ЖЭТФ, 1997, том 111, вып. 6, стр. 2086–2098

РЕЛАКСАЦИЯ И $1/f$-ШУМ В ФОНОННЫХ СИСТЕМАХ

Ю. Е. Кузовлев

Донецкий физико-технический институт
Национальной академии наук Украины
340114, Донецк, Украина

Поступила в редакцию 17 июня 1996 г.,
после переработки 19 декабря 1996 г.

Рассмотрены соотношения между низкочастотными флуктуациями скорости диссипации в неравновесных термодинамических системах и высшими многовременными статистическими моментами равновесного шума, в частности, между флуктуациями внутреннего трения в возбуждаемой фононной системе и низкочастотными флуктуациями комбинационного рассеяния света в равновесной фононной системе. Показано, что оба этих процесса связаны с сильными флуктуациями скорости диффузии фазы и релаксации фононных мод, порождаемыми, в свою очередь, экспоненциальной неустойчивостью динамических траекторий системы.

1. ВВЕДЕНИЕ

Низкочастотные флуктуации со спектром типа $1/f$, наблюдающиеся в самых разнообразных системах, в частности, флуктуации электрической проводимости в твердых телах и флуктуации частоты в кварцевых стабилизаторах [1, 2], — один из интригующих вопросов физики. В настоящее время преобладает тенденция связывать $1/f$-шум с метастабильными состояниями (дефектами атомной структуры, электронными ловушками), обладающими широким набором времен жизни. Однако во многих случаях не удается указать конкретную физическую природу подобного набора «флуктуаторов».

Принципиально иное объяснение $1/f$-шума было предложено в [3]. Пусть некоторый случайный динамический параметр элементарных кинетических процессов влияет на их эффективность в смысле их вклада в релаксацию и диссипацию, но при этом не затрагивает термодинамическое состояние системы. Тогда соответствующие случайные изменения скорости релаксации и диссипации не будут компенсироваться «обратной термодинамической реакцией» системы. Поэтому они не имеют характерного верхнего времени жизни, и их спектр должен иметь масштабно-инвариантный степенной вид на низких частотах.

Примером служит рассмотренный в [3] эффект случайности прицельного параметра столкновений частиц в равновесном газе. Отсутствие какого-либо динамического или термодинамического механизма, который обеспечивал бы установление наперед определенного распределения столкновений по прицельному параметру (т. е. определенного «средневзвешенного» по прицельному параметру сечения рассеяния), приводит [3] к $1/f$-флуктуациям «темпа» (коэффициента) самодиффузии частиц газа. Таким путем, $1/f$-шум естественно возникает как составная часть теплового шума несмотря на заведомое отсутствие каких-либо «медленных» процессов. Другие примеры такого рода обсуждались в [4, 5].

Возможность подобного фундаментального источника $1/f$-шума можно предположить и применительно к колебаниям в кварцевых и вообще диэлектрических кристаллах. Как известно [2], наблюдаемая зависимость уровня относительных $1/f$-флуктуаций частоты кварцевых генераторов и стабилизаторов от их добротности указывает на то, что они отражают флуктуации внутреннего трения в кристаллах. При этом приходится заключить [2], что флуктуации трения гигантски велики: относительные изменения внутреннего трения на рабочей моде кристалла порядка или даже значительно больше единицы.

Дополнительную информацию о термодинамически равновесном $1/f$-шуме в кварце содержит работа [6], в которой исследовано спонтанное комбинационное рассеяние лазерного света на кварце и обнаружены $1/f$-флуктуации числа рассеянных фотонов (плотности потока фотоотсчетов) на частотах ниже 0.01 Гц. Согласно [6], уровень относительных флуктуаций плотности фотоотсчетов обратно пропорционален количеству фононных мод, задействованных в рассеянии на счетчик фотонов.

С точки зрения теории $1/f$-шума чисто фононная система как модель слабоангармоничного диэлектрического кристалла очень любопытна, так как является наряду со слабонеидеальным газом одной из базисных моделей статистической физики. Как приближенные аналитические методы, так и численные эксперименты показывают [7, 8], что с ростом количества нелинейно взаимодействующих осцилляторов доля областей регулярного движения в фазовом пространстве уменьшается, и поведение системы определяется экспоненциальной неустойчивостью траекторий по отношению к их возмущению. Известно также, что характерные времена развития неустойчивости и характерные времена релаксации (определяемые по затуханию двухвременных корреляторов) суть одно и то же. Однако те статистические характеристики неустойчивости, которые отвечают за флуктуации «темпа» релаксации и диссипации, описываются многовременными корреляторами (кумулянтами) флуктуаций в равновесном ансамбле и имеют, как было показано в [3, 4], отношение к проблеме $1/f$-шума, еще практически не изучены. Задача выявления фундаментального $1/f$-шума в фононной системе выглядит сложнее, чем в случае газа, что связано с совершенно иным характером взаимодействия квазичастиц (слабое и непрерывное вместо сильного и эпизодического). Поэтому имеет смысл рассмотреть общие свойства многовременных корреляторов и их отношение к экспоненциальной неустойчивости, с тем чтобы яснее поставить вопросы к будущей более конструктивной теории.

Следует отметить, что вообще идея $1/f$-шума, вызванного флуктуациями «темпа» диссипации, была впервые выдвинута П. Ханделем [9–11]. Оригинальная «квантовая теория $1/f$-шума» Ханделя [9–13] связывает эти флуктуации и, в конечном счете, $1/f$-шум с флуктуациями сечений рассеяния в элементарных кинетических процессах. Флуктуации же сечений рассеяния связываются, в свою очередь, с излучением сверхмягких фотонов при электродинамических процессах или других, включая гравитационные, квантов безмассовых полей или возбуждений. Результирующие формулы этой теории часто обнаруживают впечатляющее количественное согласие с экспериментальными данными [12–14]. В частности, согласно [2, 12, 13], она дает количественную интерпретацию $1/f$-шума в кварце.

Что касается конкретно фононных систем, то с позиций теории [9–13] $1/f$-шум в кварце тесно связан с электрическими (а точнее, пьезоэлектрическими) свойствами кварца: они не только делают его легко наблюдаемым, но и порождают его в соответствии с главенствующей ролью электромагнитных взаимодействий и сверхмягких квантов электромагнитного поля в теории Ханделя. Согласно же излагаемой нами точке зрения, динамика решетки способна порождать $1/f$-шум уже сама по себе, независимо от того, какое название носят силы взаимодействия между частицами решетки.

Настоящая работа преследует две цели. Во-первых, мы выведем общее соотношение между избыточным шумом в возбуждаемой сторонними силами неравновесной системе и равновесными корреляторами. В частности, покажем, что как флуктуации диссипации (внутреннего трения), так и $1/f$-шум при комбинационном рассеянии света в фононной системе описываются, по-существу, одними и теми же многовременными (относящимися к более чем двум различным моментам времени) корреляторами (а точнее, кумулянтами) высшего порядка. Вообще такие корреляторы несут информацию о низкочастотных флуктуациях кинетических и транспортных характеристик системы. Во-вторых, приведем аргументы в пользу того, что как флуктуации диссипации, так и флуктуации рассеяния связаны с большими и долгоживущими флуктуациями трения каждой из фононных мод, обусловленного взаимодействием между модами. Эти же флуктуации, в свою очередь, порождены экспоненциальной неустойчивостью малых возмущений динамической траектории системы. Их долгоживущий характер есть следствие того факта, что в динамически стохастизирующейся системе случайный (неусредненный по ансамблю) отклик переменных данной моды на их прошлые значения никогда не затухает. В результате быстрое затухание обычных квадратичных равновесных корреляций, выражающее собой явления диссипации и необратимости, неизбежно сопровождается возникновением бесконечно долгоживущих корреляций высшего порядка.

2. МОДЕЛЬ

Рассмотрим классическую систему с гамильтонианом

$$H'(q,p,t) = H(q,p) - \sum q_k f_k(t), \quad H(q,p) = \frac{1}{2}\sum p_k^2 + U(q),$$

где $\{q_k, p_k\} \equiv X$ — канонически-сопряженные координаты и импульсы, а силы $f(t)$ задают стороннее динамическое возмущение. Для простоты все массы взяты одинаковыми и равными единице, так что скорости $v_k \equiv dq_k/dt$ совпадают с импульсами, $v_k = p_k$. В фононной системе индекс k может нумеровать либо позиции атомов, либо колебательные моды, определяемые в гармоническом приближении. В последнем случае при наличии слабого кубичного ангармонизма и пространственной однородности (трансляционной инвариантности) $U(q)$ имеет характерный вид

$$U(q) = \frac{1}{2}\sum \omega_k^2 q_k^2 + \frac{\lambda}{6} N^{-1/2} \sum u_{ijk}\omega_i\omega_j\omega_k q_i q_j q_k + \ldots$$

Здесь коэффициенты u_{ijk} отличны от нуля, только если какая-либо из комбинаций волновых векторов $i \pm j \pm k$ равна нулю или кратна базисному вектору обратной решетки, N — полное число частиц или мод, а параметр ангармоничности λ имеет порядок $\lambda \sim \vartheta^{-1/2}$, где ϑ — «температура плавления» решетки.

3. ОБЩИЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ ФЛУКТУАЦИИ РЕЛАКСАЦИИ И ДИССИПАЦИИ

1. Пусть вначале система находилась в термодинамически равновесном состоянии, описываемом каноническим ансамблем. Диссипация энергии под действием возмущения, т.е. работа A возмущающих сил,

$$A \equiv \int dH\left(q(t), p(t)\right) = \int v(t) f(t) dt,$$

определяется статистическими характеристиками сопряженных с силами скоростей. Произвольный неравновесный кумулянт скоростей можно свести к так называемым «квазиравновесным» корреляторам (кумулянтам), которые обозначим скобкой $\langle \ldots \rangle_q$. По определению, кумулянт $\langle v(t_1), \ldots, v(t_n) \rangle_q$ отвечает модифицированному возмущению $f(t)\eta(t - min(t_1, \ldots, t_n))$, где $\eta(x)$ — ступенчатая функция Хевисайда, включающемуся в момент $t_0 \equiv \min(t_1, \ldots, t_n)$ и совпадающему с $f(t)$ при $t > t_0$. Как показано в [15, 16],

$$\langle v(1), \ldots, v(n) \rangle = \langle v(1), \ldots, v(n) \rangle_q + \frac{1}{T} \int\limits_{-\infty}^{\min(1,\ldots,n)} \langle v(1), \ldots, v(n), v(t) \rangle_q f(t) dt,$$

где T — начальная температура системы, и для краткости временные аргументы обозначены цифрами. Угловые скобки с m запятыми внутри (кумулянтные скобки Малахова) обозначают совместный кумулянт $(m + 1)$-го порядка $m + 1$ выражений, разделенных запятыми.

Из этой формулы для среднего значения работы $\langle A \rangle$ и дисперсии ее флуктуаций $\langle A, A \rangle$ вытекают соотношения

$$\langle A \rangle = \int f(1) \langle v(1) \rangle d1 = \frac{1}{T} \int f(1) \langle v(1), v(2) \rangle_q f(2) d1 d2,$$

$$\begin{aligned} \langle A, A \rangle = \int f(1) \langle v(1), v(2) \rangle f(2) d1 d2 = \\ = 2T \langle A \rangle + \frac{2}{T} \int f(1) f(2) \langle v(1), v(2), v(3) \rangle_q f(3) d1 d2 d3, \end{aligned} \quad (1)$$

где все интегралы по временным аргументам берутся с условием $1 > 2 > 3$. Таким образом, флуктуации работы возмущающих сил содержат два вклада. Первый из них, $2T\langle A \rangle$, можно трактовать как «дробовой» шум, соответствующий среднему потоку энергии в систему $\langle A \rangle$, а второй — как «избыточный» шум. Как видно, избыточный вклад определяется кумулянтами высшего порядка. Поэтому он исчезает в гауссовском приближении.

Пусть возмущение квазипериодическое и «бесконечно слабое». Тогда если равновесный квадратичный коррелятор скоростей затухает достаточно быстро, то как среднее значение поглощенной энергии, так и дробовой вклад в ее флуктуации пропорциональны $f^2\vartheta$, где ϑ — продолжительность действия возмущения. Далее, учтем, что из-за нечетности скоростей относительно инверсии времени равновесный тройной кумулянт скоростей равен нулю. Поэтому фигурирующий в выражении для $\langle A, A \rangle$ «квазиравновесный» тройной кумулянт пропорционален f, и в целом избыточная составляющая

$\langle A, A\rangle$ имеет порядок f^4. Четвертую степень возмущения выделим явно, введя функцию динамического линейного дифференциального отклика скоростей на слабое возмущение

$$\Gamma_{jk}(t-t_0) \equiv \delta v_j(t)/\delta f_k(t_0)\big|_{f=0}.$$

Тогда из (1) получаем

$$\langle A, A\rangle = 2T\langle A\rangle + \frac{2}{T}\int\limits_{(1>4,\quad 2>3,\quad 2>4)} f(1)f(2)\langle v(1), \Gamma(2,3), v(4)\rangle_0 f(3)f(4)d1\ldots d4, \tag{2}$$

где значок «0» подчеркивает равновесность коррелятора, опущены слагаемые высших порядков, и в скобке под знаком интеграла указано правило упорядочения переменных интегрирования.

Если интеграл в (2) растет также пропорционально длительности возмущения, т. е. $\sim \vartheta f^4$, то избыточная часть шума качественно не отличается от дробовой, давая к ней малую поправку. Однако более быстрый степенной рост $\sim \vartheta^{s+1} f^4$ $(s>0)$ может быть интерпретирован только как вклад, обязанный флуктуациям диссипативных параметров системы, причем, как нетрудно увидеть, он эквивалентен низкочастотным флуктуациям со спектром вида ω^{-s}.

Учтем теперь, что для равновесного канонического гиббсовского ансамбля выполняется соотношение (легко получающееся интегрированием по частям)

$$\langle v(t_0)\Phi\{X(t)\}\rangle = T\langle \partial\Phi\{X(t)\}/\partial v(t_0)\rangle, \tag{3}$$

где $\Phi\{\ \}$ есть произвольный функционал траектории $X(t)$, рассматриваемой как функция «начальных» значений $X(t_0)$ в фиксированный момент времени t_0. Подбирая подходящие функционалы и привлекая равенства

$$\delta X(1)/\delta f(0)\big|_{f=0} = \partial X(1)/\partial v(0), \quad \Gamma_{jk}(t,t_0) \equiv \partial v_j(t)/\partial v_k(t_0),$$

вытекающие из гамильтоновых уравнений движения, из (3) имеем

$$\begin{aligned} &\langle v(1), v(0)\rangle = T\langle \Gamma(1,0)\rangle, \\ &\langle v(1), v(2), v(3), v(0)\rangle = T\langle \Gamma(1,0), v(2), v(3)\rangle + \text{ перестановки.} \end{aligned} \tag{4}$$

Как следует из (2) и (4) избыточные флуктуации работы (флуктуации диссипации) связаны с равновесными кумулянтами четвертого порядка и поэтому не могут быть корректно описаны в гауссовском приближении[1)]

2. Но те же самые кумулянты, или, точнее, сводящиеся к ним кумулянты комплексных амплитуд фононных мод $a(t)$, отвечают за флуктуации интенсивности рассеяния света[2)]. Действительно, сечение рассеяния фотона (или вероятность рассеяния

[1)] Более подробно универсальные флуктуационно-диссипационные соотношения между равновесными четверными и неравновесными парными корреляторами, а также соотношения более высокого порядка рассматривались в [15–17].

[2)] С позиций флуктуационно-диссипационных соотношений флуктуации рассеяния являются частным случаем флуктуаций диссипации, поскольку в (изначально равновесную) систему следует включить, помимо фононов, тепловое и рассеянное поля [13].

в единицу времени) на данной моде включает в себя величину $|\int a(t)\exp(i\Omega t)dt|^2$, где Ω — комбинационная частота, а интеграл берется по интервалу времени порядка обратной ширины бриллюэновской линии. Соответственно, наблюдаемые низкочастотные флуктуации связаны с четырехточечными корреляторами типа

$$\langle a^+(t_1)a(t_1'), a^+(t_2)a(t_2')\rangle = \langle a^+(t_1)a(t_2')\rangle\langle a(t_1')a^+(t_2)\rangle + \langle a^+(t_1), a(t_1'), a^+(t_2), a(t_2')\rangle, \tag{5}$$

в которых пара моментов t_1, t_1' отстоит далеко от t_2, t_2'. Ввиду последнего обстоятельства определяющую роль играет последний, кумулянтный, член в правой части (5), описывающий четырехвременные корреляции.

Подчеркнем, что флуктуации заселенностей фононных мод кристалла $a^+(t)a(t)$ описываются только двухвременными кумулянтами, хотя и четвертого порядка. В [6] предполагается, что именно флуктуации заселенностей служат причиной $1/f$-флуктуаций интенсивности рассеяния. Однако изменения числа фононов в той или иной моде несомненно порождают возвращающую термодинамическую реакцию. Следовательно, они имеют характерное время жизни и не могут служить причиной $1/f$-спектра (но могут, конечно, приобрести индуцированную низкочастотную составляющую в неравновесном состоянии).

Поэтому $1/f$-шум при рассеяния света должен трактоваться с точки зрения четырехвременных кумулянтов, которые охватывают флуктуации не только числа фононов, но и, как показывают следующие ниже рассуждения, флуктуации времени релаксации фононных мод (и позволяют именно к этим последним свести флуктуации вероятности рассеяния). При этом нужно учесть, что «время релаксации» (например, период $t - t_0$, на котором затухает коррелятор $\langle a^+(t)a(t_0)\rangle$) определяется скоростью диффузии фазы фононной моды, так как именно диффузия фазы отвечает за уширение спектральной линии колебаний и сплошной спектр. Поэтому правильней сказать, что четырехвременные кумулянты (в отличие от четырехточечных двухвременных) описывают флуктуации коэффициента диффузии фазы.

4. МНОГОТОЧЕЧНЫЕ КУМУЛЯНТЫ И ФЛУКТУАЦИИ ТРЕНИЯ

Выделим какую-либо одну фононную моду. По отношению к ней остальные моды играют роль термостата — источника трения и в то же время случайной «ланжевеновской силы». Гауссовской статистике силы отвечал бы неслучайный линейный закон трения. Однако нелинейность межмодового взаимодействия приводит как к негауссовости силы, так и к нелинейности и флуктуациям трения. Последние означают, что строго однозначно разделить ланжевеновскую силу и трение невозможно. Но допустим, что флуктуации трения являются более медленными, чем релаксация заселенности. Тогда естественно рассматривать переменные выделенной моды как случайные процессы, которые «модулируются» низкочастотными изменениями трения и были бы гауссовыми при детерминированной модуляции, но становятся негауссовыми из-за ее случайности[3)].

[3)] Аналогичная статистическая картина возникает при анализе обладающего негауссовой статистикой броуновского движения, или диффузии [19, 20].

С точки зрения данной феноменологической картины каждый статистический момент является результатом двойного усреднения — сначала гауссова шума при фиксированной реализации трения и затем флуктуаций трения. После первого усреднения четвертый статистический момент амплитуды имел бы вид

$$\langle a^+(1)a(3)a^+(2)a(4)\rangle = K(13)K(24) + K(14)K(23),$$

где $K(12) \equiv \langle a^+(1)a(2)\rangle$ характеризует релаксацию на интервале между 1 и 2. После усреднения флуктуаций трения, которое обозначим вторыми угловыми скобками, получим для коррелятора (5)

$$\begin{aligned}\langle\langle a^+(1)a(3), a^+(2)a(4)\rangle\rangle &\equiv \langle\langle a^+(1)a(3), a^+(2)a(4)\rangle\rangle - \langle\langle a^+(1)a(3)\rangle\rangle\langle\langle a^+(2)a(4)\rangle\rangle = \\ &= \langle\langle a^+(1)a(3), a^+(2)a(4)\rangle\rangle - \langle K(13)\rangle\langle K(24)\rangle = \langle K(13), K(24)\rangle + \langle K(14), K(23)\rangle.\end{aligned}$$

Из сравнения этого выражения с (5) находим

$$\langle a^+(1), a(3), a^+(2), a(4)\rangle = \langle K(13), K(24)\rangle + \langle K(14), K(23)\rangle. \tag{6}$$

Отсюда и следует, что четырехвременной кумулянт может трактоваться как характеристика флуктуаций диссипации. В силу (4) ту же нагрузку несет совместный кумулянт скоростей и дифференциального отклика в (2).

Рассмотрим порядок величины корреляторов (6), (4). Прежде всего, ангармоничность потенциальной энергии $U(q)$ заведомо порождает одновременные многоточечные корреляции между амплитудами q_k или a_k. В частности, при малом параметре ангармонизма λ всякая четверка мод, для которой одна из комбинаций $j \pm k \pm l \pm m$ совпадает с узлом обратной решетки, связана кумулянтом $\langle q_j, q_k, q_l, q_m\rangle \sim \lambda^2 T^3 N^{-1}(\omega_j\omega_k\omega_l\omega_m)^{-1}$. Следовательно, одновременные четверные корреляции имеют порядок N^{-1}. Из уравнений движения легко увидеть, что по меньшей мере такой же масштаб должны иметь четырехвременные кумулянты q_k и скоростей v_k.

Даже подобная малость высших корреляций не означает, что ими можно пренебречь: будучи «размазанными» в импульсном пространстве, они локализованы и не зависят от размера системы N в координатном представлении. Но на самом деле из уравнений движения следует большее. А именно, при условии перемешивания в фазовом пространстве, т. е. при наличии экспоненциальной неустойчивости малых возмущений, даже и в импульсном представлении хотя бы некоторые из четырехвременных кумулянтов q_k и v_k не содержат малого параметра $1/N$.

Присвоим выделенной фононной моде условный индекс «0». Положив $Q \equiv q_0$, вычленим из потенциальной энергии взаимодействие этой моды с прочими:

$$U(q, Q) = \frac{1}{2}\omega_0^2 Q^2 + U_0(q) + \mu Q u(q), \quad \mu \equiv \lambda N^{-1/2},$$

ограничившись кубичным приближением. Из уравнений движения

$$\frac{d^2 q_k}{dt^2} = F_k + f_k, \quad F_k \equiv -\frac{\partial U_0}{\partial q_k}, \quad f_k \equiv -Q\mu\frac{\partial u(q)}{\partial q_k}, \quad \frac{d^2 Q}{dt^2} = -\omega_0^2 Q - \mu u(q)$$

видно, что обусловленный взаимодействием с выделенной модой вклад f_k в силу, действующую на любую из прочих мод, относительно мал в меру фактора $N^{-1/2}$. Действительно, с учетом отмеченного в разделе свойства коэффициентов u_{ijk} и равенства

$\langle q_j^2 \rangle = T\omega_j^{-2}$ имеем оценки:

$$\langle f_k^2 \rangle \simeq (\mu\omega_0\omega_k)^2 \langle Q^2 \rangle \Big\langle \Big(\sum_j u_{0jk}\omega_j q_j \Big)^2 \Big\rangle \sim T^2\mu^2\omega_k^2, \quad \langle F_k^2 \rangle \sim T\omega_k^2, \quad \frac{\langle f_k^2 \rangle}{\langle F_k^2 \rangle} \sim \frac{T}{\vartheta} N^{-1}.$$

Рассматривая на данном основании f_k как малое возмущение, выразим его действие через линейный дифференциальный отклик

$$R_{kj}(tt') \equiv \delta q_k(t)/\delta f_j(t') = \partial q_k(t)/\partial v_j(t').$$

Имеем

$$q(t) \simeq q^0(t) + \int R(tt') f(t') dt' \equiv q^0(t) + q^1(t),$$

где q^0 представляет эволюцию термостата, не возмущенную выделенной модой. Подставляя это разложение в уравнение для последней и линеаризуя на том же основании $u(q)$ по $q^1(t)$, придем к приближенному ланжевеновскому уравнению:

$$\frac{d^2Q}{dt^2} + \omega_0^2 Q = \xi(t) + \int_{-\infty}^{t} \gamma(t,t') Q(t') dt'. \tag{7}$$

Здесь $\xi(t) \equiv -\mu u(q)$ играет роль ланжевеновской силы, а интеграл с ядром

$$\gamma(t,t') \equiv \mu^2 \sum_{jk} \frac{\partial u}{\partial q_j}(t) R_{jk}(tt') \frac{\partial u}{\partial q_k}(t') \tag{8}$$

определяет перенормировку частоты (вообще говоря, зависящую от переменных термостата) и, главное, нелокальное и случайное трение, причем здесь фигурируют невозмущенные переменные термостата ($q = q^0$).

Проделанная линеаризация имела бы смысл и оправдала бы себя, если бы получающееся трение обладало малыми флуктуациями, например, порядка $1/N$. Такой порядок имели бы флуктуации интеграла в (7), если бы мы заменили дифференциальный отклик $R_{kj}(tt')$ на его среднее значение, а остающиеся факторы оценили в рамках гауссова приближения. Однако с учетом случайности $R_{kj}(tt')$ дисперсия интеграла в (7) содержит, помимо прочего, слагаемые типа

$$\sum_{jk} L_{jj}(tt) \iint L_{kk}(t_1t_2) \langle R_{jk}(tt_1) R_{jk}(tt_2) \rangle \langle Q(t_1) Q(t_2) \rangle dt_1 dt_2,$$

где через L_{jk} обозначен коррелятор переменных $\mu\partial u/\partial q$. Но экспоненциальная неустойчивость означает [7, 8], что дисперсии элементов матрицы линейного дифференциального отклика $G(tt') \equiv \partial X(t)/\partial X(t')$ и, в частности, подматрицы R экспоненциально растут при раздвижении временных аргументов. Поэтому коррелятор $\langle R_{jk}(tt_1) R_{jk}(tt_2) \rangle$ является экспоненциально нарастающей функцией разностного аргумента $t - \max(t_1, t_2)$ (содержа, очевидно, при этом неосциллирующую компоненту) и, значит, выписанный интеграл расходится по одной из двух размерностей интегрирования.

Таким образом, в линейном приближении слагаемое с трением в ланжевеновском уравнении имеет бесконечную дисперсию. Предположив на основании слабости взаимодействия мод линейность этого уравнения, мы пришли к противоречию — бесконечности суммарной реакции решетки на выделенную моду. Отсюда можно сделать два взаимосвязанных вывода. Во-первых, флуктуации трения на самом деле не являются относительно малыми[4)], т. е. выражение (6) может быть сравнимо по величине с $\langle K(11')\rangle\langle K(22')\rangle$. Во-вторых, корректное ланжевеновское уравнение должно включать нелинейное трение[5)]. Поскольку последнее мало в меру ангармоничности и при этом должно подавить бесконечность линейного приближения, то результирующие флуктуации трения останутся большими.

5. РЕЛАКСАЦИЯ И ДОЛГОЖИВУЩИЕ МНОГОВРЕМЕННЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ

1. Обсудим характер затухания высших кумулянтов. Покажем прежде всего, что они, в принципе, способны обладать бесконечно долгоживущим поведением. Рассмотрим $2N \times 2N$-матрицу дифференциального отклика $G(tt_0) \equiv \partial X(t)/\partial X(t_0)$. Определенные выше $N \times N$-матрицы Γ и R совпадают соответственно с правым нижним и правым верхним квадрантами G. Матрица G подчиняется линейному уравнению

$$\frac{dG}{dt} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ \partial^2 U/\partial q^2 & 0 \end{pmatrix} G \equiv B(t)G.$$

Поскольку в отсутствие сторонних сил (т. е. при $f = 0$) касательный к траектории вектор-столбец $dX/dt \equiv \dot{X} = \{v, dp/dt\} \equiv \{v, F\}$ удовлетворяет аналогичному уравнению $d\dot{X}/dt = B\dot{X}$, он является линейной комбинацией столбцов матрицы G. Отсюда следует соотношение

$$\dot{X}(t) = G(tt_0)\dot{X}(t_0), \tag{9}$$

которое выражает собой инвариантность автономного движения системы относительно трансляций во времени. Еще одно подобное соотношение вытекает из сохранения энергии при автономной эволюции. Благодаря консервативности имеем $\partial H(t)/\partial X(t_0) = \partial H(t_0)/\partial X(t_0)$, откуда

$$\nabla H(t)G(t, t_0) = \nabla H(t_0), \tag{10}$$

где $\nabla H \equiv \partial H/\partial X = \{-F, v\}$ следует понимать как вектор-строку. Оба соотношения связаны друг с другом в силу тождества

$$G^{-1} = -gG^{+}g, \quad g \equiv \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix},$$

---

4) Заметим, что предположение о большой величине и очень нерегулярном характере флуктуаций трения отдельно взятой моды было высказано еще в [2].

5) Это утверждение вытекает также из флуктуационно-диссипационных соотношений, согласно которым флуктуации линейного трения должны сопровождаться кубичным трением [17, 21], а флуктуации последнего — высшими нелинейностями.

в котором I — единичная $N \times N$-матрица, а крест — символ эрмитова сопряжения. Из (9), (10) видно, кстати, что векторы $\dot{X}(t)$ и $\nabla H(t)$, будучи всегда ограниченными, лежат в (двумерном [7]) подпространстве нерастягивающихся и несжимающихся со временем возмущений.

Умножение (9) или (10) на любой функционал от $X(t)$ и усреднение по произвольному равновесному ансамблю траекторий (инвариантной мере на множестве начальных условий) приводит к формально точным соотношениям между корреляторами. В частности, из (9) получаем

$$\sum_k \left[\langle v_k(t)\Gamma_{kj}(tt_0)v_j(t')\rangle - \langle \dot{p}_k(t)R_{kj}(tt_0)v_j(t')\rangle\right] = \langle v_j(t_0)v_j(t')\rangle = T\langle \Gamma_{jj}(t_0t')\rangle, \qquad (11)$$

где последнее равенство относится к каноническому ансамблю.

В каждом из равновесных корреляторов в левой стороне (11) выделим связную кумулянтную часть с учетом того, что $\langle \dot{X}(t)\rangle = 0$, например,

$$\langle v(t)\Gamma(tt_0)v(t')\rangle = \langle v(t)v(t')\rangle\langle \Gamma(tt_0)\rangle + \langle v(t), \Gamma(tt_0), v(t')\rangle.$$

Пусть квадратичные корреляторы и, значит, $\langle \Gamma(t,t_0)\rangle$ стремятся к нулю с ростом $t-t_0$, $t-t'$. Тогда, при удалении момента t соответствующие слагаемые исчезают и все динамические корреляции, которые отражаются равенством (9), переключаются на высшие кумулянты. Следовательно, хотя бы некоторые из них не исчезают при произвольно больших значениях $t-t_0$ и $t-t'$. В импульсном представлении различные степени свободы должны быть равноправны в (11). Учитывая еще, что благодаря колебательному характеру эволюции фононных переменных два слагаемых в квадратной скобке в (11) имеют один и тот же предел, приходим к асимптотике

$$\langle v_k(t), \Gamma_{kj}(tt_0), v_j(t')\rangle \simeq \langle v_j(t_0)v_j(t')\rangle/2N \quad (t-t_0, \quad t' \to \infty). \qquad (12)$$

В частности, при $t_0 = t'$ с помощью (3), (4) нетрудно придать (12) вид

$$\langle n_k(t), n_j(t_0)\rangle \sim \frac{1}{N}\langle n_k\rangle\langle n_j\rangle \quad (t-t_0 \to \infty),$$

где n_k — заселенности. Данная асимптотика выражает (в соответствии с физическим смыслом исходных равенств (9), (10)) слабую, но никогда не затухающую корреляцию между энергиями двух произвольных мод.

Формула (12) дает формально точный пример долгоживущего поведения высших корреляторов (и, кроме того, очевидным образом демонстрирует незатухающий характер флуктуаций матрицы Γ и их корреляцию с диффузией фаз). Однако, для того чтобы описать корреляцию «темпов» диффузии фаз на двух далеко разнесенных интервалах времени, трехвременных кумулянтов, фигурирующих в (11), (12), недостаточно, нужны четырехвременные кумулянты типа (6).

2. Устройство последних попробуем представить следующим образом. Рассмотрим кумулянт (6), например для выделенной моды, считая, что промежутки времени $r \equiv 1-3 > 0$ и $s \equiv 2-4 > 0$ фиксированы и сравнимы с ее временем релаксации. Допустим, что флуктуирующее трение на интервале «r» можно описать в приближении $K(1,3) \simeq n_1 \exp[(i\omega - \gamma_1)r]$, где ω — перенормированная частота моды, n_1 — случайная заселенность моды на интервале «r», а γ_1 — сглаженное по нему случайное трение, и

так же для интервала «s». Если разность $1-2>0$ много больше времени корреляции, то вторым членом в правой части (6) можно пренебречь, а для первого написать

$$\langle K(13),K(24)\rangle \simeq \exp\left[i\omega(r+s)\right]\{\langle n_1,n_2\rangle\langle\exp(-r\gamma_1)\rangle\langle\exp(-s\gamma_2)\rangle + \\ + \langle n_1\rangle\langle n_2\rangle\langle\exp(-r\gamma_1),\exp(-s\gamma_2)\rangle\}. \tag{13}$$

Пусть $r=0$. Тогда с учетом формул (3), (4) кумулянт (6) сводится к трехвременному кумулянту, совершенно аналогичному (12) (при $j=k$). С другой стороны, в фигурной скобке в (13) остается только первое слагаемое, и мы получаем

$$\langle K(13),K(24)\rangle \simeq \langle n_1,n_2\rangle\langle K(24)\rangle \sim \frac{1}{N}\langle K(24)\rangle,$$

что по смыслу совпадает с правой частью (12). Однако при ненулевых интервалах r и s порядок величины (13) и тем самым (6) будет определяться уже не фактором $1/N$, а вторым слагаемым в (13), т. е. корреляцией (немалых, как показано) флуктуаций коэффициентов трения γ_1,γ_2:

$$\langle K(13),K(24)\rangle \sim \langle\exp(-r\gamma_1),\exp(-s\gamma_2)\rangle.$$

Поскольку бесконечность дисперсии флуктуаций линейного трения обязана вкладу в интеграл в (7) произвольно далекого прошлого, общего для интервалов $1-3$ и $2-4$, то (7) ведет, конечно (если отвлечься от расходимостей), к незатухающим корреляциям между γ_1 и γ_2 и долгоживущей зависимости корреляторов (6) и (13) от $1-2$. В этом можно убедиться, например, оценивая четырехвременной кумулянт интеграла трения. Под знаком четырехкратного интегрирования по штрихованным переменным он содержит, помимо прочих, слагаемые со структурой

$$L(13)L(24)\langle R(11')R(33'),R(22')R(44')\rangle L(1'3')L(2'4')\langle Q(1')Q(3')\rangle\langle Q(2')Q(4')\rangle.$$

Учтем мультипликативный характер флуктуаций матрицы G и ее составляющих, в том числе R. В области $1',3'<2,4$ в четверном корреляторе матрицы R наиболее существен такой вариант «спаривания» множителей при усреднении, когда вклады в $R(11')$ и $R(33')$ от интервалов времени между $1',3'$ и $2,4$ спариваются с $R(22')$ и $R(44')$ (соответственно или «наперекрест»), мультипликативные же вклады в $R(11')$ и $R(33')$ от интервалов $1,3-2,4$ подвергаются спариванию между собой. Последнее и приведет, в силу экспоненциальной неустойчивости, к результату, не затухающему при любой дистанции $1-2$.

Долгоживущий характер четырехвременных кумулянтов должен сохраниться и с учетом нелинейности ланжевеновского уравнения. Поскольку коэффициентные функции каждого из ряда нелинейных по $Q(t)$ членов трения тоже будут чувствительными к бесконечно удаленному прошлому, их сумма может оказаться конечной только за счет столь же долгоживущих динамических корреляций $Q(t)$, какие характерны для коэффициентных функций.

Подчеркнем, что данное следствие неустойчивости возникает, как и сама неустойчивость, уже в «затравочном» гауссовом приближении, в котором случайная компонента квадранта $\partial^2U/\partial q^2$ матрицы $B(t)$, диктующей эволюцию дифференциального отклика, считается гауссовской. Дело в том, что, как хорошо известно, линейная система со случайно меняющимися параметрами экспоненциально неустойчива в смысле второго и высших статистических моментов. В результате, как позволяют предположить приведенные соображения, статистика флуктуаций испытывает своего рода «фазовый переход» от малых (порядка $1/N$) к большим (независящим от N) долгоживущим многовременным негауссовым корреляциям. Последние, влияя на $B(t)$ и на дифференциальный отклик, должны в таком случае найти проявление и в форме низкочастотных флуктуаций показателей неустойчивости («скорости» перемешивания в фазовом пространстве).

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение обсудим отношение наших построений к другим теориям. С принципиальной точки зрения долгоживущее масштабно-инвариантное поведение флуктуаций скорости диффузии фазы выглядит единственно возможным: поскольку характерные масштабы времени для взаимодействия мод задаются диффузией фазы, то для флуктуаций скорости диффузии не остается характерного масштаба времени. Поэтому наличие соответствующего низкочастотного шума не противоречит случайности фазы, которая необходима для кинетических моделей обмена энергией между модами [8]. Нет также и противоречия с эргодичностью. В свое время Крылов показал [22], что, несмотря на перемешивание, частоты появления событий не обязаны усредняться по времени вдоль конкретной траектории системы. Как это может быть, когда речь идет о кинетических событиях, понятно из анализа измерения, например, четырехвременных равновесных кумулянтов [4]. «Долгоживучесть» является внутренним свойством измеряемого сложного события и характеризует роль его длительности, т. е. разности между крайними временными аргументами кумулянта. Ничто не мешает этому свойству уживаться с тем, чтобы при фиксированной разности реальное измерение, проводимое посредством усреднения по времени (одинакового сдвига во времени всех аргументов), совпадало с результатом усреднения по ансамблю, как этого требует эргодичность.

Коснемся различий и сходства с другой концепцией фундаментального $1/f$-шума [9–13], не затрагивая внутренних проблем ни теории Ханделя (см., например, [22]), ни нашего подхода (см. выше). В теории Ханделя также существенна роль негауссовости статистики шума и высших корреляций [10, 11]. Однако у нас долгоживущие корреляции являются исключительно свойством статистического ансамбля. За ними не стоят какие-либо долгоживущие причинные связи, доступные наблюдению на конкретной фазовой траектории, и нет больших характерных времен «когерентности». Напротив, экспоненциальная неустойчивость при малейшем огрублении описания ведет к утере памяти о прошлом и причинности. В теории же Ханделя характерные большие времена имеются, это обратные частоты сверхмягких квантов. Далее, в этой теории флуктуации сечений рассеяния выступают в качестве источника шума (причем связанного с внешним окружением). У нас флуктуации коэффициента диффузии [4, 19, 20], сечения рассеяния [3], подвижности [6] и вообще кинетических величин являются в очевидном, а именно, лингвистическом, смысле фиктивными, так как приписываются не динамическим переменным, а величинам, которые не имеют определенного значения за рамками усреднения по ансамблю[6]. Они появляются на феноменологическом уровне [19, 20] либо (как флуктуации сечений рассеяния) на уровне статмеханики при пе-

[6] Впрочем, это можно отнести и к сечениям или вероятностям рассеяния и в квантовой механике, и тем более в квантовой статмеханике.

реходе к огрубленному описанию в терминах интегралов столкновений [3]. Однако в любом случае они имеют формально строгий эквивалент в виде утверждений о тех или иных корреляторах чисто динамических переменных.

Наконец, заметим, что вообще фундаментальная природа $1/f$-шума не противоречит возможной существенной роли дефектов структуры и поверхности в реальных фононных системах, коль скоро они влияют на спектры и взаимодействие фононных мод и вводят дополнительные механизмы релаксации. Принципиален только вопрос, являются ли дефекты первоисточником или лишь одним из каналов реализации $1/f$-шума, мыслимого и в идеальной системе.

Литература

1. Y. Nogushi, Y. Teramachi, and T. Musha, Appl. Phys. Lett. **40**, 872 (1982).
2. P. H. Handel, Solid State El. **22**, 875 (1979).
3. Ю. Е. Кузовлев, ЖЭТФ **94**(12), 140 (1988).
4. Г. Н. Бочков, Ю. Е. Кузовлев, УФН **141**, 151 (1983).
5. Yu. E. Kuzovlev, Phys. Lett. A **194**, 285 (1994).
6. T. Musha, B. Gabor, and M. Shoji, Phys. Rev. Lett. **64**, 2394 (1990).
7. А. Лихтенберг, М. Либерман, *Регулярная и стохастическая динамика*, Мир, Москва (1984).
8. Г. М. Заславский, *Стохастичность динамических систем*, Наука, Москва (1983).
9. P. H. Handel, Phys. Rev. Lett. **34**, 1492, 1495 (1975).
10. P. H. Handel, Phys. Rev. A **22**, 745 (1980).
11. P. H. Handel, Phys. Rev. A **26**, 3727 (1982).
12. P. H. Handel, IEEE Trans. ED **41**, 2023 (1994).
13. P. H. Handel, Phys. Stat. Sol. B **194**, 393 (1996).
14. А. ван дер Зил, ТИИЭР **76**, 29 (1988).
15. Г. Н. Бочков, Ю. Е. Кузовлев, ЖЭТФ **76**, 1071 (1979).
16. G. N. Bochkov and Yu. E. Kusovlev, Physica A **106**, 443 (1981).
17. Г. Н. Бочков, Ю. Е. Кузовлев, ЖЭТФ **72**, 238 (1977).
18. Г. Н. Бочков, Ю. Е. Кузовлев, Радиофизика **24**, 855 (1981).
19. Ю. Е. Кузовлев, Г. Н. Бочков, *О природе и статистических характеристиках* $1/f$*-шума*, Препринт НИРФИ № 157, Горький (1982).
20. Ю. Е. Кузовлев, Г. Н. Бочков, Радиофизика **26**, 310 (1983).
21. Г. Н. Бочков, Ю. Е. Кузовлев, Радиофизика **21**, 1467 (1978).
22. Н. С. Крылов, *Работы по обоснованию статистической физики*, Изд. АН СССР, М.-Л. (1950).
23. Th. M. Nieuwenhuizen, D. Frenkel, N. G. van Kampen, Phys. Rev. A **35**, 2750 (1987).