

**Бельтюков Ярослав Михайлович**

**ТЕОРИЯ СЛУЧАЙНЫХ МАТРИЦ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ  
СВОЙСТВА АМОРФНЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ**

Специальность 01.04.07 — физика конденсированного состояния

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук.

Научный руководитель:

д. ф.-м. н., профессор *Козуб Вениамин Иванович*,

заведующий сектором федерального государственного бюджетного учреждения науки Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

д. ф.-м. н., профессор *Иоселевич Алексей Соломонович*,

ведущий научный сотрудник федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук;

д. ф.-м. н., профессор *Липовский Андрей Александрович*,

профессор федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет Российской академии наук».

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова».

Защита состоится «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2016 г. в \_\_\_ часов \_\_\_ минут на заседании диссертационного совета Д 002.205.01 при ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН по адресу: 194021, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 26.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН и на сайте института <http://www.ioffe.ru>.

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2016 г.

Ученый секретарь диссертационного совета, к.ф.-м.н.

А.А. Петров

# Общая характеристика работы

## Актуальность темы исследования

Установление общих свойств колебаний в аморфных твердых телах (стеклах) является одной из ключевых проблем в области физики неупорядоченных систем. Ближний порядок аморфных твердых тел напоминает ближний порядок в соответствующих кристаллах, но дальний порядок отсутствует. Беспорядок в расположении атомов существенно влияет на такие макроскопические свойства, как, например, теплопроводность. Температурная зависимость теплопроводности в аморфных и кристаллических телах значительно отличается, и разница может достигать четырех порядков по величине. На рис. 1 показана температурная зависимость теплопроводности кристаллического и аморфного  $\text{SiO}_2$ , другие аморфные диэлектрики имеют качественно такую же температурную зависимость теплопроводности [3].

При низких температурах, ниже 4 К, низкочастотные длинноволновые акустические фононы являются хорошо определенными возбуждениями, которые переносят тепло в стеклах. При таких температурах теплопроводность  $\kappa(T) \propto T^2$  определяется резонансным рассеянием фононов на двухуровневых системах [4; 5]. Между 4 К и 20 К теплопроводность  $\kappa(T)$  насыщается и показывает хорошо известное плато [3]. Как было показано в работе [2], плато можно объяснить с помощью резонансного рассеяния фононов на квазилокальных колебаниях. Квазилокальные колебания вместе с двухуровневыми системами и фононами ответственны за многие универсальные свойства стекол [6]. Выше примерно 20 К теплопроводность снова возрастает (приблизительно линейно,  $\kappa \propto T$ ) и, наконец, насыщается на более высоком значении, при температуре порядка нескольких сотен градусов Кельвина [1].

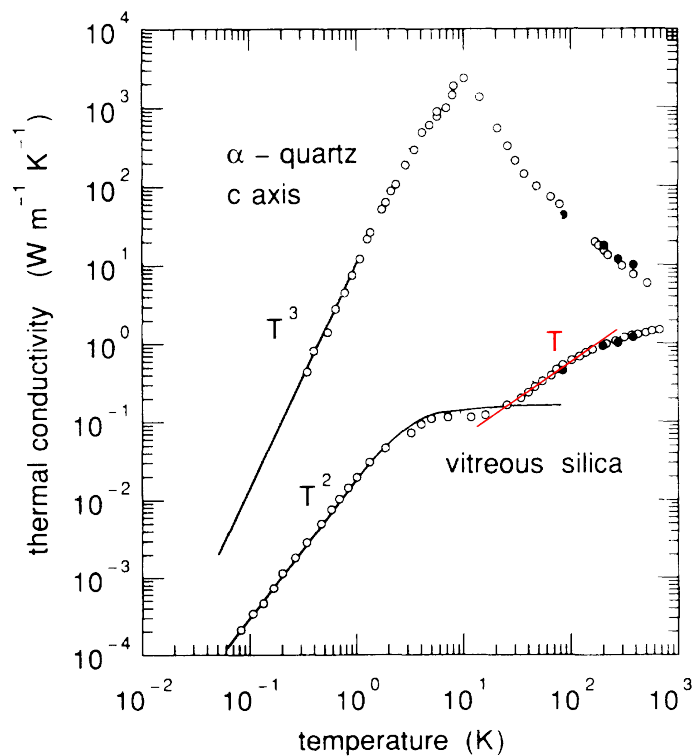


Рис. 1. Теплопроводность кристаллического и аморфного  $\text{SiO}_2$  [1]. Нижняя линия — существующая теория теплопроводности аморфных твердых тел [2]. Прямая линия  $\kappa \propto T$  показывает линейную зависимость теплопроводности от температуры.

Однако микроскопический механизм переноса тепла в стеклах в диапазоне температур выше плато (от 20 К и выше, включая комнатную температуру) до сих пор плохо изучен. Как правило, считается, что происхождение этого второго подъема теплопроводности (над плато) не связано с акустическими фононами. Тем не менее, существующие модели (модель Эйнштейна и модель минимальной теплопроводности) не следуют из микроскопического описания колебаний атомов, и они не имеют зависимости  $\kappa \propto T$  [7].

Было показано, что в рассматриваемом диапазоне температур (и частот) длина свободного пробега акустических фононов  $l$  становится порядка их длины волны  $\lambda$  [8–10]. Соответственно, критерий Иоффе-Регеля для фононов [11] нарушается. Расчеты в рамках молекулярной динамики подтвердили существование кроссовера Иоффе-Регеля для некоторых реальных и модельных стекол [12; 13], а также неупорядоченных решеток [14; 15].

В режиме сильного рассеяния, описанного выше, стандартное понятие плоских волн (фононов) с определенным волновым вектором  $\mathbf{q}$  становится неприменимым. Вопрос о физическом механизме, отвечающем за перенос тепла в стеклах в диапазоне температур от 20 до 1000 К является открытым. Существенный рост теплопроводности (примерно на один порядок) при этих температурах указывает на то, что большинство колебательных мод в соответствующем диапазоне частот не локализованы.

Отличные от фононов делокализованные колебания в аморфных твердых телах были введены в работе [16] и названы *диффузонами* (англ. diffusons). Такие колебания на расстояниях порядка длины свободного пробега распространяются через систему не баллистически, как фононы, а за счет диффузии. Это важный класс возбуждений, который занимает в стеклах доминирующую часть колебательного спектра. Диффузоны являются делокализованными возбуждениями, поэтому они могут быть ответственны за теплопроводность стекол выше плато.

Недавние эксперименты по неупругому рентгеновскому рассеянию в стеклах [17; 18] показывают, что колебания в том же диапазоне частот имеют ширину линии  $\Gamma \propto q^2$ . Это необычное поведение до сих пор не имеет теоретического объяснения. Та же зависимость была найдена методом молекулярной динамики для аморфного кремния [19].

Другим универсальным свойством аморфных материалов является так называемый бозонный пик. В соответствии с дебаевским предсказанием, низкочастотная плотность колебательных состояний  $g(\omega) \propto \omega^2$ . Тем не менее, аморфные материалы показывают избыточную плотность колебательных состояний в области низких частот. Приведенная плотность колебательных состояний  $g(\omega)/\omega^2$ , как функция  $\omega$  показывает бозонный пик, который может

быть обнаружен экспериментально с помощью таких методов, как неупругое рассеяние нейтронов. Как правило, положение бозонного пика  $\omega_b$  коррелирует с частотой кроссовера Иоффе-Регеля  $\omega_{IR}$  [20–24].

Еще одной неупорядоченной системой с богатыми механическими и колебательными свойствами являются дисперсные системы, где колеблются не отдельные атомы, а макроскопические частицы [25]. Такие системы обладают свойствами, похожими на свойства стекол. В том числе, в них были обнаружены диффузоры на частотах выше критерия Иоффе-Регля [26; 27]. При этом, в зависимости от плотности упаковки частиц, можно в широких пределах варьировать частоту Иоффе-Регля, упругие модули и другие характеристики. Однако, свойства таких тел получены в основном путем численных расчетов и не всегда имеют теоретическое объяснение.

## Цели и задачи работы

*Целью* настоящей работы является систематическое изучение колебательных свойств аморфных твердых тел и определение наиболее важных свойств диффузоров.

Для этого решались следующие *задачи*:

1. Разработать устойчивый подход с помощью метода случайных матриц для описания колебаний в сильно неупорядоченных системах, которые обладают свойствами, подобными тем, что наблюдается в реальных стеклах.
2. Найти плотность колебательных состояний, динамический структурный фактор и коэффициент диффузии колебаний в модели случайных матриц.
3. Сравнить динамический структурный фактор колебаний с динамическим структурным фактором случайных блужданий.
4. Определить плотность колебательных состояний дисперсных систем с помощью теории случайных матриц.
5. Изучить колебательные свойства аморфного кремния.

## Научная новизна и практическая значимость

В диссертации представлен *новый* способ описания аморфной среды с помощью случайных матриц. С одной стороны, такой способ позволяет варьировать степень беспорядка в широких пределах, с другой стороны, он

гарантирует устойчивость полученной среды. Это позволило подробно изучить колебательные свойства диффузонов, которые ответственны за теплопроводность стекол в широком диапазоне температур от 20 до 1000 К.

Разработанные методы теоретического и численного анализа позволили также изучить колебания в дисперсных средах и в аморфном кремнии.

Полученные результаты являются принципиально новыми и имеют большое практическое значение для физики неупорядоченных систем. Они позволяют объяснить значительный объем имеющихся экспериментальных данных и способствуют постановке новых экспериментов. Кроме этого, поскольку аморфные материалы широко используются в том числе для изготовления подложек, полученные результаты важны для теоретических оценок эффективности теплоотвода.

## Методология и методы исследования

В работе широко используются такие теоретические методы, как теория вероятностей, линейная алгебра и теория случайных матриц.

Кроме этого в работе активно используются различные численные методы, в том числе стандартные методы диагонализации матриц (входящие в библиотеку LAPACK), метод быстрого преобразования Фурье и методы интегрирования дифференциальных уравнений (метод Рунге-Кутты и метод Верле). Также используются современные методы анализа больших разреженных матриц с помощью разложения по полиномам Чебышева (Kernel Polynomial Method (KPM), см. обзор [28]) и метод разбиения пространства на ячейки Вороного.

## Положения, выносимые на защиту

1. С помощью аппарата случайных матриц строго обоснована концепция, предполагающая существование в аморфных телах трех типов колебательных возбуждений: фононов, диффузонов и локализованных колебаний. Определены критерии, разделяющие области существования этих типов колебаний.
2. Статистика уровней диффузонов полностью описывается статистикой Вигнера-Дайсона, полученной в рамках теории случайных матриц.
3. Структурный фактор диффузонов соответствует экспериментам по неупругому рентгеновскому рассеянию и может быть описан с помощью случайных блужданий смещений атомов.

4. Коэффициент диффузии энергии колебаний диффузонов слабо зависит от частоты, что в совокупности с примерно постоянной плотностью колебательных состояний дает линейную зависимость теплопроводности от температуры.
5. Теория случайных матриц может быть использована для определения плотности колебательных состояний дисперсных систем в модели Лиу и Нагеля.
6. Основные особенности плотности колебательных состояний и коэффициента диффузии энергии колебаний аморфного кремния можно объяснить за счет большой разницы между продольной и поперечной скоростью звука.

## **Апробация результатов**

Результаты исследований, вошедших в диссертацию, докладывались автором на различных конференциях и научных школах: Конференция по физике и астрономии для молодых ученых Санкт-Петербурга (2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014 гг.), Неделя науки СПбГПУ (2009, 2010, 2011, 2012, 2013 гг.), Международная зимняя школа по физике полупроводников (2011 и 2012 гг.), Зимняя Школа ПИЯФ по физике конденсированного состояния (2010, 2011, 2012, 2013 гг.), The 57th Meeting of the Israel Physical Society (Технион, Израиль, декабрь 2011 г.), 8th Advanced Research Workshop NanoPeter (Санкт-Петербург, июнь 2012 г.), а также на теоретических семинарах ФТИ им. Иоффе, Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, Петербургского института ядерной физики, Института физических проблем и Университета Клода Бернарда (Лион, Франция).

## **Структура и объем диссертации**

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы, изложенных на 137 страницах. Диссертация содержит 58 рисунков, 3 таблицы и библиографию из 123 наименований.

# Содержание работы

## Введение

Во введении показана актуальность работы, приведен обзор работ, посвященных колебательным свойствам аморфных тел. Сформулирована цель и задачи диссертации, выделена научная новизна, практическая значимость результатов работы, приведены положения, выносимые на защиту, а также информация об апробации работы, структуре диссертации и содержании работы.

## Глава 1. Модель случайных матриц

В данной главе разработана модель случайных матриц, которая описывает устойчивые аморфные тела с различной степенью беспорядка. Результаты этой главы опубликованы в работах [A1; A2].

В *разделе 1.1* показано, что уравнения движений механической колебательной системы с одинаковыми массами  $m$  в гармоническом приближении в скалярной модели имеют вид

$$\omega^2 u_i = \sum_{j=1}^N M_{ij} u_j, \quad (1)$$

где  $M$  — симметричная положительно определенная динамическая матрица, а  $u_i$  — смещение  $i$ -ой частицы относительно положения равновесия. При некоторых значениях  $\varepsilon = \omega^2$ , являющихся собственными числами динамической матрицы  $M$ , система уравнений (1) будет иметь нетривиальные решения. При этом  $\omega$  будет частотой соответствующей колебательной моды системы. Положительная определенность динамической матрицы  $M$  связана с устойчивостью механической системы. Это обуславливает сложную корреляцию между различными элементами динамической матрицы  $M$ , которые не могут быть рассмотрены как независимые случайные числа.

Существует теорема, согласно которой любую положительно определенную матрицу  $M$  всегда можно представить в виде [29]

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

где  $A$  — некоторая (не обязательно симметричная) матрица общего вида. И наоборот, для любой матрицы  $A$  произведение  $AA^T$  является положительно определенной эрмитовой матрицей [29]. Таким образом можно предположить, что



в аморфных телах квадраты частот  $\varepsilon = \omega^2$  — это собственные числа матрицы  $AA^T$ , где матрица  $A$  выбирается некоторым случайным образом.

В *разделе 1.2* рассмотрен ансамбль Вишарта, когда элементы матрицы  $A$  считаются независимыми случайными числами с нулевым средним и одинаковой дисперсией. В таком случае распределение собственных чисел матрицы  $M = AA^T$  соответствует закону Марченко-Пастура [30]. Также в этом разделе приведен вывод закона Марченко-Пастура, доступный для неспециалистов по теории случайных матриц.

В *разделе 1.3* показано, что в реальных системах атомы взаимодействуют только с ближайшими соседями, что соответствует разреженной матрице  $A$ . Показано, что закон Марченко-Пастура может быть применен для разреженных матриц, если ненулевые элементы расположены случайно и в каждом столбце матрицы  $A$  число ненулевых элементов много больше 1.

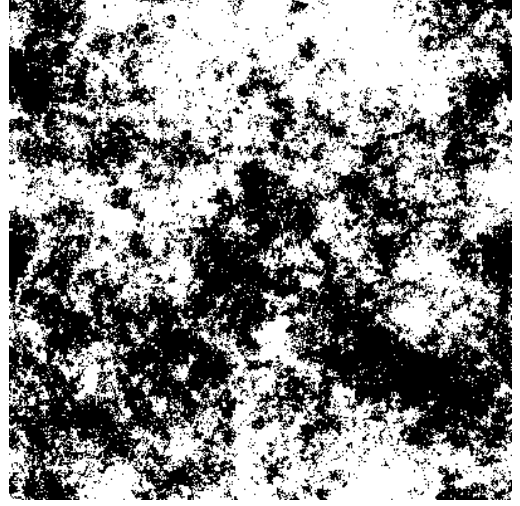
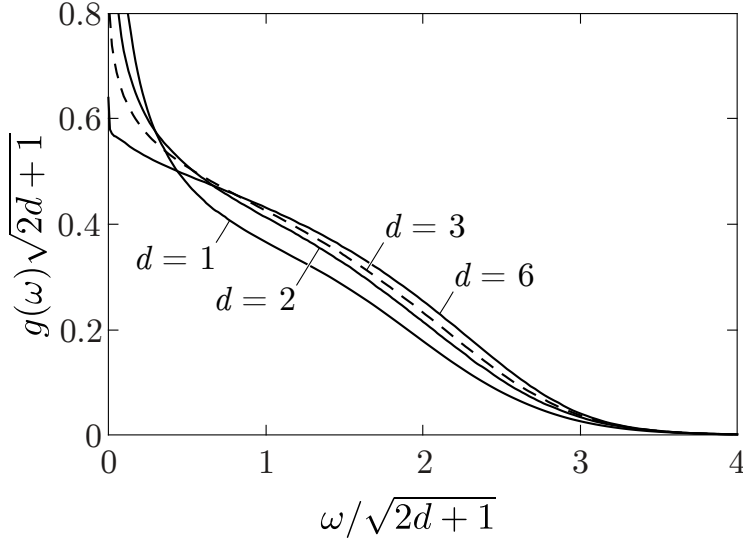
В *разделе 1.4* показано, как с помощью случайной матрицы  $A$  можно задать динамическую систему, описываемую матрицей  $M = AA^T$ , с известной топологической структурой, и имеющую случайные силы связей. В качестве примера рассмотрена простая кубическая решетка с постоянной решетки  $a_0$ , в которой имеется  $N = L \times L \times L$  атомов. Атомы имеют координаты  $(a_0 i_x, a_0 i_y, a_0 i_z)$ , где  $i_x, i_y, i_z$  — целые числа, которые могут принимать значения от 1 до  $L$ . Введем целочисленный индекс  $i = i_x + L(i_y - 1) + L^2(i_z - 1)$ . Каждый атом в решетке характеризуется своим индексом  $i$  пробегаящим значения от 1 до  $N$ .

Случайная матрица  $A$  строится следующим образом. Недиагональный элемент  $A_{ij}$  будет отличным от нуля случайным числом с гауссовым распределением с нулевым средним и дисперсией  $\Omega^2$ , если  $i$ -й и  $j$ -й атомы соседние. Все остальные недиагональные элементы  $A_{ij}$  равны нулю. Диагональный элемент вычисляется как

$$A_{ii} = - \sum_{j \neq i} A_{ji}. \quad (3)$$

Таким образом сумма элементов в каждом столбце матрицы  $A$  равна 0. Последнее условие обеспечивает зависимость потенциальной энергии связей только от разницы смещений атомов друг относительно друга.

Для простой кубической решетки имеется ровно 7 ненулевых элементов в каждой строке и в каждом столбце матрицы  $A$ . В динамической матрице  $M = AA^T$  элемент  $M_{ij}$  будет ненулевым, если  $i$ -ая частица будет ближайшим или следующим за ближайшим соседом к  $j$ -ой частице. В результате каждая частица будет взаимодействовать с 24 соседями.



**Рис. 2.** Плотность колебательных состояний для  $1d$ ,  $2d$ ,  $3d$  и  $6d$  простых кубических решеток. Размер системы равен  $N = 1000^1, 32^2, 10^3, 3^6$  соответственно. Частота указана в единицах  $\Omega$ .

**Рис. 3.** Пространственная структура собственной моды случайной матрицы  $M = AA^T$  с самой низкой частотой  $\omega_{\min}$  в двумерной квадратной решетке  $400 \times 400$ .

Плотность колебательных состояний построенной кубической решетки со случайными связями представлена на рис. 2. Для акустических фононов известно, что при  $\omega \rightarrow 0$  их плотность состояний подчиняется закону Дебая

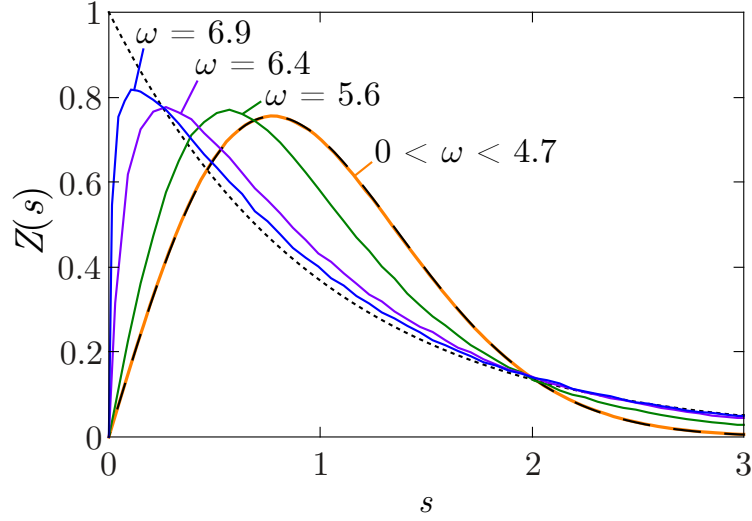
$$g_{\text{ph}}(\omega) \propto \frac{\omega^{d-1}}{v^d}, \quad (4)$$

где  $d$  — размерность пространства, а  $v$  — скорость звука. Однако на рис. 2 такая зависимость не наблюдается. Более того, плотность состояний имеет слабую (по всей видимости логарифмическую) расходимость при  $\omega \rightarrow 0$ . Из-за невыполнения закона Дебая (4) мы можем предположить, что в рассмотренной системе *отсутствуют акустические фононы*. Действительно, даже самые низкочастотные моды не похожи на плоские волны (рис. 3). В последующих параграфах это предположение будет подтверждено, а свойства таких колебаний будут подробно изучены.

В *разделе 1.5* рассмотрена степень делокализации (англ. participation ratio)

$$P(\omega) = \frac{1}{N \sum_{i=1}^N e_i^4(\omega)}, \quad (5)$$

где  $e_i(\omega)$  — координаты  $i$ -го собственного вектора, соответствующего собственному значению  $\omega^2$  динамической матрицы  $M$ . Для делокализованных мод  $P \sim 1$ , а для локализованных мод величина  $P$  падает с ростом размера системы как



**Рис. 4.** Статистика уровней для простой кубической решетки со случайными связями с  $N = 16^3$  атомами для разных частот. Статистика уровней для  $0 < \omega < 4.7\Omega$  полностью совпадает со статистикой Вигнера-Дайсона (штриховая линия). Пунктирная линия — статистика Пуассона (6).

$1/N$ . Результаты численных расчетов показывают, что большинство колебаний в рассматриваемой системе являются делокализованными.

В разделе 1.6 рассмотрена статистика уровней — еще один важный критерий, позволяющий судить о локализации или делокализации колебательных мод. Если моды являются локализованными, то их частоты разбросаны по частотной оси случайно, и нормированная разница между соседними собственными частотами  $s = \Delta\omega / \langle \Delta\omega \rangle$  распределена согласно статистике Пуассона

$$Z_P(s) = \exp(-s). \quad (6)$$

Если моды делокализованы, то имеет место эффект расталкивания уровней. В теории случайных матриц распределение расстояний между уровнями описывается статистикой Вигнера-Дайсона, которая с хорошей точностью описывается простой формулой Вигнера [31]

$$Z_{WD}(s) \approx \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right). \quad (7)$$

Точное выражение для  $Z_{WD}(s)$  имеет значительно более сложный вид и оно приведено в диссертации (см. также [32]).

Для кубической решетки со случайными связями был проведен численный анализ статистики уровней. Полученные статистики уровней для разных частот представлены на рис. 4. Как следует из рисунка, в широком диапазоне частот действительно  $Z(s) \propto s$  при малых  $s$ . Более того, для  $0 < \omega < 4.7\Omega$  видно, что статистика уровней полностью совпадает со статистикой Вигнера-Дайсона. Для

высоких частот эффект расталкивания уровней подавляется и статистика уровней приближается к пауссоновской (6).

В *разделах 1.7–1.9* подробно обсуждается модуль Юнга и распределение матричных элементов в рассматриваемой системе.

Численные расчеты показывают, что модуль Юнга  $E$  системы с описанной выше динамической матрицей  $M = AA^T$  сильно флуктуирует от реализации к реализации и убывает с ростом размера системы как  $E \sim 1/N$ . Таким образом в термодинамическом пределе ( $N \rightarrow \infty$ ) модуль Юнга и скорость звука  $v \sim \sqrt{E}$  равны нулю. В результате в рассмотренной системе  $M = AA^T$  не распространяются акустические колебания, а существующие делокализованные колебания имеют совершенно иную природу. В следующей главе показано, что такие колебания являются диффузонами, которые распространяются посредством диффузии.

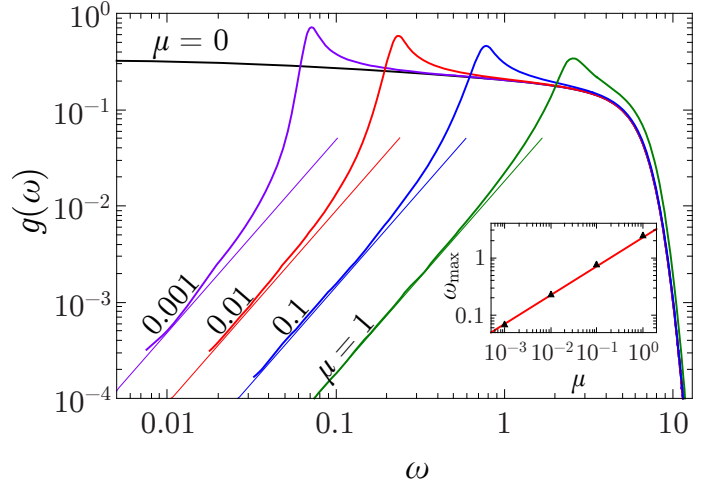
Реальные аморфные тела обладают ненулевым модулем Юнга и в них могут распространяться низкочастотные акустический фононы. Поэтому мы слегка модифицируем рассмотренную выше динамическую матрицу путем добавления регулярной составляющей

$$M = AA^T + \mu M_0, \quad (8)$$

где  $M_0$  — матрица, соответствующая кристаллу, в котором ближайшие атомы связаны матричным элементом  $(M_0)_{ij} = -\Omega^2$ , а  $\mu \geq 0$  — некоторый безразмерный коэффициент.

Вычисленная плотность состояний  $g(\omega)$  представлена на рис. 5. Качественно плотность состояний можно разделить на две области — левее и правее положения максимума  $\omega_{\max}$ . Слева от максимума наблюдается провал плотности состояний, где при малых частотах выполняется закон Дебая

$$g_{\text{ph}}(\omega) = \frac{a_0^3}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v^3}, \quad (9)$$



**Рис. 5.** Плотность состояний  $g(\omega)$  динамической матрицы  $M = AA^T + \mu M_0$  для различных значений  $\mu$  для системы из  $N = 200^3$  частиц. Линии соответствуют закону Дебая (9). На вставке показано, что положение максимума плотности состояний от  $\mu$  зависит как  $\omega_{\max} \propto \sqrt{\mu}$ . Частота измеряется в единицах  $\Omega$ .

Справа от максимума плотность состояний практически совпадает с плотностью состояний при  $\mu = 0$ . Как будет показано в главе 2, колебания слева от максимума — это акустические фононы, а справа — диффузоны.

В *разделе 1.10* обсуждаются другие возможные способы введения макроскопической жесткости и акустических фононов в систему. В частности, можно зафиксировать параметр  $\mu = 1$  в динамической матрице  $M = AA^T + \mu M_0$  и вырезать связи в матрице  $M_0$ . Тогда доля оставшихся пружин  $p$  характеризует макроскопическую жесткость системы. Примечательно, что макроскопическая жесткость обнуляется только при  $p = 0$ , а при любом положительном значении  $p$  имеется некоторая ненулевая макроскопическая жесткость, даже если  $p$  меньше порога протекания  $p_c \approx 0.25$ .

Еще одной (менее очевидной) возможностью введения макроскопической жесткости является добавление к случайной динамической матрице  $AA^T$  другой случайной матрицы  $\beta VV^T$ . Здесь  $\beta$  является параметром, а случайная матрица  $V$  строится таким же образом, как случайная матрица  $A$ , но они статистически независимы друг друга. Хотя оба слагаемых  $AA^T$  и  $\beta VV^T$  в отдельности имеют нулевую жесткость (и не имеют акустических фононов), их суперпозиция вводит конечную жесткость  $E$  в систему. Жесткость меняется, когда мы изменяем параметр  $\beta$ , как  $E \propto \sqrt{\beta}$  и стремится к нулю, когда  $\beta \rightarrow 0$ .

## Глава 2. Диффузия колебаний

В данной главе исследуются транспортные свойства колебаний в предложенной модели аморфного тела. Результаты этой главы опубликованы в работах [A3—A5].

В *разделе 2.1* введен динамический структурный фактор как Фурье-образ собственных векторов

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\pi}{N} \sum_{j=1}^N \left| \sum_{i=1}^N e_i(\omega_j) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i} \right|^2 \delta(\omega - \omega_j), \quad (10)$$

где  $e_i(\omega_j)$  —  $i$ -ая компонента собственного вектора, соответствующего собственному числу  $\omega_j^2$  динамической матрицы  $M$ .

В *разделе 2.2* с помощью динамического структурного фактора исследуются низкочастотные акустические фононы в системе с динамической матрицей  $M = AA^T + \mu M_0$  с  $\mu \neq 0$ . Структурный фактор акустических фононов можно

аппроксимировать лоренцианом

$$S(\mathbf{q}, \omega) \propto \frac{1}{(\omega - \omega_{\mathbf{q}})^2 + (\Delta\omega)^2}, \quad (11)$$

где  $\omega_{\mathbf{q}}$  отображает закон дисперсии акустических фононов, а ширина  $\Delta\omega$  связана с рассеянием на беспорядке. Для вычисленного структурного фактора мы определили значения  $\omega_{\mathbf{q}}$  и  $\Delta\omega$  для каждого значения волнового вектора  $\mathbf{q}$  и разных значений  $\mu$ . Соответствующая длина свободного пробега фононов имеет вид

$$l = v_g \tau = \frac{d\omega/dq}{2\Delta\omega}. \quad (12)$$

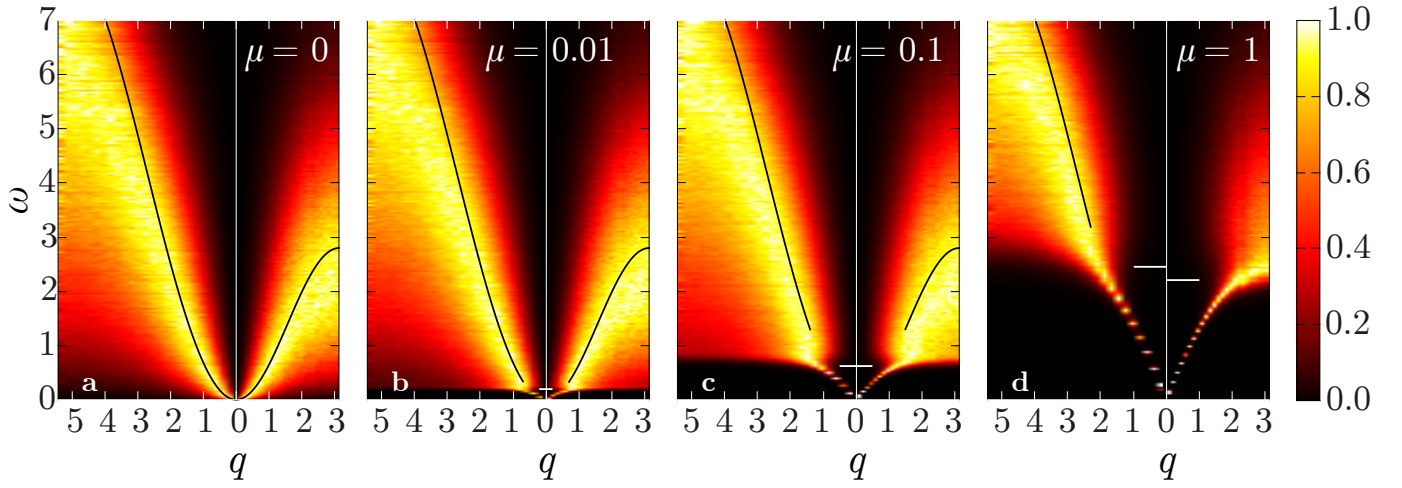
Если длина свободного пробега много больше длины волны, то акустические фононы являются хорошо определенными колебательными возбуждениями в виде плоских волн. В исследуемой системе это выполняется только для колебаний, частота которых  $\omega < \omega_{\max}$ . Для колебаний с частотами  $\omega \approx \omega_{\max}$  длина свободного пробега сопоставима с их длиной волны, поэтому начиная с этой частоты невозможно говорить о колебаниях, как о плоских волнах. Это так называемый критерий Иоффе-Регеля, который изначально был сформулирован для электронных возбуждений и означал их локализацию. Отличительной особенностью колебаний является то, что между критерием Иоффе-Регеля ( $\omega_{\text{IR}} \approx \omega_{\max} \propto \sqrt{\mu}$ ) и порогом локализации ( $\omega_{\text{loc}} \approx 5.5\Omega$  для любых  $\mu$ ) существует большой диапазон частот, в котором колебания делокализованы, но не являются плоскими волнами.

В *разделе 2.3* показано, что такие колебания можно назвать диффузонами, которые были введены в работе [16]. Как известно, явление диффузии обычно имеет место для сохраняющихся во времени физических величин. В свободной замкнутой механической системе, мы имеем два интеграла движения: импульса и энергии. Таким образом, следует различать диффузию импульса и энергии.

В *подразделе 2.3.1* показано, что структурный фактор колебаний с частотами  $\omega > \omega_{\text{IR}}$  хорошо описывается диффузией смещений атомов. Диффузию смещений атомов можно представить в виде случайных блужданий некоторых гипотетических “частиц” по решетке, где каждая “частица” переносит порцию смещения, а полное число этих “частиц” сохраняется. В этом случае можно найти аналитический вид динамического структурного фактора [33]

$$S_{\text{rw}}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2\Gamma(\mathbf{q})}{\omega^2 + \Gamma^2(\mathbf{q})}, \quad \Gamma(\mathbf{q}) = D_{\text{rw}} Q^2(\mathbf{q}), \quad (13)$$





**Рис. 6.** Структурный фактор  $S(\mathbf{q}, \omega)$  при различных значениях параметра  $\mu$ . Расчет производился для системы из  $N = 50^3$  частиц с усреднением по 100 реализациям. Левая сторона на графиках соответствует направлению  $\mathbf{q} \parallel \langle 111 \rangle$ , правая —  $\mathbf{q} \parallel \langle 100 \rangle$ . Частота измеряется в единицах  $\Omega$ , волновой вектор — в единицах  $1/a_0$ . Горизонтальные белые линии соответствуют частоте Иоффе-Регеля  $\omega_{\text{IR}}$ . Для  $\mu = 1$  частота  $\omega_{\text{IR}}$  немного отличается для различных направлений волнового вектора  $\mathbf{q}$ . Черные линии — максимум структурного фактора случайных блужданий (16).

где  $D_{\text{rw}}$  — коэффициент диффузии случайных блужданий, а  $Q(\mathbf{q})$  отражает структуру решетки. Для рассматриваемой простой кубической решетки

$$Q(\mathbf{q}) = \frac{2}{a_0} \sqrt{\sin^2 \frac{q_x a_0}{2} + \sin^2 \frac{q_y a_0}{2} + \sin^2 \frac{q_z a_0}{2}}. \quad (14)$$

При  $q \ll 1/a_0$  мы переходим к континуальному пределу, в котором  $Q(\mathbf{q}) = q$  и структурный фактор имеет вид

$$S_{\text{rw}}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2D_{\text{rw}}q^2}{D_{\text{rw}}^2q^4 + \omega^2}, \quad (15)$$

который хорошо известен для диффузии в непрерывном пространстве [34, §89]. Заметим, что структурный фактор при  $\omega \neq 0$  имеет максимум по  $q$  при

$$\omega = \Gamma(\mathbf{q}) = D_{\text{rw}}Q^2(\mathbf{q}). \quad (16)$$

При  $q \ll 1/a_0$  ширина линии колебаний  $\Gamma(\mathbf{q}) \propto q^2$ , что было обнаружено во многих стеклах в экспериментах по неупругому рентгеновскому рассеянию (см. [17; 18] и ссылки в них).

Полные результаты расчета структурного фактора приведены на рис. 6. Видно, что при  $\mu > 0$  имеется две области: область  $\omega < \omega_{\text{IR}}$ , в которой отчетливо виден закон дисперсии  $\omega_{\mathbf{q}}$  и область  $\omega > \omega_{\text{IR}}$  в которой структурный фактор имеет широкий максимум. Таким образом мы окончательно убедились, что

частота Иоффе-Регеля соответствует границе между акустическими фононами и диффузонами. Черной линией на рис. 6 показан максимум структурного фактора случайных блужданий по решетке. Видно, что он хорошо совпадает с максимумом вычисленного структурного фактора (наиболее светлая область), кроме тех частот, которые близки к порогу локализации.

В подразделе 2.3.2 изучается коэффициент диффузии энергии колебаний  $D(\omega)$  двумя способами: с помощью исследования расплывания волнового пакета и методом Едвардса-Таулеса. Рис. 7 показывает, что зависимость  $D(\omega)$  имеет три ярко выраженные области: на низких частотах наблюдается резкий рост коэффициента диффузии с уменьшением частоты, затем — плато с примерно постоянным коэффициентом диффузии, затем — резкое падение коэффициента диффузии с ростом частоты. Эти три области соответствуют трем типам колебаний: акустические фононы, диффузоны и локализованные колебания.

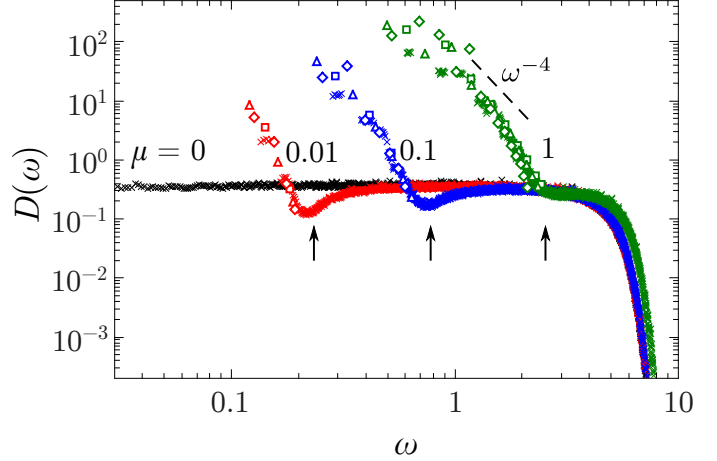
В области низкочастотных акустических фононов ( $\omega < \omega_{\text{IR}}$ ) коэффициент диффузии колебаний хорошо соответствует классической формуле

$$D(\omega) = \frac{1}{3}l(\omega)v_g(\omega). \quad (17)$$

В разделе 2.4 найдено асимптотическое поведение теплопроводности. В предыдущих разделах было показано, что плотность состояний  $g(\omega)$  и коэффициент диффузии  $D(\omega)$  примерно постоянны в широком диапазоне частот. Тогда теплопроводность имеет следующее асимптотическое поведение в зависимости от температуры:

$$\kappa(T) \sim \frac{k_B^2 T}{\hbar a_0}, \quad k_B T \lesssim \hbar \Omega. \quad (18)$$

$$\kappa(T) \sim \frac{k_B \Omega}{a_0}, \quad k_B T \gtrsim \hbar \Omega. \quad (19)$$



**Рис. 7.** Зависимость коэффициента диффузии от частоты для различных значений параметра  $\mu$  для системы из  $N = 14^3$  частиц по методу Едвардса-Таулеса. Открытые символы соответствуют расчету коэффициента диффузии для акустических фононов по формуле (17). Стрелки — положение максимума плотности состояний  $\omega_{\text{max}}$ . Частота измеряется в единицах  $\Omega$ , коэффициент диффузии — в единицах  $\Omega a_0^2$ .



Уравнения (18) и (19) с  $a_0 = 3 \text{ \AA}$  и  $\hbar\Omega = 30 \text{ мэВ}$  имеют количественное согласие с экспериментальными данными теплопроводности аморфного  $\text{SiO}_2$  в диапазоне температур выше 20 К (линия  $\kappa \propto T$  на рис. 1). В пределе высоких температур, мы получаем экспериментальное значение  $\kappa \approx 2 \text{ Вт/(м}\cdot\text{К)}$ .

В разделе 2.5 собраны различные масштабные соотношения в рассмотренной модели в зависимости от параметра  $\mu$  и частоты  $\Omega$ .

### Глава 3. Применение теории случайных матриц к описанию колебаний в дисперсных средах

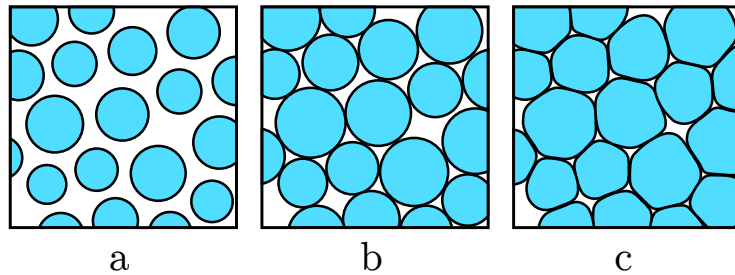
В данной главе рассмотрены колебательные свойства дисперсных сред. Результаты данной главы опубликованы в работе [A6].

В разделе 3.1 описана широко используемая модель дисперсной среды [25; 35]. В некотором объеме имеется  $N$  упругих сферических частиц (рис. 8). Трение между частицами отсутствует, а отталкивающий потенциал взаимодействия каждой пары касающихся друг друга частиц имеет вид

$$\begin{aligned} U(r_{ij}) &\propto (1 - r_{ij}/\sigma_{ij})^\gamma, & r_{ij} < \sigma_{ij}, \\ U(r_{ij}) &= 0, & r_{ij} > \sigma_{ij}. \end{aligned} \quad (20)$$

Здесь  $r_{ij}$  — расстояние между центрами частиц  $i$  и  $j$ , а  $\sigma_{ij}$  — сумма радиусов этих частиц. Если частицы не касаются друг друга ( $r_{ij} > \sigma_{ij}$ ), то они не взаимодействуют между собой. Показатель степени  $\gamma$  зависит от характера взаимодействия между частицами. Часто рассматривают гармонический потенциал ( $\gamma = 2$ ) или потенциал Герца ( $\gamma = 5/2$ ), который соответствует взаимодействию трехмерных однородных упругих шаров. Поскольку мы рассматриваем сферические частицы без трения, вращательные степени свободы отдельных частиц не задействованы.

Несмотря на кажущуюся простоту, такая модель позволяет описать очень важное явление в физике дисперсных сред: переход между податливым состоянием (свободные частицы) и твердым состоянием, которое может противодействовать



**Рис. 8.** Двумерная иллюстрация рассматриваемой модели дисперсной среды: а) свободные частицы  $\phi < \phi_c$ , б) критическое состояние  $\phi = \phi_c$ , в) твердая фаза  $\phi > \phi_c$  [36].

конечным внешним нагрузкам. В англоязычной литературе такой переход получил название *jamming transition* (от англ. traffic jam — пробка на дороге) [35]

Параметром данной системы является  $\phi$  — безразмерное отношение суммарного объема частиц ко всему доступному объему. Если  $\phi$  велико и больше некоторого критического значения  $\phi_c$ , то все частицы касаются друг друга и они вместе образуют твердое тело, которое может выдерживать конечные внешние нагрузки (рис. 8c). Для того, чтобы система не кристаллизовалась, берется смесь частиц немного разного размера. Если же  $\phi < \phi_c$ , то частицы перестают касаться друг друга и система ведет себя подобно газу (рис. 8a). При  $\phi = \phi_c$  все частицы касаются друг друга, но взаимодействие между ними практически отсутствует (рис. 8b).

В разделе 3.2 приведены различные масштабные соотношения в такой модели и показано, что они во многом повторяют свойства рассмотренных ранее неупорядоченных решеток.

В разделе 3.3 показано, что динамическая матрица может быть естественным образом разложена в виде  $M = AA^T$ . В данном случае матрица  $A$  является прямоугольной матрицей, где каждой строке соответствует некоторая степень свободы, а столбцу — упругое взаимодействие некоторой пары соседних частиц. Предполагая, что корреляции между элементами матрицы  $A$  менее существенны, чем корреляции, вносимые произведением  $AA^T$  можно определить плотность колебательных состояний с помощью теории случайных матриц. В данном случае плотность колебательных состояний будет описываться законом Марченко-Пастура [30]:

$$g(\omega) = \frac{1}{\pi\omega_0^2\omega} \sqrt{(\omega_+^2 - \omega^2)(\omega^2 - \omega_-^2)}, \quad \omega_- \leq \omega \leq \omega_+, \quad (21)$$

где частоты  $\omega_{\pm}$  зависят от отношения между числом упругих контактов  $K$  и числом степеней свободы  $N_f$

$$\omega_{\pm} = \omega_0 \left| \sqrt{\frac{K}{N_f} \pm 1} \right|, \quad \frac{K}{N_f} = \frac{z}{2d}, \quad (22)$$

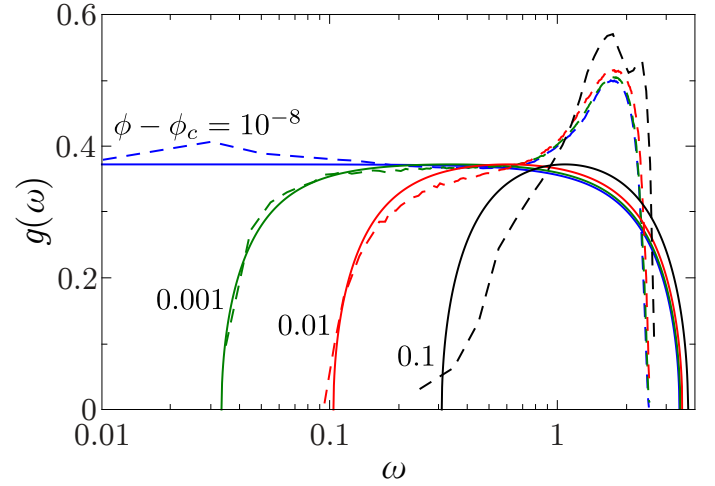
а частота  $\omega_0$  задает характерный масштаб частот в системе

$$\omega_0^2 = \frac{1}{K} \sum_{(ij)} k_{ij} \left( \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j} \right). \quad (23)$$

На рис. 9 приведено сравнение формулы (21) с плотностью колебательных состояний, полученной численно в работе [37] для упругих сфер с отталкивающим

потенциалом с  $\gamma = 2$ . В этом случае частота  $\omega_0$  остается постоянной и для сравнения с численным экспериментом использовалось значение  $\omega_0 = 1.71$  (в тех же единицах, что и в численном расчете).

Рассмотренный нами подход, основанный на теории случайных матриц, правильно предсказывает примерно постоянную плотность колебательных состояний от  $\omega_-$  вплоть до максимальных частот в системе и практически полное отсутствие колебательных мод при  $\omega < \omega_-$ . В реальной системе при  $\omega < \omega_-$  вместо строгой щели имеется некоторое количество колебательных состояний. Связано это в первую очередь с тем, что в рассмотренном выше подходе мы не учли наличие акустических фононов. Однако, как видно из численного эксперимента, количество акустических фононов быстро падает при приближении  $\phi$  к критическому значению  $\phi_c$ . Заметим, что значение  $\omega_0 = 1.71$  являлось единственным подгоночным параметром (единым, для всех кривых), которое одновременно дает правильное положение частот  $\omega_-$  и примерно постоянную плотность состояний  $g(\omega) \approx 2/\pi\omega_0 = 0.37$  в диапазоне  $\omega_- < \omega < \omega_+$ .



**Рис. 9.** Плотность колебательных состояний для 1024 сфер с отталкивающим потенциалом с  $\gamma = 2$  для разных плотностей заполнения  $\phi$ . Сплошными линиями показано предсказание теории случайных матриц, а штриховыми — численные данные из работы [37].

## Глава 4. Колебательные свойства аморфного кремния

В данной главе показано, что в таких материалах, как аморфный кремний свойства поперечных и продольных колебаний существенно отличаются, что приводит к таким особенностям, как, например, пик в коэффициенте диффузии энергии колебаний. Результаты данной главы опубликованы в работах [A7; A8].

В *разделе 4.1* описана численная модель аморфного кремния, учитывающая как парные взаимодействия атомов, так и тройные взаимодействия, которые характеризуют жесткость углов между химическими связями.

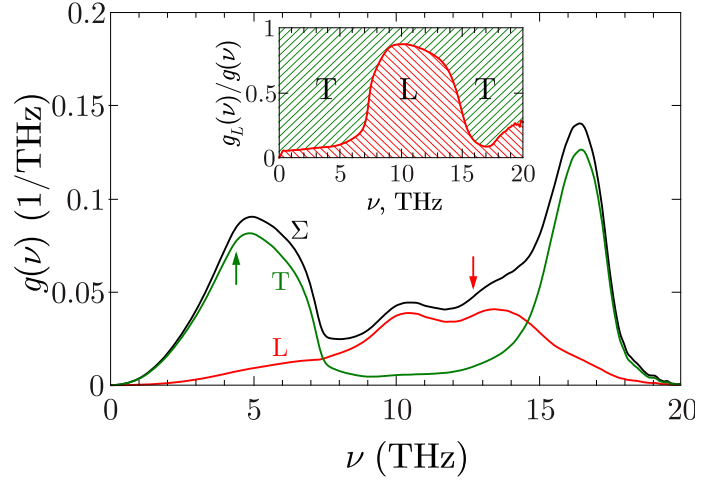
В *разделе 4.2* вычислена плотность колебательных состояний, а также ее поперечная и продольная компоненты. Собственные моды в аморфных телах плохо описываются волновым вектором, поэтому стандартное определение продольных и поперечных волн не применимо. Для обобщения этого определения заметим, что поперечные волны не изменяют локальный объем. Естественным

аналогом локального объема является объем ячеек Вороного, построенного вокруг атомов. Поэтому для любой собственной моды  $\mathbf{u}_i(\omega_j)$  можно найти компоненту  $\mathbf{u}_i^T(\omega_j)$ , которая не изменяет объемов ячеек Вороного и ортогональную ей компоненту  $\mathbf{u}_i^L(\omega_j)$  [A7; A8]. Тогда плотность колебательных состояний можно представить в виде  $g(\omega) = g_L(\omega) + g_T(\omega)$ , где

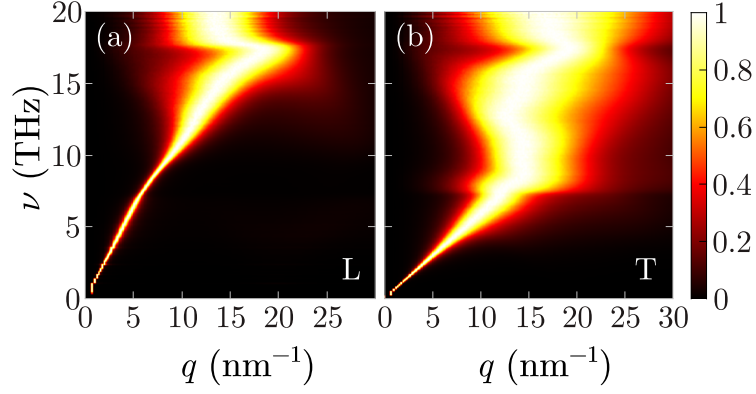
$$g_L(\omega) = \frac{1}{N_f} \sum_{j=1}^{N_f} \frac{\sum_i (u_i^L(\omega_j))^2}{\sum_i u_i^2(\omega_j)} \delta(\omega - \omega_j), \quad (24)$$

$$g_T(\omega) = \frac{1}{N_f} \sum_{j=1}^{N_f} \frac{\sum_i (u_i^T(\omega_j))^2}{\sum_i u_i^2(\omega_j)} \delta(\omega - \omega_j). \quad (25)$$

Отдельный вклад в плотность колебательных состояний от продольных и поперечных колебаний показан на рис. 10. В области низких частот (ниже 7 ТГц), доминируют поперечные моды. Тем не менее, при 7 ТГц происходит резкий переход от преимущественно поперечных мод к преимущественно продольным. Это соответствует максимальной частоте ТА фононов в кристаллическом кремнии (7.5 ТГц) [38]. Максимальная частота LA фононов существенно больше (11 ТГц) из-за большой разницы между объемным и сдвиговым модулями. В аморфном кремнии движение в противофазе соседних атомов подобно оптическим колебаниям в кристалле. Такие колебания формируют второй пик в плотности колебательных состояний. Таким образом, преобладание продольных мод между 7 ТГц и 15 ТГц в аморфном кремнии действительно соответствует щели между верхней частотой ТА фононов (7.5 ТГц) и нижней частотой ТО фононов (13.9 ТГц) в кристаллическом кремнии. Эта область частот в кристаллическом кремнии полностью занята LA и LO фононами (без зазора). В аморфном кремнии в той же области частот, колебания имеют небольшую поперечную составляющую (15–20%).



**Рис. 10.** Разложение полной колебательной плотности состояний ( $\Sigma$ ) на продольную (L) и поперечную (T) компоненты. Вертикальные стрелки показывают частоты Иоффе-Регеля для поперечных и продольных колебаний. Вставка: относительное число продольных мод  $g_L(\omega)/g(\omega)$  (линия между штрихованными областями). Относительное число поперечных мод  $g_T(\omega)/g(\omega) = 1 - g_L(\omega)/g(\omega)$  показано верхней штриховкой.



**Рис. 11.** Продольная (L) и поперечная (T) компоненты нормированного динамического структурного фактора в зависимости от волнового числа  $q$  и частоты  $\nu = \omega/2\pi$ .

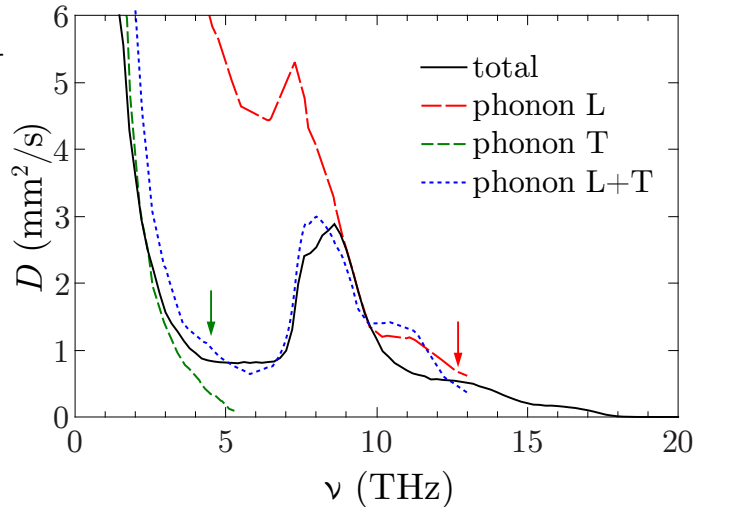
В *разделе 4.3* изучены степень делокализации и пространственная структура собственных мод в аморфном кремнии. Показано наличие мягких мод, которые содержат локальные участки с большой деформацией и характеризуются низким значением степени делокализации.

В *разделе 4.4* показаны результаты расчета динамического структурного фактора (рис. 11). С помощью динамического структурного фактора были определены законы дисперсии и длины свободного пробега фононов, а также частоты Иоффе-Регеля, которые существенно отличаются для поперечных колебаний (4.5 ТГц) и продольных колебаний (12.7 ТГц).

В *разделе 4.5* исследовано распространение квазимонохроматических волновых пакетов, позволяющее измерить коэффициент диффузии энергии колебаний. Результаты расчетов показывают значительный пик в коэффициенте диффузии (сплошная линия на рис. 12). Для объяснения этого явления, был найден коэффициент диффузии продольных и поперечных фононов ниже соответствующих критериев Иоффе-Регеля, используя соотношение

$$D_\eta(\omega) = \frac{1}{3} l_\eta(\omega) v_\eta(\omega), \quad \eta = L, T \quad (26)$$

На рис. 12 видно, что коэффициент диффузии продольных и поперечных фононов монотонно убывает с частотой, за исключением незначительного



**Рис. 12.** Коэффициент диффузии продольных фононов (L) и поперечных фононов (T). Пунктирная линия (L + T), показывает оценку фононного вклада в общий коэффициент диффузии по формуле (27). Сплошная черная линия показывает полный измеренный коэффициент диффузии. Вертикальные стрелки показывают поперечные и продольные частоты Иоффе-Регеля.

пика для продольных фононов. Выше критерия Иоффе-Регеля уравнение (26) неприменимо, но можно ожидать, что коэффициент диффузии постепенно убывает до 0, приближаясь к порогу подвижности. Таким образом, пик в коэффициенте диффузии не может быть объяснен отдельно взятыми коэффициентами диффузии продольных и поперечных фононов. Тем не менее, общий коэффициент диффузии зависит от соотношения плотности состояний продольных и поперечных колебаний

$$D(\omega) = \frac{g_L(\omega)}{g(\omega)} D_L(\omega) + \frac{g_T(\omega)}{g(\omega)} D_T(\omega). \quad (27)$$

Результирующий вклад фононов в коэффициент диффузии показан на рис. 12. Это показывает, что резкий подъем коэффициента диффузии при 7 ТГц в аморфном кремнии, соответствует резкому изменению характера колебаний от преимущественно поперечных к преимущественно продольным, которые обладают существенно большим коэффициентом диффузии.

## Заключение

В заключении приведены основные результаты работы:

- Была разработана модель сильно неупорядоченной системы с помощью метода случайных матриц. Данная модель имеет важное преимущество по сравнению с другими моделями: она описывает механические системы, которые всегда устойчивы независимо от степени беспорядка.
- Было показано, что делокализованные колебательные возбуждения в такой неупорядоченной системе могут быть двух типов. На низких частотах, ниже частоты Иоффе-Регеля  $\omega_{\text{IR}}$ , они являются обычными акустическими фононами (плоскими волнами), которые могут быть описаны частотой  $\omega$ , волновым вектором  $\mathbf{q}$  и некоторой конечной длиной свободного пробега  $l$ . С увеличением частоты длина свободного пробега быстро падает и на частоте  $\omega \approx \omega_{\text{IR}}$  длина свободного пробега  $l$  становится порядка длины волны  $\lambda$ .
- Структура колебаний на более высоких частотах становится отличной от плоских волн, хотя возбуждения остаются делокализованными. Статистика уровней описывается статистикой Вигнера-Дайсона, что подтверждает делокализацию колебательных возбуждений выше частоты Иоффе-Регеля.
- Делокализованные колебательные возбуждения выше частоты Иоффе-Регеля имеют диффузный характер. Они похожи на диффузоны, введенные в работе [16]. Диффузоны можно охарактеризовать частотой  $\omega$ , но

они не имеют определенного волнового вектора  $\mathbf{q}$ . Выше  $\omega \approx \omega_{\text{IR}}$  структурный фактор смещений частиц  $S(\mathbf{q}, \omega)$  практически совпадает с динамическим структурным фактором  $S_{\text{rw}}(\mathbf{q}, \omega)$  случайного блуждания на решетке, который имеет ширину колебательной линии  $\Gamma(q) \sim q^2$ . Такая квадратичная зависимость  $\Gamma(q)$  была найдена в экспериментах по неупругому рентгеновскому рассеянию в стеклах и долгое время не имела теоретического объяснения.

- Было показано, что в модели случайных матриц плотность колебательных состояний  $g(\omega)$  и коэффициент диффузии энергии колебаний  $D(\omega)$  приблизительно постоянны в широком диапазоне частот. Этому соответствует экспериментально наблюдаемая линейная зависимость теплопроводности от температуры  $\kappa(T) \propto T$ .
- Было показано, что динамическая матрица дисперсной системы может быть представлена в виде  $M = AA^T$ , где  $A$  представляет собой прямоугольную матрицу  $N_f \times K$ , где  $N_f$  — число степеней свободы, а  $K$  — число упругих контактов между частицами. Такое представление динамической матрицы позволяет использовать ансамбль Вишарта для определения плотности колебательных состояний. В этом случае единственным существенным параметром является отношение  $K/N_f$ , а плотность колебательных состояний примерно постоянна в широком диапазоне частот. Если общее число упругих контактов  $K$  отличается от общего числа степеней свободы  $N_f$ , то плотность колебательных состояний имеет щель на низких частотах, ширина которой пропорциональна  $K/N_f - 1$ . В численных экспериментах, эта щель в спектре колебаний не является строгой и содержит небольшое число фононов. Если  $K = N_f$ , то щель закрыта, и плотность колебательных состояний примерно постоянна, начиная с нулевой частоты.
- Было показано, что свойства поперечных и продольных колебаний в аморфном кремнии существенно отличаются. Это приводит к сложной структуре колебательного спектра. Низкочастотные колебания (до 7 ТГц) имеют доминирующий поперечный характер. В этой области частот находятся широкий бозонный пик (2–5 ТГц) и частота Иоффе-Регля для поперечных колебаний (4.5 ТГц). Колебания в диапазоне частот 4.5–7 ТГц имеют постоянный коэффициент диффузии и ширину линии  $\Gamma \sim q^2$ . Таким образом, в этом частотном диапазоне доминируют поперечные диффузоны. На частоте 7 ТГц происходит резкий переход от преимущественно поперечных колебаний к преимущественно продольным. При этом частота Иоффе-Регля для продольных колебаний значительно



больше (13 ТГц), что приводит к значительному пику в диффузивности на частоте около 8 ТГц.

## Список публикаций

- A1. *Бельтюков Я. М., Паршин Д. А.* Теория разреженных случайных матриц и колебательные спектры аморфных твердых тел // Физика твердого тела. — 2011. — Т. 53. — С. 142.
- A2. *Beltukov Y. M., Parshin D. A.* Density of states in random lattices with translational invariance // Письма в ЖЭТФ. — 2011. — Т. 93. — С. 660.
- A3. *Beltukov Y. M., Kozub V. I., Parshin D. A.* Diffusion of vibrations in disordered systems // Письма в ЖЭТФ. — 2013. — Т. 96. — С. 641.
- A4. *Beltukov Y. M., Kozub V. I., Parshin D. A.* Ioffe-Regel criterion and diffusion of vibrations in random lattices // Physical Review B. — 2013. — Vol. 87. — P. 134203.
- A5. *Beltukov Y. M., Kozub V. I., Parshin D. A.* Vibrations in amorphous solids beyond the Ioffe-Regel criterion // Journal of Physics: Conference Series. — 2013. — Vol. 461. — P. 012044.
- A6. *Бельтюков Я. М.* Random matrix theory approach to vibrations near the jamming transition // Письма в ЖЭТФ. — 2015. — Т. 101. — С. 377.
- A7. *Beltukov Y. M., Fusco C., Tanguy A., Parshin D. A.* Transverse and longitudinal vibrations in amorphous silicon // Journal of Physics: Conference Series. — 2015. — Vol. 661. — P. 012056.
- A8. *Beltukov Y. M., Fusco C., Parshin D. A., Tanguy A.* Boson peak and Ioffe-Regel criterion in amorphous silicon-like materials: the effect of bond directionality // Physical Review E. — 2016. — Vol. 93. — P. 023006.

## Литература

1. *Cahill D. G., Pohl R. O.* Thermal conductivity of amorphous solids above the plateau // Physical Review B. — 1987. — Vol. 35. — Pp. 4067–4073.
2. *Buchenau U., Galperin Y. M., Gurevich V. L., Parshin D. A., Ramos M. A., Schober H. R.* Interaction of soft modes and sound waves in glasses // Physical Review B. — 1992. — Vol. 46. — Pp. 2798–2808.



3. *Zeller R. C., Pohl R. O.* [Thermal conductivity and specific heat of noncrystalline solids](#) // *Physical Review B*. — 1971. — Vol. 4. — Pp. 2029–2041.
4. *Hunklinger S., Raychaudhuri A. K.* [Thermal and elastic anomalies in glasses at low temperatures](#) // *Progress in Low Temperature Physics*. Vol. 9 / ed. by D. F. Brewer. — Elsevier, 1986. — Pp. 265–344.
5. *Phillips W. A.* [Two-level states in glasses](#) // *Reports on Progress in Physics*. — 1987. — Vol. 50. — P. 1657.
6. *Паршин Д.* [Модель мягких потенциалов и универсальные свойства стекол \(Обзор\)](#) // *Физика твердого тела*. — 1994. — Т. 36. — С. 1809–1880.
7. *Cahill D. G., Pohl R. O.* [Lattice vibrations and heat transport in crystals and glasses](#) // *Annual Review of Physical Chemistry*. — 1988. — Vol. 39. — Pp. 93–121.
8. *Birch A. F., Clark H.* [The thermal conductivity of rocks and its dependence upon temperature and composition](#) // *American Journal of Science*. — 1940. — Vol. 238. — Pp. 529–558.
9. *Kittel C.* [Interpretation of the thermal conductivity of glasses](#) // *Physical Review*. — 1949. — Vol. 75. — P. 972.
10. *Graebner J. E., Golding B., Allen L. C.* [Phonon localization in glasses](#) // *Physical Review B*. — 1986. — Vol. 34. — P. 5696.
11. *Ioffe A. F., Regel A. R.* [Non-crystalline, amorphous and liquid electronic semiconductors](#) // *Progress in Semiconductors*. Vol. 4 / ed. by A. F. Gibson. — New York : Wiley, 1960. — Pp. 237–291.
12. *Taraskin S. N., Elliott S. R.* [Ioffe-Regel crossover for plane-wave vibrational excitations in vitreous silica](#) // *Physical Review B*. — 2000. — Vol. 61. — Pp. 12031–12037.
13. *Schober H. R.* [Vibrations and relaxations in a soft sphere glass: boson peak and structure factors](#) // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2004. — Vol. 16. — S2659.
14. *Schirmacher W., Diezemann G., Ganter C.* [Harmonic vibrational excitations in disordered solids and the “boson peak”](#) // *Physical Review Letters*. — 1998. — Vol. 81. — P. 136.
15. *Taraskin S. N., Elliott S. R.* [Vector vibrations and the Ioffe-Regel crossover in disordered lattices](#) // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2002. — Vol. 14. — P. 3143.

16. *Allen P. B., Feldman J. L., Fabian J., Wooten F.* [Diffusons, locons and propagons: character of atomic vibrations in amorphous Si](#) // Philosophical Magazine B. — 1999. — Vol. 79. — Pp. 1715–1731.
17. *Sette F., Krisch M. H., Masciovecchio C., Ruocco G., Monaco G.* [Dynamics of glasses and glass-forming liquids studied by inelastic X-ray scattering](#) // Science. — 1998. — Vol. 280. — Pp. 1550–1555.
18. *Ruocco G., Sette F.* [High-frequency vibrational dynamics in glasses](#) // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2001. — Vol. 13. — P. 9141.
19. *Christie J. K., Taraskin S. N., Elliott S. R.* [Vibrational behavior of a realistic amorphous-silicon model](#) // Journal of Non-Crystalline Solids. — 2007. — Vol. 353. — Pp. 2272–2279.
20. *Gurevich V. L., Parshin D. A., Pelous J., Schober H. R.* [Theory of low-energy Raman scattering in glasses](#) // Physical Review B. — 1993. — Vol. 48. — Pp. 16318–16331.
21. *Parshin D. A., Laermans C.* [Interaction of quasilocal harmonic modes and boson peak in glasses](#) // Physical Review B. — 2001. — Vol. 63. — P. 132203.
22. *Rufflé B., Guimbretière G., Courtens E., Vacher R., Monaco G.* [Glass-specific behavior in the damping of acoustic-like vibrations](#) // Physical Review Letters. — 2006. — Vol. 96. — P. 045502.
23. *Rufflé B., Parshin D. A., Courtens E., Vacher R.* [Boson peak and its relation to acoustic attenuation in glasses](#) // Physical Review Letters. — 2008. — Vol. 100. — P. 015501.
24. *Shintani H., Tanaka H.* [Universal link between the boson peak and transverse phonons in glass](#) // Nature Materials. — 2008. — Vol. 7. — Pp. 870–877.
25. *Liu A. J., Nagel S. R.* [Nonlinear dynamics: Jamming is not just cool any more](#) // Nature. — 1998. — Vol. 396. — Pp. 21–22.
26. *Xu N., Vitelli V., Wyart M., Liu A. J., Nagel S. R.* [Energy transport in jammed sphere packings](#) // Physical Review Letters. — 2009. — Vol. 102. — P. 038001.
27. *Vitelli V., Xu N., Wyart M., Liu A. J., Nagel S. R.* [Heat transport in model jammed solids](#) // Physical Review E. — 2010. — Vol. 81. — P. 021301.
28. *Weiß A., Wellein G., Alvermann A., Fehske H.* [The kernel polynomial method](#) // Reviews of Modern Physics. — 2006. — Vol. 78. — Pp. 275–306.

29. *Bhatia R.* Positive definite matrices. — Princeton : Princeton University Press, 2007. — 264 pp.
30. *Марченко В. А., Пастур Л. А.* Распределение собственных значений в некоторых ансамблях случайных матриц // Математический сборник. — 1967. — Т. 72. — С. 507–536.
31. *Haake F.* Quantum signatures of chaos. — 2nd. — Springer, 2001. — 479 pp.
32. *Forrester P. J., Witte N. S.* Exact Wigner surmise type evaluation of the spacing distribution in the bulk of the scaled random matrix ensembles // Letters in Mathematical Physics. — 2000. — Vol. 53. — Pp. 195–200.
33. *Kehr K. W., Mussawisade K., Schütz G. M., Wichmann T.* Diffusion of particles on lattices // Diffusion in condensed matter. Methods, materials, models / ed. by P. Heitjans, J. Kärger. — Heidelberg : Springer, 2005. — Pp. 745–792.
34. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Статистическая физика. Ч. 2. Т. 9. — 4-е. — М. : Наука, 2004. — 493 с. — (Теоретическая физика: учебное пособие в 10 т.)
35. *Liu A. J., Nagel S. R.* The Jamming Transition and the Marginally Jammed Solid // Annual Review of Condensed Matter Physics. — 2010. — Vol. 1. — Pp. 347–369.
36. *O’Hern C. S., Silbert L. E., Liu A. J., Nagel S. R.* Jamming at zero temperature and zero applied stress: The epitome of disorder // Phys. Rev. E. — 2003. — Vol. 68. — P. 011306.
37. *Wyart M., Silbert L. E., Nagel S. R., Witten T. A.* Effects of compression on the vibrational modes of marginally jammed solids // Phys. Rev. E. — 2005. — Vol. 72. — P. 051306.
38. *Tubino R.* Lattice dynamics and spectroscopic properties by a valence force potential of diamondlike crystals: C, Si, Ge, and Sn // J. Chem. Phys. — 1972. — Vol. 56. — P. 1022.