

# Теория разреженных случайных матриц и колебательные спектры аморфных твердых тел

© Я.М. Бельтюков, Д.А. Паршин

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,  
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: ybeltukov@gmail.com

(Поступила в Редакцию 11 мая 2010 г.)

Теория случайных матриц использована для анализа колебательного спектра аморфных твердых тел. Исследована случайная динамическая матрица  $M = AA^T$ , обладающая неотрицательными собственными значениями  $\varepsilon = \omega^2$ . Матрица  $A$  — произвольная квадратная ( $N \times N$ ), вещественная, разреженная случайная матрица с  $n$  ненулевыми элементами в каждой строке, со средними значениями  $\langle A_{ij} \rangle = 0$  и конечной дисперсией  $\langle A_{ij}^2 \rangle = V^2$ . Показано, что плотность колебательных состояний  $g(\omega)$  такой матрицы при  $N, n \gg 1$  описывается вignerовской четвертью окружности, радиус которой не зависит от  $N$ . При  $n \ll N$  такое представление динамической матрицы  $M = AA^T$  позволяет в ряде случаев адекватно описать взаимодействие атомов в аморфных твердых телах. Статистика уровней (собственных частот) матрицы  $M$  хорошо описывается формулой Вигнера и свидетельствует о расталкивании колебательных термов. Степень делокализации колебательных мод составляет около 0.2–0.3 практически во всем диапазоне частот. Выводы находятся в качественном, а зачастую и в количественном согласии с результатами численных расчетов реальных аморфных систем, выполненных с помощью методов молекулярной динамики.

Работа поддержана грантом Мэрии Санкт-Петербурга (дипломный проект № 2.4/04-05/103).

## 1. Введение

Одной из центральных задач физики неупорядоченных систем в настоящее время является поиск общих закономерностей колебательных свойств аморфных твердых тел (стекол). При достаточно низких частотах  $\omega$  в стеклах имеются обычные звуковые возбуждения, плоские волны (фононы — продольный и поперечный звук), которые характеризуются волновым вектором  $\mathbf{k}$ . Это делокализованные возбуждения. Их плотность состояний (в трехмерном пространстве)  $g_{\text{ph}}(\omega) \propto \omega^2$ .

Согласно последним исследованиям, в низкочастотной области спектра в стеклах помимо фононов имеются еще квазилокальные колебательные моды [1]. Их плотность состояний  $g_{\text{qlv}}(\omega)$  является универсальной функцией  $\omega$ . При малых частотах ниже некоторой характерной частоты  $\omega_b$  функция  $g_{\text{qlv}} \propto \omega^4$ , а при  $\omega > \omega_b$  —  $g_{\text{qlv}}(\omega) \propto \omega$ . В результате приведенная плотность состояний  $g_{\text{qlv}}(\omega)/\omega^2$  имеет широкий максимум при частоте  $\omega \simeq \omega_b$ . Это так называемый бозонный пик, который наблюдается в эксперименте практически во всех стеклах. Его теория была построена в работах [1,2].

Однако область бозонного пика в стеклах занимает лишь около 10% от всего колебательного спектра. При более высоких частотах, например, в аморфном  $\text{SiO}_2$  плотность колебательных состояний  $g(\omega)$  выходит примерно на константу, которая простирается вплоть до максимальных частот — порядка дебаевской  $\omega_D$  [3]. Примерно такой же вид имеет плотность состояний в модельном стекле типа мягких сфер [4] и в аморфном Se [5]. В других стеклах плотность состояний имеет

широкий максимум вблизи  $\omega_D$  и затем спадает до нуля [6–9].

Природа этих более высокочастотных колебательных возбуждений, занимающих доминирующую часть спектра, до настоящего времени практически не исследована и подвергается интенсивному обсуждению в литературе [10,11]. Главный вопрос здесь — являются ли эти колебания плоскими волнами (фононами) и, если они не плоские волны, можно ли их считать локализованными или делокализованными возбуждениями. Решение этого принципиального вопроса очень важно, например, для выяснения природы теплопроводности аморфных диэлектриков в этой области частот и температур.

Так, численные исследования аморфного кремния показали [11], что самые низкочастотные колебания (первые 4% колебательных мод) — плоские волны (фононы), а самые высокочастотные (последние 3% всех мод) — локализованы. Остаток — большая часть колебательных мод (около 90%) — не является ни плоскими волнами, ни локализованными колебаниями. Они представляют собой делокализованные колебательные возбуждения. Поэтому авторы работы [11] назвали их диффузонами, имея в виду то, что энергия этих колебаний распространяется в пространстве посредством диффузии (от атома к атому). Делокализованной является большая часть колебательных мод во всех исследованных методами молекулярной динамики стеклах [3–9].

Одна из целей настоящей работы заключается в попытке ответить на вопрос, что представляют собой колебания в неупорядоченных системах и, в частности, диффузоны, используя методы теории случайных матриц. Считается, что динамическая колебательная матрица

ца является симметричной случайной матрицей самого общего вида, обладающей положительными собственными значениями. Свойства таких случайных матриц будут достаточно универсальными, не зависящими от специфики конкретной системы. Ряд этих свойств может совпасть с теми, которые имеют место в реальных стеках.

В настоящей работе мы ограничимся неупорядоченными системами, в которых отсутствуют делокализованные низкочастотные возбуждения в виде плоских волн (фононов). Поэтому если колебательные моды в нашей задаче окажутся делокализованными, к фононам это не будет иметь никакого отношения. Для существования фононов необходим некий „порядок“ в неупорядоченной системе. Их мы собираемся рассмотреть в отдельной работе.

## 2. Описание колебаний случайными матрицами

Уравнения движения (скалярная модель) механической колебательной системы в гармоническом приближении можно записать в виде [12]

$$m_i \omega^2 u_i = \sum_{j=1}^N \Phi_{ij} u_j, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (1)$$

где  $u_i$  и  $m_i$  — смещения и массы атомов соответственно,  $\Phi_{ij}$  — матрица силовых констант (вещественная, симметричная, положительно определенная матрица). Перейдем, как обычно, к новым переменным, нормированным на массу,

$$q_i = u_i \sqrt{m_i}, \quad M_{ij} = \Phi_{ij} / \sqrt{m_i m_j}. \quad (2)$$

Матрица  $M$ , называемая динамической матрицей, так же как и матрица силовых констант  $\Phi$ , — вещественная, симметричная и положительно определенная. В новых переменных мы получаем систему уравнений

$$\omega^2 q_i = \sum_{j=1}^N M_{ij} q_j, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (3)$$

При некоторых значениях  $\varepsilon = \omega^2$ , являющихся собственными числами динамической матрицы  $M$ , система уравнений (3) будет иметь нетривиальные решения. При этом  $\omega$  будет частотой соответствующей колебательной моды системы.

Для описания колебаний аморфных твердых тел нами были применены методы теории случайных матриц. На первый взгляд это представляет собой сложную математическую задачу. Далеко не всякая случайная симметричная матрица подходит для описания колебаний. Связано это с тем, что динамическая матрица  $M$  должна быть еще и положительно определенной (что соответствует устойчивости механической системы). А из-за этого ее элементы должны быть сложным образом

коррелированы друг с другом и поэтому не могут быть заданы как независимые случайные числа. Эта проблема была решена с помощью следующего математического приема.

Любую такую матрицу  $M$  (вещественную, симметричную и положительно определенную) всегда можно представить в виде [13]

$$M = AA^T, \quad (4)$$

где  $A$  — некоторая вещественная (не обязательно симметричная) матрица общего вида. И наоборот, для любой вещественной матрицы  $A$  произведение  $AA^T$  является положительно определенной симметричной матрицей [13]. Можно предположить, что в аморфных телах (в некотором диапазоне частот) квадраты частот  $\varepsilon = \omega^2$  — собственные числа матрицы  $AA^T$ , где матрица  $A$  выбирается некоторым случайным образом.

Распределение собственных чисел матрицы  $M = AA^T$  для некоторого класса случайных матриц было впервые получено в работе [14]. Оно затем исследовалось в теории финансовых рынков [15], случайных сетей [16] и беспроводной связи [17]. Применительно к колебаниям в неупорядоченных системах этот подход использовался в работе [18]. В работах [15–17] в основном исследовался случай, когда матрица  $A$  — произвольная случайная матрица с независимыми элементами, которые обладают нулевым средним  $\langle A_{ij} \rangle = 0$  и одинаковой дисперсией  $\langle A_{ij}^2 \rangle = V^2$  (так называемый ансамбль Вишарта [19]).

В этих работах было показано, что для вещественной квадратной матрицы  $A$  размером  $N \times N$  при  $N \gg 1$  распределение частот  $\omega$  (квадратных корней из собственных чисел  $\varepsilon$  матрицы  $M = AA^T$ ) описывается законом четверти окружности

$$g(\omega) = \frac{1}{\pi V^2} \sqrt{4NV^2 - \omega^2}, \quad 0 < \omega < 2V\sqrt{N}. \quad (5)$$

Это совпадает с аналогичным результатом Вигнера [20] для распределения  $g(\varepsilon)$  собственных значений  $\varepsilon$  симметричной случайной матрицы  $H$  произвольного вида с независимыми случайными элементами  $\langle H_{ij} \rangle = 0$  и одинаковой дисперсией  $\langle H_{ij}^2 \rangle = V^2$ . В этом случае формула (5) с дополнительным коэффициентом 1/2 и с заменой  $\omega$  на  $\varepsilon$  справедлива в диапазоне значений  $-2V\sqrt{N} < \varepsilon < 2V\sqrt{N}$ .

В модели случайной среды, описываемой ансамблем Вишарта, каждый из элементов  $M_{ij}$  динамической матрицы  $M$ , вообще говоря, отличен от нуля

$$M_{ij} = \sum_k A_{ik} A_{jk}. \quad (6)$$

Это очевидно отвечает случаю дальнего действия, когда каждый атом в системе случайными силами связан с каждым. Но такая модель, на наш взгляд, не совсем оправдана с физической точки зрения. В аморфных телах упругими силами связаны обычно только близко расположенные атомы. Поэтому более реалистичной

нам представляется ситуация, когда число ненулевых элементов  $m$  в каждой строке матрицы  $M$  мало по сравнению с  $N$  и не зависит от  $N$ . Таким образом, матрица  $M$  является разреженной. В пределе  $N \rightarrow \infty$  — сильно разреженной. Обычно такие сильно разреженные матрицы и возникают в компьютерных расчетах колебаний атомов в аморфных твердых телах (и в жидкостях). Так, например, в случае ближнего порядка для геометрии простой кубической решетки с учетом взаимодействия только ближайших соседей и векторного характера колебаний (в трехмерном пространстве)  $m = 18 + 3 = 21$ . Для объемно центрированной решетки  $m = 24 + 18 + 3 = 45$ , для гранецентрированной  $m = 36 + 18 + 3 = 57$ . В двух последних случаях мы учли все взаимодействия в первой и второй координационной сферах.

Поэтому наиболее адекватным нашей задаче нам представляется случай сильно разреженной матрицы  $A$ , у которой в каждой строке имеется всего  $n$  ненулевых элементов, причем  $n \ll N$ . Тогда у матрицы  $M$  в каждой строке будет в среднем  $m = n^2$  ненулевых элементов. Если  $n^2 \ll N$ , то это отвечает и случаю сильно разреженной матрицы  $M$ . Далее показано, что в этом случае при  $n \gg 1$  плотность состояний тоже имеет форму четверти окружности

$$g(\omega) = \frac{N}{\pi n V^2} \sqrt{4nV^2 - \omega^2}, \quad 0 < \omega < 2V\sqrt{n}, \quad (7)$$

радиус которой, однако, теперь не зависит от  $N$ . Вывод формул (5) и (7) приведен ниже целиком, поскольку в таком виде (и применительно к задаче о колебаниях) он в литературе отсутствует. Вывод, который приведен в [14], является математически достаточно сложным.

### 3. Закон четверти окружности

Будем считать  $A$  случайной квадратной матрицей общего вида (не обязательно симметричной) с независимыми элементами  $A_{ij}$ , такой, что ее размер  $N \gg 1$  и для любых  $i, j$

$$\langle A_{ij} \rangle = 0, \quad \langle A_{ij}^2 \rangle = V^2. \quad (8)$$

Найдем плотность распределения собственных чисел матрицы  $M = AA^T$ . При этом будем использовать метод, похожий на вывод плотности распределения собственных значений случайной симметричной матрицы [21].

Зафиксируем матрицу  $A$  и будем добавлять к ней независимую случайную малую добавку  $\delta A$ , такую, что все ее матричные элементы независимы и для любых  $i, j$ ,

$$\langle \delta A_{ij} \rangle = 0, \quad \langle \delta A_{ij}^2 \rangle = v^2, \quad (9)$$

причем  $v \ll V$ . Тогда матрица  $M$  изменится на

$$\delta M = (A + \delta A)(A + \delta A)^T - M = \delta A A^T + A \delta A^T + \delta A \delta A^T. \quad (10)$$

Пусть  $U$  — ортогональная матрица, приводящая  $M$  к диагональному виду. Определим новую матрицу  $\delta \tilde{M}$

$$\delta \tilde{M} = U^{-1} \delta M U. \quad (11)$$

Согласно теории возмущений, изменение в одном собственном числе матрицы  $M$  (за счет добавления к ней матрицы  $\delta M$ ) равно

$$\delta \varepsilon(\varepsilon_i, V^2) = \delta \tilde{M}_{ii} + \sum_{j \neq i} \frac{\delta \tilde{M}_{ij}^2}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} + \dots, \quad (12)$$

где  $\varepsilon_i$  —  $i$ -е собственное число матрицы  $M$ .

Усредним это равенство по матрице  $\delta A$ . При этом матрица  $A$  будет фиксирована, а следовательно,  $U, M$  и собственные числа  $\varepsilon_i$  тоже будут фиксированы. Для этого вычислим среднее значение и дисперсию элементов матрицы  $\delta \tilde{M}$ . Среднее значение диагональных элементов

$$\langle \delta \tilde{M}_{ii} \rangle = \left\langle \sum_{klm} U_{ki} U_{li} (A_{km} \delta A_{lm} + \delta A_{km} A_{lm} + \delta A_{km} \delta A_{lm}) \right\rangle. \quad (13)$$

Первое и второе слагаемое в скобках в среднем равны нулю. Третье слагаемое при  $k \neq l$  в среднем тоже равно нулю, но при  $k = l$  оно дает  $v^2$ . В результате получаем

$$\langle \delta \tilde{M}_{ii} \rangle = \sum_{km} U_{ki}^2 \langle \delta A_{km}^2 \rangle = v^2 \sum_{km} U_{ki}^2 = v^2 N. \quad (14)$$

В последнем равенстве была использована ортогональность матрицы  $U$ .

Дисперсия недиагональных элементов ( $i \neq j$ )

$$\langle \delta \tilde{M}_{ij}^2 \rangle = \left\langle \left( \sum_{klm} U_{ki} U_{lj} (A_{km} \delta A_{lm} + \delta A_{km} A_{lm} + \delta A_{km} \delta A_{lm}) \right)^2 \right\rangle. \quad (15)$$

Пренебрежем последним слагаемым в скобках, потому что оно дает следующий порядок малости, а вклад от первых двух будет отличен от нуля

$$\begin{aligned} \langle \delta \tilde{M}_{ij}^2 \rangle &= \left\langle \left( \sum_{klm} U_{ki} U_{lj} A_{km} \delta A_{lm} \right)^2 \right\rangle \\ &+ \left\langle \left( \sum_{klm} U_{ki} U_{lj} \delta A_{km} A_{lm} \right)^2 \right\rangle \\ &+ 2 \left\langle \sum_{klm} U_{ki} U_{lj} A_{km} \delta A_{lm} \sum_{klm} U_{ki} U_{lj} \delta A_{km} A_{lm} \right\rangle. \quad (16) \end{aligned}$$

В первом слагаемом раскроем квадрат. Ненулевой вклад будут давать только те слагаемые, в которых стоит произведение одних и тех же элементов матрицы  $\delta A$ . При этом их среднее будет равно  $v^2$

$$\left\langle \left( \sum_{klm} U_{ki} U_{lj} A_{km} \delta A_{lm} \right)^2 \right\rangle = \sum_{k_1 k_2 l m} U_{k_1 i} U_{k_2 i} U_{l j}^2 A_{k_1 m} A_{k_2 m} v^2. \quad (17)$$

Сумма по  $l$  от  $U_{lj}^2$  дает 1 из-за ортогональности  $U$ . Оставшееся является диагональным элементом ( $ii$ ) матрицы  $U^{-1}AA^T U$ , а это есть собственное число  $\varepsilon_i$ . Поэтому первое слагаемое в (16) равно  $v^2\varepsilon_i$ . Переобозначением индексов аналогично получаем, что второе слагаемое в (16) равно  $v^2\varepsilon_j$ . Из-за ортогональности матрицы  $U$  третье слагаемое равно нулю. В результате получаем

$$\langle \delta M_{ij}^2 \rangle = v^2(\varepsilon_i + \varepsilon_j). \quad (18)$$

Подставим (14) и (18) в правую часть (12). В результате среднее значение поправки к собственному значению равно

$$\delta\varepsilon(\varepsilon_i, V^2) = v^2N + v^2 \sum_{j \neq i} \frac{\varepsilon_i + \varepsilon_j}{\varepsilon_i - \varepsilon_j}. \quad (19)$$

Используя, что  $N \gg 1$ , занесем первое слагаемое в сумму

$$\delta\varepsilon(\varepsilon_i, V^2) = 2v^2\varepsilon_i \sum_{j \neq i} \frac{1}{\varepsilon_i - \varepsilon_j}. \quad (20)$$

При  $N \gg 1$  будем считать плотность распределения  $\sigma(\varepsilon, V^2)$  собственных чисел матрицы  $M$  непрерывной функцией  $\varepsilon$ . Тогда сумму (20) можно записать в виде главного значения интеграла

$$\delta\varepsilon(\varepsilon, V^2) = 2v^2\varepsilon \int \frac{\sigma(\varepsilon', V^2)}{\varepsilon - \varepsilon'} d\varepsilon'. \quad (21)$$

Рассмотрим теперь изменение количества собственных чисел матрицы  $M$  на интервале  $(\varepsilon, \varepsilon + \Delta\varepsilon)$ . С одной стороны, это изменение равно

$$\begin{aligned} \sigma(\varepsilon, V^2)\delta\varepsilon(\varepsilon, V^2) - \sigma(\varepsilon + \Delta\varepsilon, V^2)\delta\varepsilon(\varepsilon + \Delta\varepsilon, V^2) \\ \approx -\frac{\partial(\sigma\delta\varepsilon)}{\partial\varepsilon} \Delta\varepsilon. \end{aligned} \quad (22)$$

С другой стороны, поскольку мы к  $A$  добавили независимую случайную матрицу  $\delta A$ , дисперсия элементов новой матрицы увеличилась с  $V^2$  до  $V^2 + v^2$ . Поэтому изменение количества собственных чисел на интервале  $(\varepsilon, \varepsilon + \Delta\varepsilon)$  будет равно

$$\sigma(\varepsilon, V^2 + v^2)\Delta\varepsilon - \sigma(\varepsilon, V^2)\Delta\varepsilon \approx v^2 \frac{\partial\sigma}{\partial(V^2)} \Delta\varepsilon. \quad (23)$$

Приравнявая (22) и (23), получаем второе уравнение

$$-\frac{\partial(\sigma\delta\varepsilon)}{\partial\varepsilon} = v^2 \frac{\partial\sigma}{\partial(V^2)}. \quad (24)$$

Для решения системы двух уравнений (21) и (24) введем новую переменную  $x = \varepsilon/V^2$ . Собственные числа матрицы  $M$  пропорциональны  $V^2$ , поэтому для каждого из них величина  $x = \varepsilon/V^2$  не изменяется при домножении всех элементов матрицы  $A$  на константу. Из условия нормировки плотность распределения собственных

чисел будет меняться как  $1/V^2$ . Поэтому переменные в плотности распределения разделяются

$$\sigma(\varepsilon, V^2) = \frac{1}{V^2} \tilde{\sigma}(x), \quad (25)$$

где  $\tilde{\sigma}(x)$  — некоторая функция  $x$ . Используя это, из (21) получаем, что для  $\delta\varepsilon$  переменные тоже разделяются

$$\delta\varepsilon(\varepsilon, V^2) = v^2 \tilde{\delta\varepsilon}(x). \quad (26)$$

И уравнение (21) преобразуется следующим образом:

$$\tilde{\delta\varepsilon}(x) = 2x \int \frac{\tilde{\sigma}(x')}{x - x'} dx'. \quad (27)$$

Подставляя (25) и (26) в (24), получаем дифференциальное уравнение с одной переменной

$$\frac{\partial(\tilde{\sigma}\tilde{\delta\varepsilon})}{\partial x} = \frac{\partial(x\tilde{\sigma})}{\partial x}. \quad (28)$$

Из (27) видно, что  $\tilde{\delta\varepsilon}(0) = 0$ , поэтому после интегрирования (28) получаем

$$\tilde{\delta\varepsilon}(x) = x. \quad (29)$$

Окончательно из (27) получаем интегральное уравнение

$$\int \frac{\tilde{\sigma}(x')}{x - x'} dx' = \frac{1}{2}. \quad (30)$$

Условие нормировки

$$\int \sigma(\varepsilon, V^2) d\varepsilon = \int \tilde{\sigma}(x) dx = N. \quad (31)$$

Решение уравнения (30), удовлетворяющее (31), имеет вид

$$\tilde{\sigma}(x) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{4N - x}{x}}, \quad 0 < x < 4N. \quad (32)$$

Переходя к начальным обозначениям, получаем распределение собственных чисел матрицы  $M$

$$\sigma(\varepsilon, V^2) = \frac{1}{2\pi V^2} \sqrt{\frac{4NV^2 - \varepsilon}{\varepsilon}}, \quad 0 < \varepsilon < 4NV^2. \quad (33)$$

Такое распределение является частным случаем распределения Марченко–Пастура [14,17]. Учитывая, что  $\varepsilon = \omega^2$ , для плотности колебательных состояний получаем

$$g(\omega) = \frac{1}{\pi V^2} \sqrt{4NV^2 - \omega^2}, \quad 0 < \omega < 2V\sqrt{N}. \quad (34)$$

Эта зависимость имеет вид четверти окружности.

Как уже указывалось, такая модель с дальновидствием не совсем оправдана с физической точки зрения. С одной стороны, это означает взаимодействие каждого атома с каждым. С другой — зависимость ширины спектра от размеров системы (числа  $N$ ). В следующем разделе рассмотрим разреженную случайную матрицу, что позволит преодолеть эти два ограничения.

#### 4. Разреженная случайная матрица

Рассмотрим разреженную случайную матрицу  $A$ . Теперь в каждой строке  $i$  случайным образом выбираем  $n$  позиций  $j$  и только в них записываем случайные числа  $a_{ij}$  с одной и той же плотностью вероятности  $\rho_0(a_{ij})$ , а во все остальные позиции записываем нули. У ненулевых элементов, как и раньше, среднее  $\langle a_{ij} \rangle = 0$  и дисперсия  $\langle a_{ij}^2 \rangle = V^2$ . Пример такой разреженной матрицы  $A$  ( $8 \times 8$ ) и  $n = 3$  показан ниже

$$A = \begin{pmatrix} 0 & * & 0 & 0 & * & 0 & * & 0 \\ * & * & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & * & 0 & * & 0 & * & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & * & 0 & 0 & * & * & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (35)$$

Звездочки в этой матрице обозначают случайные ненулевые элементы.

Элементы такой матрицы попарно независимы, и распределение каждого из них описывается плотностью вероятности

$$\rho(x) = \frac{n}{N} \rho_0(x) + \frac{N-n}{N} \delta(x), \quad (36)$$

где  $\delta(x)$  — дельта-функция Дирака. Дисперсия такого распределения

$$\langle A_{ij}^2 \rangle = \int x^2 \rho(x) dx = \frac{n}{N} \int x^2 \rho_0(x) dx = \frac{n}{N} V^2, \quad (37)$$

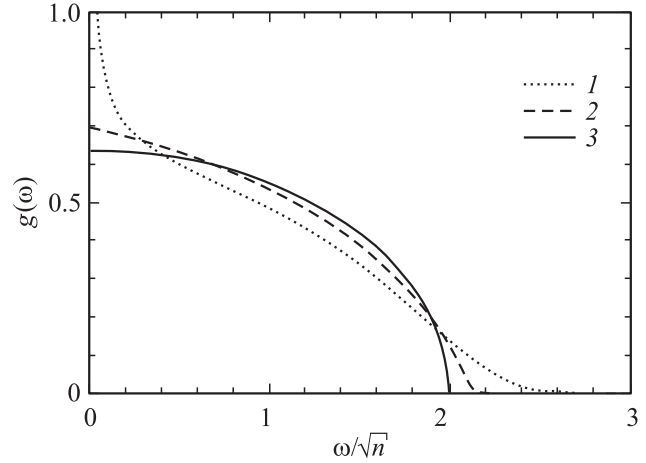
где усреднение производится как по ненулевым, так и по нулевым элементам матрицы  $A$ .

При значениях  $n \gg 1$  мы можем применить уже полученный результат четверти окружности (34), если вместо дисперсии  $V^2$  подставим в эту формулу дисперсию  $nV^2/N$

$$g(\omega) = \frac{N}{\pi n V^2} \sqrt{4nV^2 - \omega^2}, \quad 0 < \omega < 2V\sqrt{n}. \quad (38)$$

При этом мы можем взять  $n \ll N$ . Это означает, что при  $n \gg 1$  вид распределения в виде четверти окружности для плотности состояний  $g(\omega)$  сохраняется даже в том случае, когда ненулевые элементы составляют лишь малую часть всей матрицы  $A$ . Этот вид в нашей модели является универсальным законом и не зависит ни от вида плотности распределения  $\rho_0(a_{ij})$ , ни от размера  $N$ , ни от числа ненулевых элементов  $n$  при достаточно больших значениях  $n$ .

Численный анализ подтверждает, что с ростом  $n$  (при  $n \gg 1$ ) плотность состояний  $g(\omega)$  действительно стремится к четверти окружности, и при этом возможно соотношение  $n \ll N$  (рис. 1). При малых значениях  $n$  (меньших 10) и больших  $N$  получаем плотность колебательных состояний, лишь немного отличающуюся от четверти окружности. При этом нормированный на единицу колебательный спектр действительно не зависит от размера системы  $N$ .



**Рис. 1.** Численные расчеты плотности состояний  $g(\omega)$  матрицы  $M = AA^T$  при значениях  $n = 5$  (1) и 20 (2). 3 — плотность состояний, описываемая формулой (38). Распределение  $\rho_0(a_{ij})$  матричных элементов случайной матрицы  $A$  нормальное гауссово с  $\langle a_{ij} \rangle = 0$  и дисперсией  $\langle a_{ij}^2 \rangle = 1$ . Размер матрицы  $N = 1000$ .

Для такой разреженной матрицы  $A$  с  $n$  ненулевыми элементами в каждой строке у матрицы  $M$  в каждой строке и в каждом столбце будет в среднем  $n^2$  ненулевых значений (матрица  $M$  — симметричная). Это означает физически, что один атом взаимодействует примерно с  $n^2$  близкими атомами. Возможность взять фиксированное значение  $n$  и устремить  $N \rightarrow \infty$  позволяет описать взаимодействие между близкими атомами в аморфных телах, что оправдывается с физической точки зрения.

Из формулы (38) можно получить распределение  $p(\varepsilon)$  для собственных значений  $\varepsilon = \omega^2$  матрицы  $M = AA^T$

$$p(\varepsilon) = \frac{N}{2\pi n V^2} \sqrt{\frac{4nV^2 - \varepsilon}{\varepsilon}}. \quad (39)$$

Как следует из этого выражения, оно обладает сингулярностью при  $\varepsilon \rightarrow 0$  ( $p(\varepsilon) \propto 1/\sqrt{\varepsilon}$ ). Похоже, что именно эта сингулярность в распределении собственных значений динамической матрицы наблюдалась в работе [22] в аморфной и жидкой фазах  $\text{SiO}_2$ , но была (на наш взгляд неоправданно) отнесена на счет специальных корреляций между диагональными элементами динамической матрицы. Схожее поведение при  $\varepsilon \rightarrow 0$  имеет распределение собственных значений, полученное в работе [23] (рис. 2).

Отметим в заключение этого раздела также сингулярность в плотности состояний  $g(\omega)$  при  $\omega \rightarrow 0$ , которая появляется при малых значениях  $n$  (рис. 1 при  $n = 5$ ). Такая сингулярность существует и в плотности собственных значений  $g(\varepsilon)$  (при  $\varepsilon \rightarrow 0$ ) разреженной симметричной случайной матрицы  $H_{ij}$  при малых значениях  $n$ , она исчезает при увеличении  $n$ , когда  $g(\varepsilon)$  принимает форму вигнеровской полуокружности [24–27]. В свете того что она впервые была обнаружена в плотности колебательных состояний неупорядоченной

одномерной цепочки в работе [24], ее иногда называют сингулярностью Дайсона. Считается, что она является признаком сильных флуктуаций в случайной среде и связанной с этим локализации мод [27]. Этот вопрос мы надеемся подробнее рассмотреть в отдельной работе.

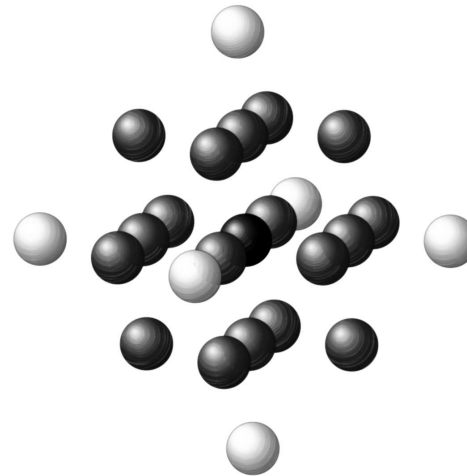
## 5. Кубическая решетка со случайными связями

Разреженная симметричная случайная матрица  $M = AA^T$ , рассмотренная в предыдущем разделе, топологически эквивалентна дереву (замкнутому на самого себя на размерах системы), причем число  $m = n^2$  задает порядок ветвления или координационное число этого дерева. Однако случайная структура связей в аморфных системах (стеклах), скорее, соответствует ближнему порядку расположения атомов, похожему топологически на тот, который существует в соответствующих кристаллах. Понятно, что по топологии кристаллическая структура сильно отличается от структуры дерева. Хотя бы по причине отсутствия на дереве замкнутых петель из связей, которые присутствуют в кристаллической решетке. Поэтому наша задача в этом разделе — обобщить полученные результаты на пространственные структуры, имеющие топологию не дерева, а кристаллической решетки. Во всех остальных аспектах система остается случайной, не обладающей какой-либо иной (кроме топологии связей) периодичностью.

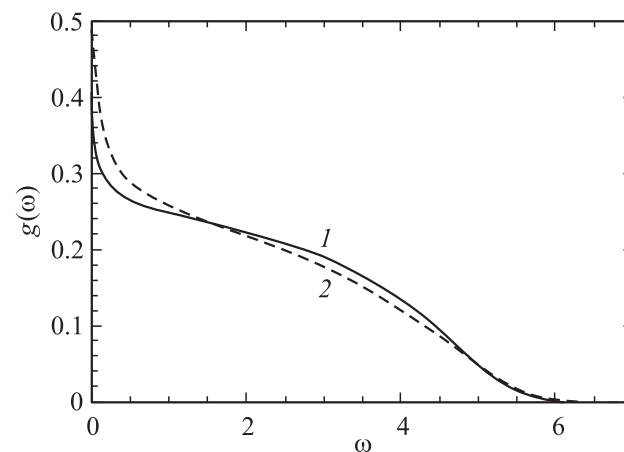
Рассмотрим, как с помощью случайной матрицы  $A$  можно задать динамическую систему, описываемую матрицей  $M = AA^T$  с известной топологической структурой, имеющую случайные силы связей. Для примера рассмотрим простую кубическую решетку  $w \times w \times w$ , в которой имеется  $N = w^3$  атомов. Атомы имеют целочисленные координаты  $(x, y, z)$ , каждая из которых может принимать значения от 1 до  $w$ . Введем целочисленный индекс  $i = x + w(y - 1) + w^2(z - 1)$ . Каждый атом в решетке характеризуется своим индексом  $i$ , пробегаящим значения от 1 до  $N$ .

Построим теперь случайную матрицу  $A$ . Элемент  $A_{ij}$  будет случайным, а не нулевым, если  $i$ -й и  $j$ -й атомы соседние или это один и тот же атом. Все остальные элементы  $A_{ij}$  положим равными нулю. Таким образом, для простой кубической решетки получаем ровно 7 ненулевых элементов для каждой строки и каждого столбца матрицы  $A$  (за исключением строк и столбцов, отвечающих атомам на границе). В динамической матрице  $M = AA^T$  элемент  $M_{ij}$  будет ненулевым, если  $i$ -й атом будет ближайшим или следующим за ближайшим соседом к  $j$ -у атому. На рис. 2 показано, с какими атомами взаимодействует один из атомов такой решетки (расположенный в центре). Аналогичным образом взаимодействуют со своими соседями все остальные атомы кубической решетки.

Нами проведены расчеты плотности колебательных состояний  $g(\omega)$  для такой кубической решетки. Сред-



**Рис. 2.** Схема взаимодействия атомов в простой кубической решетке. Показаны атомы, с которыми взаимодействует центральный атом. Светлые атомы соответствуют менее жесткой связи с центральным атомом.



**Рис. 3.** Сравнение плотности состояний для моделей с простой кубической решеткой со случайными связями (1) и случайной разреженной матрицей  $A$  с параметром  $n = 6$  (2). В обоих случаях  $N = 1000$ .

нее значение ненулевых элементов матрицы  $A$  было положено равным нулю,  $\langle A_{ij} \rangle = 0$ , дисперсия  $\langle A_{ij}^2 \rangle = 1$  (гауссово распределение). Результаты численного расчета показаны на рис. 3 кривой 1. Там же для сравнения приведены результаты для плотности состояний  $g(\omega)$  разреженной случайной матрицы  $AA^T$  с  $n = 6$  (кривая 2). Видно, что плотность состояний в трехмерной кубической решетке со случайными связями практически совпадает с плотностью состояний для разреженной случайной матрицы с соответствующим значением  $n$ . Можно показать, что с увеличением размерности пространства  $d$  плотность состояний  $g(\omega)$  в такой  $d$ -мерной кубической решетке будет приближаться по форме к четверти окружности. То же самое будет очевидно иметь место и в трехмерном пространстве при увеличении

радиуса взаимодействия между атомами (т.е. при учете взаимодействия с соседями, следующими за ближайшими).

## 6. Степень делокализации

Одним из важнейших вопросов в физике неупорядоченных систем является вопрос о локализации мод. Как известно со времени выхода в свет работы Андерсона [28], достаточно сильный беспорядок в системе приводит к локализации элементарных возбуждений. Обычно степень делокализации определяется выражением

$$P(\omega) = \frac{1}{N \sum_{i=1}^N e_i^4(\omega)}, \quad (40)$$

где  $e_i(\omega)$  —  $i$ -я координата собственного вектора, соответствующего собственному числу  $\omega^2$  динамической матрицы  $M$ . В случае полностью локализованной моды

$$|e_1| = 1, \quad e_2 = e_3 = \dots = e_N = 0, \quad P \sim \frac{1}{N}, \quad (41)$$

степень делокализации  $P(\omega)$  убывает с увеличением размеров системы. В случае полностью делокализованной моды

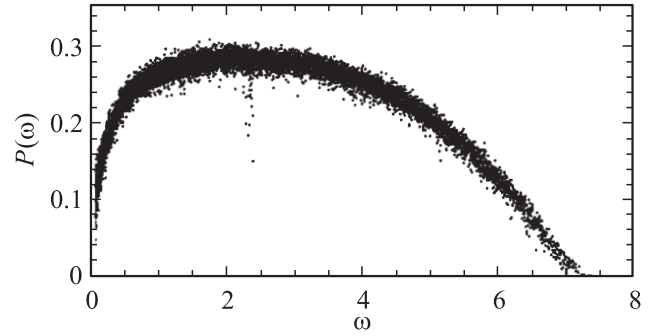
$$|e_1| = |e_2| = \dots = |e_N| = \frac{1}{\sqrt{N}}, \quad P \approx 1, \quad (42)$$

степень делокализации не зависит от  $N$  и оказывается порядка единицы.

Нами были проведены численные расчеты степени делокализации колебательных возбуждений в нашей задаче. Для динамической матрицы  $M = AA^T$  в случае случайной разреженной матрицы  $A$  результаты представлены на рис. 4. Мы видим, что почти для всех частот, кроме самых больших и самых маленьких,  $P(\omega)$  находится в интервале  $0.2 \lesssim P(\omega) \lesssim 0.3$  и не зависит от  $N$ . Следовательно, практически все колебательные моды в этой области частот делокализованы. График  $P(\omega)$  качественно хорошо совпадает с численными расчетами степени делокализации для аморфного  $\text{SiO}_2$ , полученными методом молекулярной динамики [3] для частот  $0 < \omega < 120 \text{ meV}$ .

Как показывают численные расчеты, с ростом параметра  $n$  число локализованных мод, как и следовало ожидать, уменьшается, а делокализованных — растет. Поскольку эти делокализованные моды не являются плоскими волнами (т.е. фононами), согласно терминологии [11], будем называть их диффузонами. Нам неизвестны пока их геометрическая структура и характер распространения в пространстве. Но их изучение может пролить свет на природу теплопроводности аморфных твердых тел. Подробнее этот вопрос будет рассмотрен в отдельной работе.

Аналогичные результаты получены нами и для кубической решетки со случайными связями. Степень



**Рис. 4.** Численный расчет степени делокализации для разреженной случайной матрицы  $M = AA^T$  при размере матрицы  $N = 10\,000$  и параметре  $n = 10$ . Ненулевые элементы матрицы  $A$  имеют гауссово распределение с нулевым средним и единичной дисперсией.

делокализации  $P(\omega) \approx 0.2$  здесь немного ниже, чем в предыдущем случае, но она не зависит от размеров системы, и это свидетельствует о делокализации мод. Интересно, что в двумерной (квадратной) и одномерной решетках со случайными связями, построенных аналогичным образом, степень делокализации оказывается на порядок меньше, чем в кубической решетке. Это по аналогии с неупорядоченными электронными системами [29] может означать локализацию колебательных мод в этих низкоразмерных структурах.

Численное значение степени делокализации колебательных мод  $P(\omega)$  в самых разных стеклах, полученное методами молекулярной динамики, обычно находится в интервале  $0.2 \lesssim P(\omega) \lesssim 0.6$  [3–9]. Это хорошо согласуется с результатами теории случайных матриц. Так, если считать, что собственные векторы  $e_i(\omega)$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) случайной матрицы  $M = AA^T$  являются единичными векторами в  $N$ -мерном пространстве

$$\sum_{i=1}^N e_i^2(\omega) = 1, \quad (43)$$

изотропно ориентированными во всех возможных направлениях, то величина  $r = e_i^2(\omega)$  будет распределена по закону Портера–Томаса [30]

$$p(r) = \sqrt{\frac{N}{2\pi r}} \exp\left(-\frac{Nr}{2}\right). \quad (44)$$

Отсюда следует, что

$$\langle e_i^2(\omega) \rangle = \langle r \rangle = \frac{1}{N}, \quad \langle e_i^4(\omega) \rangle = \langle r^2 \rangle = \frac{3}{N^2} \quad (45)$$

и в соответствии с (40) степень делокализации

$$P(\omega) = 1/3. \quad (46)$$

В литературе [4] встречается еще одно определение степени делокализации для векторной модели (в отличие

от рассмотренной нами скалярной модели)

$$P_3(\omega) = \frac{1}{N \sum_{i=1}^N \left( \sum_{\alpha=1}^3 e_{i\alpha}^2(\omega) \right)^2}, \quad (47)$$

где индекс  $i$  указывает на номер атома ( $i = 1, 2, \dots, N$ ), а индекс  $\alpha$  — на декартову проекцию смещения  $i$ -го атома на ось  $\alpha$  ( $\alpha = x, y, z$ ). В этом случае, если считать, что единичные векторы  $e_{i\alpha}(\omega)$  изотропно распределены в  $3N$ -мерном пространстве, то имеем по аналогии с (45)

$$\begin{aligned} \langle e_{i\alpha}^2(\omega) \rangle &= \langle r \rangle = \frac{1}{3N}, \\ \langle e_{i\alpha}^4(\omega) \rangle &= \langle r^2 \rangle = \frac{3}{(3N)^2} = \frac{1}{3N^2}. \end{aligned} \quad (48)$$

Поскольку

$$\begin{aligned} \langle (e_{ix}^2 + e_{iy}^2 + e_{iz}^2)^2 \rangle &= \langle e_{ix}^4 \rangle + \langle e_{iy}^4 \rangle + \langle e_{iz}^4 \rangle \\ &+ 2(\langle e_{ix}^2 \rangle \langle e_{iy}^2 \rangle + (\langle e_{ix}^2 \rangle \langle e_{iz}^2 \rangle + (\langle e_{iy}^2 \rangle \langle e_{iz}^2 \rangle)), \end{aligned} \quad (49)$$

используя (48), получаем, что степень делокализации (47) равна

$$P_3(\omega) = 3/5 = 0.6. \quad (50)$$

В этом смысле значения  $P(\omega) = 1/3$  для скалярной модели и  $P_3(\omega) = 0.6$  для векторной модели эквивалентны друг другу с точки зрения теории случайных матриц. Значение  $P_3(\omega) \approx 0.6$  было получено при численных расчетах степени делокализации колебательных мод в модели мягких сфер в [31]. Наконец, пользуясь соотношениями (48), можно показать, что значения степени делокализации  $P_O \approx P_{Si} \approx 0.3$ , полученные численно в [3] для аморфного  $\text{SiO}_2$ , тоже хорошо соответствует теоретическому значению  $P_O = P_{Si} = 1/3$ , вытекающему из формулы (18) этой работы.

## 7. Статистика уровней

Еще одним критерием, позволяющим судить о локализации или делокализации колебательных мод, является статистика уровней. Если моды являются локализованными, то их частоты разбросаны по частотной оси случайно согласно распределению Пуассона, без всякой корреляции друг с другом. Для количественного описания введем нормированную разность собственных частот колебаний

$$s = \frac{\Delta\omega}{\langle \Delta\omega \rangle}, \quad (51)$$

где  $\Delta\omega$  — расстояние между соседними собственными частотами, соответствующее частоте  $\omega$ , а  $\langle \Delta\omega \rangle$  — среднее расстояние между этими частотами. Тогда для локализованных мод функция распределения

$$Z(s) = \exp(-s) \quad (52)$$

и описывается распределением Пуассона.

Если моды делокализованы, то имеет место эффект расталкивания термов и при малых  $s$  функция  $Z(s) \propto s$ . Для гауссовского ортогонального ансамбля в теории случайных матриц имеет место формула Вигнера [17,21]

$$Z_W(s) = \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right). \quad (53)$$

Как показано в работе [15], численно она достаточно хорошо описывает и ансамбль Вишарта.

Рассмотрим теперь вопрос о расталкивании колебательных термов применительно к нашему случаю аналитически. Выясним, как зависит вероятность встретить две близкие соседние собственные частоты от расстояния между ними. Для этого найдем вероятность встретить два близких соседних собственных числа  $\varepsilon_i$  и  $\varepsilon_j$  матрицы  $M = AA^T$ , которые являются квадратами соответствующих собственных частот. Ограничимся случаем ансамбля Вишарта, рассмотренного в разделе 3.

В выражении (20) слагаемое в сумме, содержащее разность этих собственных чисел, будет много больше остальных. Оставим только его

$$\delta\varepsilon(\varepsilon_i, V^2) = \frac{2v^2\varepsilon_i}{\varepsilon_i - \varepsilon_j}. \quad (54)$$

Пусть  $v = \varepsilon_i - \varepsilon_j$  — разность двух соседних собственных чисел, тогда ее изменение за счет возмущения  $\delta A$  матрицы  $A$  равно

$$\delta v(v, \varepsilon, V^2) = \delta\varepsilon(\varepsilon_i, V^2) - \delta\varepsilon(\varepsilon_j, V^2) = \frac{4v^2\varepsilon}{v}, \quad (55)$$

где  $\varepsilon$  — среднее значение между  $\varepsilon_i$  и  $\varepsilon_j$ .

Пусть  $z(v, \varepsilon, V^2)$  — плотность распределения разницы соседних собственных чисел. Аналогично выводу уравнения (24) получаем

$$-\frac{\partial(z\delta v)}{\partial v} = v^2 \frac{\partial z}{\partial(V^2)}. \quad (56)$$

Переменные в функции  $z(v, \varepsilon, V^2)$  разделяются

$$z(v, \varepsilon, V^2) = \frac{1}{V^2} \tilde{z}(x, \varepsilon), \quad (57)$$

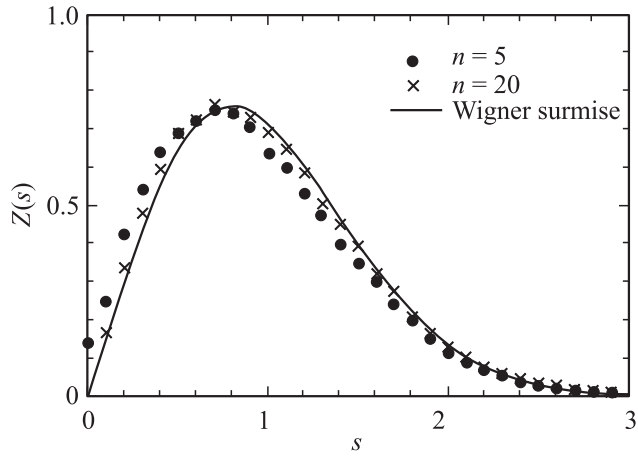
где  $x = v/V^2$ . Подставляем выражения (55) и (57) в уравнение (56), получаем

$$\frac{4\varepsilon}{V^2} \left( x \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x} - \tilde{z} \right) = x^2 \left( \tilde{z} + x \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x} \right). \quad (58)$$

При малых  $x$  правую часть этого уравнения можно заменить на нуль. В этом случае его решение для функции  $\tilde{z}(x)$  при малых  $x$  будет пропорционально  $x$ . Это в свою очередь означает, что при малых  $v$  функция  $z(v, \varepsilon, V^2) \propto v$ , т.е. имеет место эффект расталкивания термов.

В случае разреженной случайной матрицы  $A$  для динамической матрицы  $M = AA^T$  был проведен численный





**Рис. 5.** Численный расчет плотности распределения разности между соседними частотами — корнями из собственных чисел матрицы  $M = AA^T$ . Матрица  $A$  — случайная разреженная матрица размером  $N = 1000$  с числом ненулевых элементов в каждой строке, равным  $n$ . Ее ненулевые элементы имеют гауссово распределение с нулевым средним и единичной дисперсией. Сплошная линия показывает теоретическую зависимость Вигнера (53).

анализ статистики уровней. Полученная зависимость (усредненная по всем частотам) представлена на рис. 5. Как следует из нее, действительно  $Z(s) \sim s$  при малых  $s$ , что подтверждает аналитический результат. Из рис. 5 также видно, что формула Вигнера (53) достаточно хорошо описывает статистику уровней и в случае разреженных матриц. Поскольку эта статистика, как мы указывали, соответствует случаю делокализованных мод, заключаем отсюда, что большинство колебательных мод в нашей системе делокализовано. Это хорошо согласуется с рис. 4 для степени делокализации  $P(\omega)$ . В заключение отметим, что наши результаты находятся в хорошем согласии с расчетами статистики колебательных уровней для аморфных кластеров, выполненными в работах [32,33] методами молекулярной динамики.

## 8. Распределение элементов динамической матрицы

В этом разделе мы рассмотрим статистику ненулевых матричных элементов разреженной динамической матрицы  $M = AA^T$  и сравним ее с имеющимися компьютерными расчетами для аморфных систем, полученных методами молекулярной динамики. Для начала рассмотрим распределение ненулевых недиагональных элементов матрицы  $M$ . Как следует из формулы (6), элемент  $M_{ij}$  матрицы  $M$  есть „скалярное произведение“  $i$ -й и  $j$ -й строчек матрицы  $A$ . Чтобы элемент  $M_{ij}$  при  $i \neq j$  был ненулевым, необходимо, чтобы в  $i$ -й и  $j$ -й строчках матрицы  $A$  совпадали позиции, как минимум, одной пары ненулевых элементов. При большой разреженности матрицы  $A$  (т.е. при  $n \ll N$ ) вероятность

совпадения более одной пары ненулевых элементов пренебрежимо мала. Итак, недиагональные элементы матрицы  $M$  в большинстве своем нулевые, если же они не нулевые, то являются произведением двух ненулевых элементов матрицы  $A$ . Плотность распределения ненулевых недиагональных элементов матрицы  $M$  находится тогда по формуле

$$\begin{aligned} \rho_M^{\text{off}}(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - \xi\eta) \rho(\xi) \rho(\eta) d\xi d\eta \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{|t|} \rho\left(\frac{x}{t}\right) \rho(t) dt, \end{aligned} \quad (59)$$

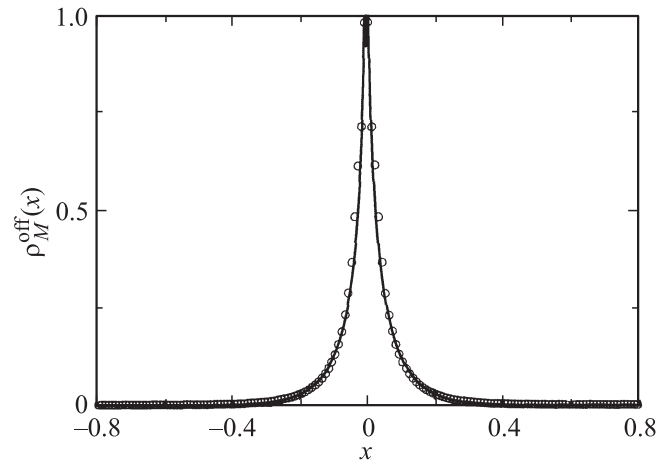
где  $\rho(x)$  — функция распределения ненулевых элементов случайной матрицы  $A$ . В случае, когда ненулевые элементы матрицы  $A$  распределены нормально с нулевым средним и дисперсией  $V^2$ , имеем

$$\rho(x) = \frac{1}{V\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2V^2}\right). \quad (60)$$

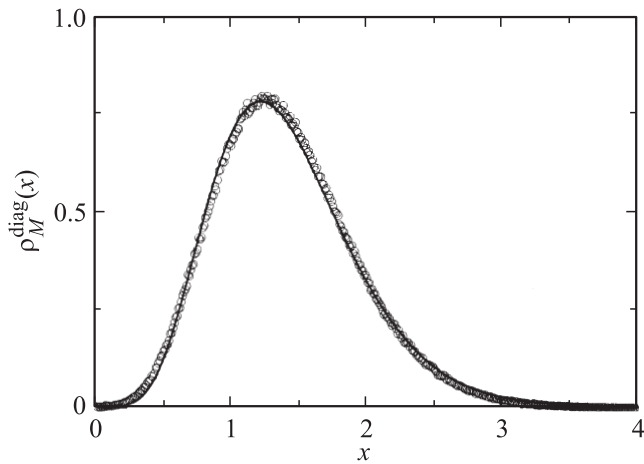
Подставляя плотность вероятности (60) в интеграл (59), получаем интегральное представление функции Макдональда нулевого порядка

$$\rho_M^{\text{off}}(x) = \frac{1}{\pi N} K_0(|x/V|). \quad (61)$$

В работе [23] динамическая матрица была получена в рамках метода молекулярной динамики для неупорядоченной системы из атомов, взаимодействующих посредством потенциала Ленарда–Джонса. Из рис. 6 следует, что при выборе значения дисперсии  $V^2 = 0.01$  имеет место хорошее согласие наших результатов с численными результатами [23].



**Рис. 6.** Сравнение распределения недиагональных элементов матрицы  $M = AA^T$  в случае нормального распределения элементов матрицы  $A$  (линия) с численными расчетами [23] (точки). Дисперсия  $V^2 = 0.01$ .



**Рис. 7.** Сравнение распределения диагональных элементов матрицы  $M = AA^T$  в случае нормального распределения элементов матрицы  $A$  при параметре  $n = 14$  (линия) с численными расчетами [23] (точки). Дисперсия  $V^2 = 0.01$ .

Диагональные элементы матрицы  $M$  распределены как сумма из  $n$  квадратов элементов матрицы  $A$ . В случае, когда элементы матрицы  $A$  распределены нормально с нулевым средним и дисперсией  $V^2$ , имеем распределение  $\chi^2$  диагональных элементов матрицы  $M$

$$\rho_M^{\text{diag}}(x) = \frac{(1/2)^{n/2}}{V\Gamma(n/2)} (x/V)^{n/2-1} \exp\left(-\frac{x}{2V}\right). \quad (62)$$

Как следует из рис. 7, оно тоже (при том же выборе дисперсии  $V^2 = 0.01$ ) достаточно хорошо совпадает с результатами расчетов работы [23] для  $n = 14$ .

## 9. Заключение

В настоящей работе мы показали, что разреженные случайные динамические матрицы общего вида  $M = AA^T$ , обладающие неотрицательными собственными числами  $\varepsilon = \omega^2$ , с успехом могут быть использованы для описания достаточно общих закономерностей колебательных спектров аморфных твердых тел. По сравнению с существующими в настоящее время методами молекулярной динамики они обладают тем преимуществом, что получение случайной динамической матрицы, соответствующей устойчивой колебательной системе, требует гораздо меньших усилий, чем при расчете реальных стекол с конкретными потенциалами взаимодействия между атомами. А результаты во многих случаях оказываются очень схожими.

Основной результат работы заключается в том, что плотность состояний  $g(\omega)$  колебательной системы, описываемой разреженной случайной матрицей общего вида  $M = AA^T$ , определяется (при не очень сильной степени разрежения) законом четверти окружности. Эта форма для плотности колебательных состояний в нашей модели является универсальным законом. Она не зависит ни

от вида плотности распределения матричных элементов случайной матрицы  $A$  (при условии, что их среднее равно нулю, а дисперсия конечна), ни от размера системы  $N$ , ни от числа ненулевых элементов  $n$  матрицы  $A$  при достаточно больших значениях  $n$ . Этот результат также не зависит и от локальной топологии упругих связей между колеблющимися атомами. Мы показали это на примере неупорядоченной системы с топологией дерева (решетки Бете) и с топологией кубической решетки со случайными связями.

Изучение вопроса о локализации этих колебательных мод в трехмерной системе привело нас к выводу, что, несмотря на сильную степень беспорядка, они в своем большинстве являются делокализованными гармоническими возбуждениями. На это указывают как значения степени делокализации, так и статистика колебательных уровней, в которой ярко выражен эффект расталкивания термов. Эти расчеты оказались в хорошем согласии с аналогичными результатами для реальных стекол, полученных методами молекулярной динамики.

И наконец, используя представление о случайных разреженных матрицах, мы вычислили распределение матричных элементов динамической матрицы  $M$ . Результаты расчетов оказались в хорошем согласии с численными данными, полученными с помощью методов молекулярной динамики для некоторого класса аморфных систем. Все изложенное выше позволяет нам сделать важный вывод, что случайные динамические матрицы вида  $M = AA^T$  отражают некоторые универсальные характеристики колебательных спектров аморфных твердых тел.

В заключение отметим, что плотность состояний вида четверти окружности, полученная в работе, подразумевает, что  $g(\omega)$  стремится к константе при  $\omega \rightarrow 0$ . Однако в реальных неупорядоченных системах (в трехмерном пространстве) такое поведение плотности состояний может иметь место лишь при отсутствии колебательных возбуждений — акустических фононов. Поэтому обычно в стеклах в плотности состояний при малых частотах наблюдается фононная щель,  $g(\omega) \propto \omega^2 \rightarrow 0$  при  $\omega \rightarrow 0$ .

Сравнительно недавно в литературе появились неупорядоченные системы нового типа. В них можно, уменьшая жесткость системы, уменьшать ширину фононной щели или даже сделать ее равной нулю. В последнем случае оказалось, что плотность колебательных мод  $g(\omega)$  действительно стремится к константе при  $\omega \rightarrow 0$ . Такое поведение  $g(\omega)$  наблюдалось в компьютерных расчетах в аморфных системах (типа гранулярных сред) вблизи перехода к нулевой упругости, с уменьшением плотности взаимодействующих частиц между которыми действуют силы отталкивания с конечным радиусом действия [34,35]. Похожее поведение наблюдалось и в других компьютерных моделях [36]. Отметим здесь также расчеты [37], где в приближении жестких тетраэдров была рассчитана плотность колебательных состояний в аморфном  $\text{SiO}_2$ . Она тоже оказалась конечной при  $\omega \rightarrow 0$ . Мы надеемся, что наша модель случайных матриц позволит описывать и эти системы.

Авторы выражают благодарность В.Л. Гуревичу и В.И. Козубу за многочисленные плодотворные дискуссии.

## Список литературы

- [1] V.L. Gurevich, D.A. Parshin, H.R. Schober. *Phys. Rev. B* **67**, 094 203 (2003).
- [2] D.A. Parshin, H.R. Schober, V.L. Gurevich. *Phys. Rev. B* **76**, 064 206 (2007).
- [3] W. Jin, P. Vashishta, R.K. Kalia, J.P. Rino. *Phys. Rev. B* **48**, 9359 (1993).
- [4] H.R. Schober, C. Oligschleger. *Phys. Rev. B* **53**, 11 469 (1996).
- [5] H.R. Schober, C. Oligschleger, B.B. Laird. *J. Non-Cryst. Solids* **156–158**, 965 (1993); C. Oligschleger, H.R. Schober. *Physica A* **201**, 391 (1993); C. Oligschleger, J.C. Schon. *J. Phys.: Cond. Matter* **9**, 1049 (1997).
- [6] J. Hafner, M. Krajčí. *J. Phys.: Cond. Matter* **6**, 4631 (1994).
- [7] S.V. Meshkov. *Phys. Rev. B* **55**, 12 113 (1997).
- [8] P. Ballone, S. Rubini. *Phys. Rev. B* **51**, 14 962 (1995).
- [9] S.E. Abraham, B. Bagchi. *Phys. Rev. E* **81**, 031 506 (2010).
- [10] J.L. Feldman, M.D. Kluge, P.B. Allen, F. Wooten. *Phys. Rev. B* **48**, 12 589 (1993).
- [11] P.B. Allen, J.L. Feldman, J. Fabian, F. Wooten. *Phil. Mag. B* **79**, 1715 (1999).
- [12] А. Марадудин, Э. Монтролл, Дж. Вейсс. *Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении*. Мир, М. (1965). 383 с.
- [13] R. Bhatia. *Positive definite matrices*. Princeton University Press, Princeton (2007). 264 p.
- [14] В.А. Марченко, Л.А. Пастур. *Мат. сб.* **72** (114), 507 (1967).
- [15] V. Plerou, P. Gopikrishnan, B. Rosenow, L.A.N. Amaral, T. Guhr, H. Stanley. *Phys. Rev. E* **65**, 066 126 (2002).
- [16] M. Barthelemy, B. Gondran, E. Guichard. *Phys. Rev. E* **66**, 056 110 (2002).
- [17] A.M. Tulino, S. Verdù. *Random Matrix Theory and Wireless Commun. Foundations Trends Commun. Inform. Theory* **1**, 1, 1 (2004).
- [18] Gurarie, and J.T. Chalker. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 136801 (2002); *Phys. Rev. B* **68**, 134207 (2003).
- [19] J. Wishart. *Biometrika* **20A**, 32 (1928).
- [20] E.P. Wigner. *Ann. Math.* **62**, 548 (1955).
- [21] M.L. Mehta. *Random matrices*. 3rd ed. Elsevier, Netherlands (2004), 688 p.
- [22] S.N. Taraskin, S.R. Elliott. *Phys. Rev. B* **65**, 052 201 (2002).
- [23] B.J. Huang, Ten-Ming Wu. *Phys. Rev. E* **79**, 041 105 (2009).
- [24] F.J. Dyson. *Phys. Rev.* **92**, 1331 (1953).
- [25] G.J. Rodgers, C. De Dominicis. *J. Phys. A: Math. Gen.* **23**, 1567 (1990).
- [26] S.N. Evangelou. *J. Phys.: Cond. Matter* **2**, 2953 (1990).
- [27] S.N. Evangelou. *J. Stat. Phys.* **69**, 361 (1992).
- [28] P.W. Anderson. *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [29] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, T.V. Ramakrishnan. *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
- [30] F. Haake. *Quantum signatures of chaos*. 2nd ed. Springer, Berlin (2001). 479 p.
- [31] H.R. Schober, B.B. Laird. *Phys. Rev. B* **44**, 6746 (1991).
- [32] S.K. Sarkar, G.S. Matharoo, A. Pandey. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 215 503 (2004).
- [33] G.S. Matharoo, S.K. Sarkar, A. Pandey. *Phys. Rev. B* **72**, 075 401 (2005).
- [34] L.E. Silbert, A.J. Liu, S.R. Nagel. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 098 301 (2005).
- [35] M van Hecke. *J. Phys.: Cond. Matter* **22**, 033 101 (2010).
- [36] D.J. Ashton, J.P. Garrahan. *Eur. Phys. J. E* **30**, 303 (2009).
- [37] K.O. Trachenko, M.T. Dove, M.J. Harris, V. Heine. *J. Phys.: Cond. Matter* **12**, 8041 (2000); K.O. Trachenko, M.T. Dove, K. Hammonds, M.J. Harris, V. Heine. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3431 (1998).