцию к расщеплению этого пика на две компоненты с частотами $\omega_1 < \omega_{\rm IR}^{(T)}$ и $\omega_2 = \omega_{\rm IR}^{(T)}$, причем при малых значениях Λ более мощной оказывается низкочастотная компонента, а при больших – высокочастотная, сами же положения линий при изменении Λ изменяются пропорционально скорости поперечных фононов $c_T \propto \sqrt{\Lambda}$. Эта тонкая структура связывается с наличием в низкочастотной части спектра (при $\omega < \omega_{\rm IR}^{(T)}$) двух типов возбуждений: фононов и мягких квазилокальных колебаний (КЛК). Последние отвечают гораздо более неоднородному пространственному распределению амплитуд колебаний и имеют гораздо меньшую степень делокализации, чем фононы. Если я правильно понял, то эти два типа возбуждений сосуществуют во всей области $\omega < \omega_{\rm IR}^{(T)}$, но при $\omega < \omega_1$ главный вклад в ПКТ дают фононы, а при $\omega_1 < \omega < \omega_2$ – КЛК. При этом диффузия определяется фононами при всех $\omega < \omega_{\rm IR}^{(T)}$.

Должен сказать, что этот интригующий сюжет (фононы против КЛК) **кажется мне изложенным в диссертации недостаточно четко** (а, может быть, и не до конца выясненным), в связи с чем у меня возникло много вопросов:

- Действительно ли фононы и КЛК сосуществуют при одной и той же энергии, или же при $\omega \sim \omega_1$ происходит постепенная трансформация первых в последние? Если верно второе, то почему не меняется коэффициент диффузии? И вообще практически ничего, кроме ПКС, не чувствует этой трансформации. На врезке к рисунку 4.5 видно изменение степени делокализации при $\omega \sim \omega_1$ – там действительно есть небольшой минимум. Но почему минимум сменяется ростом? Разве предполагается, что КЛК должны существовать только в узкой области частот вблизи ω_1?

- Локализация продольных и поперечных возбуждений происходит при одной и той же частоте, или у них разные пороги подвижности?

- Интересно, можно ли получить КЛК в каком-нибудь из вариантов параметризации матрицы M, рассмотренных в предыдущих главах диссертации?

Вообще, хотя четвертая глава диссертации стоит несколько особняком, она может быть очень интересна и с точки зрения понимания результатов предыдущих глав. Предложенные в них представления матрицы M в принципе позволяют покрыть весь ансамбль физически допустимых матриц. Но как следует выбирать вес той или иной конфигурации внутри этого ансамбля? Ответа на этот вопрос внутри самого формализма нет и не может быть – приходится руководствоваться только соображениями простоты. В то же время прямая симуляция простых скалярных систем в духе того, как это сделано для реальной векторной системы в четвертой главе, могла бы дать такой ответ и позволила бы оценить качество сделанных приближений.

Оценивая диссертацию в целом, должен сказать, что она содержит массу красивых и интересных результатов. Она написана хорошим языком, четко структурирована и изложена достаточно ясно и подробно. Изучать ее было легко приятно. Диссертант показал хорошее знание теоретической физики (особенно ее численных методов, но не только), а также конкретной экспериментальной ситуации в изучаемой области. В качестве общего замечания упомяну мелкие, но очень многочисленные языковые ошибки (в основном в согласовании падежных окончаний и т.п.) вызванные, вероятно, не слишком внимательным вычитыванием текста после многочисленных правок. Впрочем, это замечание, как и другие, высказанные выше, не отменяют моей совершенно положительной оценки диссертации.

Результаты, полученные в диссертации, рекомендуется использовать в ФТИ им. А.Ф.Иоффе РАН, ИФТТ РАН, ИХФ РАН, РНЦ “Курчатовский Институт”.

Я считаю, что диссертационная работа Я.М. Бельтюкова «Теория случайных матриц и колебательные свойства аморфных твердых тел» полностью отвечает критериям «Положения о присуждении ученых степеней» для ученой степени кандидата наук, утвержденного постановлением Правительства от 24.09.2013 г. № 842, а ее автор безусловно заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 "Физика конденсированного состояния". Основные результаты диссертации своевременно опубликованы, автореферат правильно раскрывает ее содержание.

Официальный оппонент, д. ф.–м.-н., ведущий научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки “Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук”,

Алексей Соломонович Иоселевич,

28 октября 2016 года.

142432, Московская область, г. Черноголовка,
просп. Академика Семенова, д. 1-А ,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки “Институт теоретической физики
им. Л. Д. Ландау Российской академии наук”,
телефон: +7(906)0458676, e-mail: iossel@itp.ac.ru

Подпись А.С.Иоселевича заверяю.
Ученый Секретарь ИТФ им. Л.Д.Ландау РАН,
кандидат химических наук, С.А.Крашаков