

13,04

Корреляционные свойства неаффинных деформаций в рамках теории случайных матриц

© Д.В. Бабин^{1,2}, Д.А. Колюх¹, Я.М. Бельтюков¹

¹ ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский Академический университет РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: babin.2002@bk.ru

Поступила в Редакцию 20 августа 2024 г.

В окончательной редакции 4 сентября 2024 г.

Принята к публикации 6 сентября 2024 г.

В рамках разработанной модели коррелированных случайных матриц получены аналитические выражения для парных корреляций неаффинных компонент смещений атомов в неупорядоченной структуре. Рассмотрены корреляции пространственных производных неаффинных деформаций, соответствующих корреляциям между вариациями плотности вещества, возникающей при деформации. Показано, что такие корреляции имеют дельта-образную компоненту, которая соответствует статистике белого шума, а также отрицательную корреляцию, экспоненциально спадающую на масштабе неаффинности.

Ключевые слова: аморфные диэлектрики, неаффинные деформации, случайные коррелированные матрицы, длина Иоффе–Регеля.

DOI: 10.61011/FTT.2024.10.59091.218

1. Введение

В последние годы все большее значение приобретают исследования механических, колебательных и теплопроводных свойств различных аморфных материалов, обладающих значительным беспорядком на молекулярном уровне. К таким материалам относятся как стекла, так и аморфные полупроводники и полимеры, а также нанокомпозиты на их основе. Неупорядоченное расположение атомов в таких материалах существенно влияет как на поведение аморфных тел в нанометровых масштабах, так и на их макроскопические свойства. Макроскопические деформации аморфного тела приводят к неоднородным локальным деформациям, характерный масштаб которых оценивается десятками межатомных расстояний [1,2]. Такие неоднородные деформации получили свое название *неаффинные деформации*, поскольку они не могут быть описаны комбинацией локальных растяжений или сдвигов. Неаффинные деформации наблюдались во многих неупорядоченных твердых телах: металлических стеклах [3], полимерных гидрогелях [4], переохлажденных жидкостях [5], стеклах Леннарда–Джонса [6], кварцевых стеклах [7]. Происхождение неаффинных смещений напрямую связывают с неупорядоченностью структуры [4,8], однако данный вопрос требует комплексных исследований. В связи с этим, описание неаффинных деформаций и их корреляционных свойств представляет собой одну из важных задач физики неупорядоченных систем, что способно пролить свет на природу аморфного состояния вещества.

Аномальные механические, тепловые и акустические свойства, наблюдаемые в аморфных твердых телах, пред-

положительно обусловлены наличием пространственно неоднородных модулей упругости [9]. Вследствие неаффинности, локальные объемные модули и модули сдвига демонстрируют большие флуктуации и имеют отличительные корреляционные свойства [10], что сказывается на макроскопической упругости неоднородных материалов и полимерных нанокомпозитов [11–16]. Например, проведенные недавно молекулярно-динамические расчеты напрямую показали увеличение локальных модулей упругости полистирола вблизи нановключения диоксида кремния [12], что объясняется влиянием неаффинных деформаций.

Вследствие охлаждения, аморфная структура приходит в метастабильное состояние. Такое состояние характеризуется существенной корреляцией силовых констант связей [17,18]. Это приводит к специфическим корреляциям между смещениями атомов и неоднородным деформациям, возникающим под действием однородных механических напряжений. При этом корреляции могут проявляться на больших масштабах, много больших межатомных расстояний [1,6,19]. Пространственное поведение таких корреляций может быть исследовано с помощью молекулярно-динамических расчетов, в которых отмечают дальнедействующую корреляцию неаффинных компонент смещений [1,6,20]. Однако теоретическое описание корреляционных свойств неаффинных деформаций по-прежнему является достаточно актуальной задачей.

Существует ряд работ, посвященных описанию корреляционных свойств неаффинных деформаций. В работе [1] применялось численное моделирование трехмерного аморфного тела, при помощи которого удалось

показать зависимость корреляции неаффинных смещений от расстояния. Установленная зависимость является убывающей, причем существует область расстояний, на которых корреляции принимают отрицательные значения (антикорреляция). В работе [19] учитывается случайное расположение атомов в аморфном теле, для которого в континуальной модели была получена функция неаффинных смещений и их корреляций в зависимости от расстояния между исследуемыми точками системы. Однако дополнительных исследований требует выявление связи масштаба неаффинности со степенью неупорядоченности структуры.

В настоящей работе для определения корреляционных свойств неаффинных деформаций мы применили модель случайных коррелированных матриц. Такая модель позволила описать упругие и колебательные свойства аморфных твердых тел, исходя при этом из самых общих предположений о свойствах неупорядоченной среды, находящейся вблизи устойчивого положения равновесия [11,13,21,22]. Подход случайных матриц был успешно применен для описания бозонного пика и перехода Иоффе–Регеля между фононами и диффузионным типом колебаний в системах с разным ближним порядком и разной размерностью [21,22]. В рамках этого подхода было предсказано, в том числе, существование бозонного пика в двумерных материалах, что впоследствии получило экспериментальное подтверждение [23]. В работах [11,13] теория случайных матриц позволила объяснить возникновение упругой оболочки вокруг наночастиц на масштабе неаффинных деформаций.

2. Неаффинные деформации

При приложении к системе однородного воздействия f возникают атомные смещения u как отклик на это воздействие, что в линейном приближении описывается уравнением движения [13]:

$$\sum_{j=1}^N (\Phi_{ij} - \omega^2 m_{ij}) u_j = f_i, \quad (1)$$

где \hat{m} — матрица масс, ω — частота колебаний системы, $\hat{\Phi}$ — матрица силовых констант, элементы которой Φ_{ij} определяются смешанными производными потенциальной энергии $U(x_1, x_2, \dots, x_N)$ по координатам степеней свободы x_i и x_j :

$$\Phi_{ij} = \frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_j}. \quad (2)$$

Для упрощения в работе используется скалярное приближение, в котором атомные смещения представляют собой скаляр. Такая модель уже успешно применялась в ряде работ [11,22]. Поэтому число степеней свободы N совпадает с числом атомов системы, и индексы i и j нумеруют атомы системы.

Исходя из формулы (1), смещение i -го атома можно выразить через резольвенту в виде

$$u_i = - \sum_{j=1}^N \hat{G}_{ij} f_j, \quad (3)$$

где \hat{G} — резольвента матрицы $\hat{\Phi}$:

$$\hat{G} = \frac{1}{\omega^2 \hat{m} - \hat{\Phi}}. \quad (4)$$

Резольвента \hat{G} играет важную роль при описании динамических свойств аморфных материалов. Конкретные равновесные координаты x_1, x_2, \dots, x_N зависят от процесса охлаждения расплавов, формирующих аморфный материал. Поэтому компоненты матрицы силовых констант и ее резольвенты зависят от рассматриваемой конкретной системы, и могут варьироваться в широких пределах [17,18,24]. Вследствие этого компоненты атомных смещений также варьируются, и флуктуации атомных смещений зависят от силы беспорядка в неупорядоченных системах.

Определим неаффинную (флуктуационную) компоненту смещений u^{na} как разницу самих смещений и их усредненных значений:

$$u_i^{na} = u_i - \langle u_i \rangle, \quad (5)$$

где скобки $\langle \dots \rangle$ означают усреднение по ансамблю разных реализаций рассматриваемой системы. Усредненная компонента смещений $\langle u \rangle$ определяет макроскопический отклик вещества на внешнее воздействие (макроскопическую деформацию), и при постоянном воздействии f выражается через усредненную резольвенту:

$$\langle u_i \rangle = - \sum_{j=1}^N \langle \hat{G}_{ij} \rangle f_j. \quad (6)$$

Исследование пространственных корреляционных особенностей неаффинных деформаций вызывает большой интерес на протяжении многих лет [6,20]. Метастабильное состояние, в котором находится аморфная система, обладает существенной корреляцией силовых констант, что приводит к скоррелированности неаффинных компонент смещений. Для исследования этого вопроса в данной работе рассматриваются парные корреляции неаффинных компонент смещений $\mathcal{R}_{ij}^{na} = \langle u_i^{na} u_j^{na} \rangle$, которые, как следует из уравнения (5), можно выразить через резольвенту \hat{G} в виде

$$\mathcal{R}_{ij}^{na} = \sum_{i',j'=1}^N (\langle \hat{G}_{ii'} \hat{G}_{jj'} \rangle - \langle \hat{G}_{ii'} \rangle \langle \hat{G}_{jj'} \rangle) f_i f_{j'}. \quad (7)$$

Как следует из записи (7), наличие ненулевых корреляций между неаффинными деформациями напрямую связано с существованием парных ковариаций между элементами резольвенты $\langle \hat{G}_{ii'} \hat{G}_{jj'} \rangle$. Другими словами,

для исследования коррелятора неаффинных деформаций \mathcal{R}_{ij}^{na} необходимо произвести усреднение резольвенты $\langle \hat{G} \rangle$ и исследовать парные ковариации ее элементов $\langle G_{ii'} G_{jj'} \rangle$. Для этого в работе применяется теория, основанная на использовании случайных коррелированных матриц.

3. Случайные коррелированные матрицы

Вблизи устойчивого положения равновесия в гармоническом приближении энергия взаимодействия U_k , соответствующая энергии k -й связи, может быть представлена в виде суммы квадратичных форм по смещениям атомов:

$$U_k = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^N A_{ik} u_i \right)^2, \quad (8)$$

где A_{ik} — некоторые числа, индекс k нумерует квадратичные формы, которые мы в данной работе будем интерпретировать как связи, обладающие энергией U_k . Каждая строка матрицы \hat{A} соответствует степени свободы системы, а каждый столбец соответствует связи между степенями свободы. Полная потенциальная энергия взаимодействия

$$U = \sum_{k=1}^K U_k, \quad (9)$$

где K — число связей системы. Тогда, исходя из уравнения (2), матрица силовых констант $\hat{\Phi}$ выражается через матрицу \hat{A} :

$$\hat{\Phi} = \hat{A} \hat{A}^T. \quad (10)$$

При описании свойств конкретной системы матрица силовых констант имеет определенный вид. Однако для описания общих универсальных свойств аморфных систем, независимых от усреднения, применима теория случайных матриц. Как следует из формулы (10), в самом общем виде матрица силовых констант представима в виде ансамбля $\hat{A} \hat{A}^T$ с некоторой матрицей \hat{A} . При этом матрица \hat{A} обладает определенными свойствами, которые следуют из общих свойств аморфных неупорядоченных систем [24]. Вследствие беспорядка, элементы A_{ik} носят случайный характер, и могут рассматриваться как случайные числа с заданным распределением. В случае когда элементы матрицы \hat{A} имеют распределение Гаусса, ансамбль $\hat{A} \hat{A}^T$ называется ансамблем Вишарта случайных матриц [25].

Однако для описания стеклообразного состояния необходимо рассматривать коррелированный ансамбль Вишарта случайных матриц, то есть случай, когда элементы матрицы \hat{A} коррелированы между собой [22]. В общем виде парные ковариации между элементами матрицы \hat{A} задаются как

$$\langle A_{ik} A_{jl} \rangle = C_{ij}^{kl}, \quad (11)$$

где матрица парных ковариаций \hat{C} имеет 4 индекса: нижние индексы i и j нумеруют степени свободы

системы, а верхние индексы k и l нумеруют связи. Учет корреляций приводит к специфической статистике частот аморфной системы, которая является предметом многих исследований [7,22]. Вследствие близкодества между атомами системы, характерного для аморфного состояния вещества, матрица \hat{A} имеет разреженный вид, что учитывается в структуре корреляционной матрицы \hat{C} , которая также является разреженной. Рассмотрение статистических свойств коррелированного ансамбля Вишарта помогло описать общеизвестные колебательные феномены аморфных твердых тел, таких как бозонный пик и переход Иоффе–Регеля при трансформации фононов в диффузионный тип колебаний [21,22].

Как было показано в работе [13] с помощью диаграммной техники, в результате усреднения по различным реализациям получается система уравнений, связывающая усредненную резольвенту $\langle \hat{G} \rangle$ с ковариационной матрицей \hat{C} :

$$\langle \hat{G} \rangle = \frac{1}{\omega^2 \hat{I}_N - \hat{\Sigma}}, \quad \Sigma_{ij} = \sum_{k,l=1}^K C_{ij}^{kl} \langle G_{kl}^* \rangle, \\ \langle \hat{G}^* \rangle = \frac{1}{\hat{I}_K - \hat{\Sigma}^*}, \quad \Sigma_{kl}^* = \sum_{i,j=1}^N C_{ij}^{kl} \langle G_{ij} \rangle, \quad (12)$$

где \hat{G}^* — дополнительная (вспомогательная) резольвента размером $K \times K$, $\hat{\Sigma}$ и $\hat{\Sigma}^*$ — матрицы размером $N \times N$ и $K \times K$ соответственно, каждая из которых известна в диаграммной технике как собственно–энергетическая часть [26], \hat{I}_N и \hat{I}_K — единичные матрицы размером $N \times N$ и $K \times K$ соответственно. Зная свойства или вид ковариационной матрицы \hat{C} , из системы уравнений (12) можно проанализировать свойства усредненной резольвенты $\langle \hat{G} \rangle$, что дает возможность исследовать общие колебательные и механические особенности неупорядоченной среды [22].

4. Корреляционные свойства неаффинных деформаций

Для изучения корреляционных свойств неаффинных деформаций в работе рассматриваются следующие физические случаи, позволяющие упростить систему уравнений (12):

(i) Свойства неупорядоченной системы исследуются на нулевой частоте, $\omega = 0$. Это дополнительно упрощает систему уравнений (12). Частотно-зависимые свойства неаффинных деформаций будут являться предметом дальнейшего исследования.

(ii) Рассматривается система, в которой все ее связи независимы (некоррелированы друг с другом). Это соответствует тому, что разные столбцы матрицы \hat{A} , представляющие разные связи, имеют свои собственные корреляционные матрицы:

$$C_{ij}^{kl} = C_{ij}^k \delta_{kl}, \quad (13)$$

где δ_{kl} — символ Кронекера, \hat{C}^k — матрица, описывающая ковариации между степенями свободы, вовлечен-

ными в связь с номером k . Здесь и далее \hat{C}^k обозначает квадратную матрицу размером $N \times N$, элементы которой индексируются как C_{ij}^k . Как следует из системы уравнений (12), такое рассмотрение приводит к тому, что матрицы $\hat{\Sigma}^*$ и $\langle \hat{G}^* \rangle$ имеют диагональный вид.

(iii) Рассматривается однородная среда, в которой все связи статистически неразличимы. В этом случае матрица $\langle \hat{G}^* \rangle$, ответственная за описание связей системы, имеет вид

$$\langle \hat{G}^* \rangle = \kappa \hat{I}_K, \quad (14)$$

где $\kappa = 1 - N/K$. Как было продемонстрировано в работах [13,21,22], относительное увеличение числа связей K над числом степеней свободы N является ключевым параметром в применяемом подходе случайных матриц, который характеризует степень неупорядоченности системы. В этих работах использовался параметр $\kappa = K/N - 1$. При этом случай $\kappa \gg 1$ соответствует слабым флуктуациям матрицы $\hat{\Phi}$, а $\kappa \ll 1$ описывает случай сильно неупорядоченной системы, наиболее интересной для рассмотрения.

С учетом описанных свойств, применяя разработанную диаграммную технику, описанную в работе [13], мы произвели усреднение по различным реализациям системы и получили выражение на коррелятор (7) в следующем матричном виде:

$$\mathcal{R}_{ij}^{\text{na}} = \kappa^2 \sum_{k,l=1}^K D^{kl} \sum_{i',j'=1}^N L_{ij'j'}^{kl} \langle u_{i'} \rangle \langle u_{j'} \rangle. \quad (15)$$

Здесь матрица \hat{D} размером $K \times K$ задается выражением

$$\hat{D} = \frac{1}{\hat{I}_K - \kappa^2 \hat{T}}, \quad (16)$$

в котором матрица \hat{T} имеет размер $K \times K$ и выражается через усредненную резольвенту $\langle \hat{G} \rangle$ и матрицу ковариаций \hat{C} :

$$T^{kl} = \text{Tr}(\langle \hat{G} \rangle \hat{C}^k \langle \hat{G} \rangle \hat{C}^l). \quad (17)$$

Матрица \hat{L} имеет 6 индексов и также выражается через усредненную резольвенту $\langle \hat{G} \rangle$ и матрицу ковариаций \hat{C} :

$$L_{ij'j'}^{kl} = \left(\langle \hat{G} \rangle \hat{C}^k \langle \hat{G} \rangle \right)_{ij} C_{i'j'}^l + \left(\langle \hat{G} \rangle \hat{C}^k \right)_{ii'} \left(\langle \hat{G} \rangle \hat{C}^l \right)_{jj'}. \quad (18)$$

Здесь и далее матрицы $\langle \hat{G} \rangle$ и \hat{C} перемножаются по нижним индексам, нумерующим степени свободы, в соответствии с определением перемножения матриц, а $\text{Tr}(\dots)$ означает взятие следа от матрицы по ее нижним индексам. Наличие двух слагаемых в выражении (18) связано с тем, что при анализе диаграмм было выделено два типа, которые вносят наибольший вклад среди всевозможных диаграмм, появляющихся в результате усреднения парных произведений элементов резольвенты $\langle G_{ii'} G_{jj'} \rangle$.

Для анализа пространственных свойств найденного выражения для коррелятора неаффинных деформаций (15) удобно перейти к непрерывному пределу.

Для этого перейдем от индекса i к вектору \mathbf{r}_i , соответствующего координате i -го атома. Тогда смещения атомов $u(\mathbf{r})$ и исследуемый коррелятор $\mathcal{R}^{\text{na}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ являются непрерывными функциями, зависящими от координат атомов. При этом, как показано в Приложении 1 к настоящей работе, действие матрицы \hat{C}^k в точке расположения \mathbf{r}^k связи k на плавную функцию, зависящую от координат атомов, характеризуется взятием градиента этой функции по координате \mathbf{r}^k . Координаты с верхними индексами $(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^l)$ обозначают координаты связей, а с нижними индексами $(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ — координаты атомов.

С учетом замены суммирования по связям на пространственное интегрирование в уравнении (15), коррелятор $\mathcal{R}^{\text{na}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ в непрерывном виде принимает следующий вид:

$$\mathcal{R}^{\text{na}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{\kappa^2 \chi^2}{V^2} \iint D(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^l) L(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}^k, \mathbf{r}^l) d\mathbf{r}^k d\mathbf{r}^l. \quad (19)$$

Здесь V — нормировочный объем, а постоянная $\chi = \frac{1}{3K} \sum_{i,j,k} \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_j C_{ij}^k$ содержит в себе скалярное произведение векторов (\cdot) . Поскольку $\sum_i C_{ij}^k = \sum_j C_{ij}^k = 0$, то величина χ не зависит от выбора начала системы координат для векторов r_i и r_j и пропорциональна квадрату характерного размера связи. Функция L является непрерывной функцией координат и имеет вид

$$\begin{aligned} L(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}^k, \mathbf{r}^l) &= \nabla_{\mathbf{r}^k} G(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}_i) \cdot \nabla_{\mathbf{r}^k} G(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}_j) (\nabla_{\mathbf{r}^l} \langle u(\mathbf{r}^l) \rangle)^2 \\ &+ (\nabla_{\mathbf{r}^k} G(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}_i) \cdot \nabla_{\mathbf{r}^k} \langle u(\mathbf{r}^k) \rangle) (\nabla_{\mathbf{r}^l} G(\mathbf{r}^l, \mathbf{r}_j) \cdot \nabla_{\mathbf{r}^l} \langle u(\mathbf{r}^l) \rangle), \end{aligned} \quad (20)$$

где операция $\nabla_{\mathbf{r}^k}$ в декартовой системе координат $\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\}$ означает взятие градиента по координате \mathbf{r}^k :

$$\nabla_{\mathbf{r}^k} = \frac{\partial}{\partial r_x^k} \mathbf{e}_x + \frac{\partial}{\partial r_y^k} \mathbf{e}_y + \frac{\partial}{\partial r_z^k} \mathbf{e}_z. \quad (21)$$

При приложении к системе деформации возникает ее макроскопический отклик на внешнее воздействие. При этом, в соответствии с макроскопической теорией упругости, относительная деформация $\boldsymbol{\varepsilon}$, являющаяся в скалярной модели смещений вектором, связана с градиентом усредненных смещений $\langle u \rangle$:

$$\nabla_{\mathbf{r}} \langle u(\mathbf{r}) \rangle = \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (22)$$

где вектор относительной деформации $\boldsymbol{\varepsilon} = \{\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z\}$ означает растяжение системы вдоль пространственных осей. В скалярной модели смещением можно считать смещение вдоль оси z , в направлении которой будет приложена внешняя деформация. С учетом того, что система однородная и изотропная, функция L (20) принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} L(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}^k, \mathbf{r}^l) &= \varepsilon^2 \nabla_{\mathbf{r}^k} G(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}_i) \cdot \nabla_{\mathbf{r}^k} G(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}_j) \\ &+ (\nabla_{\mathbf{r}^k} G(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}_i) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) (\nabla_{\mathbf{r}^l} G(\mathbf{r}^l, \mathbf{r}_j) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}). \end{aligned} \quad (23)$$

В Приложении 2 к настоящей работе был найден вид G и D как непрерывных функций. При этом показано, что эти функции являются разностными, то есть зависят от разницы пространственных координат:

$$G(|\mathbf{r}^k - \mathbf{r}_i|) = -\frac{1}{4\pi\kappa\chi|\mathbf{r}^k - \mathbf{r}_i|}, \quad (24)$$

$$D(|\mathbf{r}^k - \mathbf{r}^l|) = \frac{e^{-|\mathbf{r}^k - \mathbf{r}^l|/\xi}}{4\pi\kappa\xi^2|\mathbf{r}^k - \mathbf{r}^l|}. \quad (25)$$

Параметр ξ определяет некоторый пространственный масштаб и задается выражением

$$\xi = \sqrt{\frac{\kappa}{6K} \sum_{m,l} T^{ml} (\mathbf{r}^m - \mathbf{r}^l)^2}. \quad (26)$$

Выражение (26) совпадает с параметром масштаба неоднородности аморфной среды, полученным в работе [13]. При этом, как было показано в Приложении 2, для $\kappa \ll 1$ выполняется масштабное соотношение $\xi \propto \kappa^{-1/2}$, характерное для масштаба неаффинности [13] и для масштаба длины Иоффе–Регеля l_{IR} , которая представляет собой длину свободного пробега фононов вблизи частоты Иоффе–Регеля [22]. Другими словами, параметр ξ (26) соответствует масштабу неоднородности (неаффинности) аморфной системы и связан с силой беспорядка.

С учетом найденных соотношений (20)–(26), коррелятор смещений (19) принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^{na}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = & -\frac{\varepsilon^2}{4\pi\kappa|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\ & + \iint \frac{((\mathbf{r}^k - \mathbf{r}_i) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) ((\mathbf{r}^l - \mathbf{r}_j) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) e^{-|\mathbf{r}^k - \mathbf{r}^l|/\xi}}{(4\pi)^3 \kappa V^2 \xi^2 |\mathbf{r}^k - \mathbf{r}_i|^3 |\mathbf{r}^l - \mathbf{r}_j|^3 |\mathbf{r}^k - \mathbf{r}^l|} d\mathbf{r}^k d\mathbf{r}^l. \end{aligned} \quad (27)$$

Первое слагаемое в выражении (27) дает главный вклад в рассматриваемые корреляции и не содержит характерных пространственных масштабов. Этот результат согласуется с результатами работы [19], согласно которой корреляция неаффинных деформаций $\langle u^{na}(\mathbf{r}) u^{na}(\mathbf{r}') \rangle$ в точках, находящихся на расстоянии $r = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ друг от друга, имеет пространственную зависимость $\langle u^{na}(r) u^{na}(0) \rangle \propto C - Dr^{-1}$, где C и D — положительные константы. При этом первое слагаемое не содержит характерного масштаба ξ и не может полноценно описывать корреляционные свойства неаффинных деформаций аморфного тела. В выражении (27) характерный масштаб неоднородности среды ξ входит во второе слагаемое, которое было получено впервые.

Найденный коррелятор неаффинных деформаций (27) имеет дальнедействующий характер, что обуславливается тем, что локальная деформация вещества определяется не только самой картой неаффинных смещений $u^{na}(\mathbf{r})$, но и ее пространственными производными. Для используемой скалярной модели смещений нами рассмотрены корреляции градиентов неаффинных

смещений $\langle \nabla_{\mathbf{r}_i} u^{na}(\mathbf{r}_i) \cdot \nabla_{\mathbf{r}_j} u^{na}(\mathbf{r}_j) \rangle$. Рассмотрение таких корреляций упрощает найденное выражение (27) для \mathcal{R}^{na} :

$$\nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_j} \mathcal{R}^{na}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \frac{\varepsilon^2}{\kappa} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) - \frac{\varepsilon^2}{4\pi\kappa\xi^2} \frac{e^{-|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|/\xi}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (28)$$

Как видно из уравнения (28), первое слагаемое отлично от нуля только в случае совпадения \mathbf{r}_i и \mathbf{r}_j (дельта-коррелированная компонента). Второе слагаемое экспоненциально убывает с расстоянием $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ на масштабе неаффинности ξ , и при этом выражает собой антикорреляцию.

5. Обсуждение результатов

Свойства аморфных твердых тел существенно зависят от микроскопических неаффинных деформаций. Используя модель случайных матриц, в работе исследованы пространственные корреляции неаффинных деформаций $\langle u^{na}(\mathbf{r}) u^{na}(\mathbf{r}') \rangle = \mathcal{R}^{na}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ и получены их аналитические выражения. Важным результатом работы является найденное выражение (28) для корреляций между пространственными производными неаффинных деформаций, которые с физической точки зрения можно сопоставить корреляциям между локальными вариациями плотности вещества системы. В общем виде было получено, что корреляции $\langle \nabla u^{na}(\mathbf{r}) \cdot \nabla u^{na}(\mathbf{r}') \rangle$ быстро спадают в пространстве и зависят от расстояния $r = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ в виде

$$\langle \nabla u^{na}(r) \cdot \nabla u^{na}(0) \rangle = A\delta(r) - B \frac{e^{-r/\xi}}{r}. \quad (29)$$

Полученный коррелятор состоит из дельта-коррелированной компоненты, соответствующей статистике белого шума, и экспоненциально убывающего вклада, выражающего собой антикорреляцию, спадающую на масштабе неаффинности ξ . Такое экспоненциальное поведение корреляций на масштабе неоднородности ξ не наблюдалось в известных нам работах других научных групп и было получено впервые в рамках данной работы.

В работе показывается, что разработанная теория случайных матриц является хорошим теоретическим инструментом для исследования различных универсальных особенностей аморфных систем, обладающих различной степенью беспорядка на молекулярном уровне. Ранее подход случайных матриц был применен для теоретического описания бозонного пика и перехода Иоффе–Регеля между фононами и диффузионным типом колебаний в системах произвольной топологии и размерности [21,22,24]. Полученные теоретические результаты помогли обосновать ранее найденные экспериментальные зависимости, в том числе при исследовании бозонного пика в двумерных системах [23,27]. При этом было получено, что частоты кроссовера Иоффе–Регеля и бозонного пика имеют близкие значения, а соответствующий пространственный масштаб l_{IR} , обычно

составляющий несколько нанометров, связан с силой беспорядка в таких системах и зависит от параметра системы $l_{IR} \propto \kappa^{-1/2}$. Именно этот масштаб определяет величину неаффинных деформаций в аморфных системах. Полученное в данной работе масштабное соотношение $\xi \propto \kappa^{-1/2}$ позволяет говорить о том, что ξ соответствует масштабу неоднородности исследуемой среды (масштабу неаффинности). На таких масштабах классическая (континуальная) теория упругости становится неприменимой, поскольку невозможно определить гладкую зависимость смещения от координаты. Другими словами, масштаб неаффинности ξ и длина Иоффе–Регеля l_{IR} имеют один порядок величины и разделяют макроскопические масштабы, к которым применима классическая (континуальная) теория упругости, и микроскопические масштабы, на которых существенную роль играет неупорядоченность системы, что согласуется с результатами работ [11,13,22]:

$$\xi \sim l_{IR} \propto \kappa^{-1/2}. \quad (30)$$

Результаты настоящей работы имеют большую значимость для физики нанокомпозитов. Ранее было показано, что в сильно неупорядоченной среде с жесткими включениями нанометровых размеров вокруг таких нановключений образовывается эффективная жесткая оболочка, для которой значения упругих модулей превышают значения объемных модулей упругости и зависят от степени беспорядка [12,13]. Так, например, расчеты с помощью метода молекулярной динамики полистирола с наночастицей SiO_2 показывают увеличение жесткости на расстоянии порядка 1.4 nm вокруг наночастицы [12]. При этом масштаб, который определяет толщину такой оболочки, в точности соответствует масштабу неаффинных деформаций ξ , полученный в настоящей работе. Это приводит к увеличению эффективного объема наночастиц и к увеличению их влияния на макроскопические упругие свойства нанокомпозитов, что особенно заметно при близких значениях линейных размеров наночастиц и масштаба неоднородности ξ . При этом наблюдается экспоненциальный спад упругих модулей вблизи жесткой наночастицы в зависимости от расстояния до нее. Данный факт подчеркивает взаимосвязь локальных упругих свойств и неаффинных деформаций в системах с сильным беспорядком. Аналогичное поведение упругих модулей наблюдается и вблизи перехода между аморфными и кристаллическими слоистыми структурами [11]. Наличие переходных фаз между разными по своей структуре областями является проявлением неоднородности локальных деформаций и напрямую связано с беспорядком в таких структурах.

Полученные в настоящей работе оригинальные результаты по исследованию пространственных корреляций неаффинных деформаций могут быть подтверждены молекулярно-динамическими расчетами. Молекулярно-динамическое моделирование позволяет рассматривать различные аморфные и полимерные системы, каждая

из которых может характеризоваться своим масштабом неаффинности ξ . Для некоторых аморфных веществ радиус неаффинности оценивался порядка десяти типичных межатомных или межмолекулярных расстояний [1,7]. Для полученных молекулярно-динамических данных зависимость корреляций неаффинных деформаций может быть сопоставлена с теоретической зависимостью (29). Однако при этом стоит учитывать векторный характер смещений и рассматривать корреляторы дивергенции и ротора поля неаффинных смещений. Первый из них соответствует корреляции между вариациями плотности вещества, возникающей при деформации, а второй — корреляции между локальными вращениями вещества. Ожидается, что такие корреляторы качественно будут иметь найденную зависимость (29) для скалярной модели смещений. При этом A, B и ξ являются подгоночными параметрами. Из сопоставления результатов можно оценить масштаб неоднородности структуры ξ . Работа в этом направлении нами активно проводится, и ее результаты будут рассмотрены нами в ближайшем будущем.

Полученные в рамках теории случайных матриц соотношения способны помочь исследовать корреляционные свойства неаффинных деформаций на ненулевой частоте $\omega \neq 0$. Это особенно актуально при исследовании вязкоупругих колебательных свойств аморфных систем. Также интерес представляет исследование корреляционных свойств неаффинных деформаций вблизи границ между средами с различным значением объемных модулей упругости, что особенно актуально для нанокомпозитных аморфных систем. При этом, в соответствии с работой [13], для правильного описания особенностей таких систем каждая k -я связь системы должна характеризоваться своим параметром γ_k . Полученные соотношения могут помочь и при решении данной задачи.

6. Заключение

В данной работе были исследованы корреляционные свойства неаффинных деформаций в аморфных твердых телах. Применяя модель случайных матриц и разработанную диаграммную технику, были получены аналитические выражения для парного коррелятора неаффинных смещений в приближении нулевых частот и однородной изотропной неупорядоченной системы вдали от ее границ. Полученные матричные соотношения были проанализированы в непрерывном пределе, где каждый атом или связь характеризуются своими положениями в пространстве, а действующие над ними функции являются гладкими и непрерывными.

Показано, что коррелятор градиентов неаффинных смещений состоит из дельта-коррелированной компоненты (белый шум) и экспоненциально убывающего антикорреляционного вклада. Характерный масштаб ξ , стоящий в экспоненте, описывает масштаб неоднородности исследуемой среды и связан с параметром беспорядка

ка κ масштабным соотношением $\xi \propto \kappa^{-1/2}$. Полученные результаты играют большую роль для изучения вязкоупругих свойств аморфных тел.

Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда в рамках реализации проекта № 22-72-10083.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Приложение 1

Рассмотрим действие матрицы \hat{C}^k в точке расположения \mathbf{r}^k связи k на некоторую плавную функцию $h(\mathbf{r}_i)$, которая зависит от координаты i -го атома \mathbf{r}_i . Для этого разложим $h(\mathbf{r}_i)$ вблизи точки k :

$$h(\mathbf{r}_i) \simeq h(\mathbf{r}^k) + \sum_{\alpha=\{x,y,z\}} \frac{\partial h(\mathbf{r}^k)}{\partial \alpha} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}^k)_\alpha, \quad (\text{A.31})$$

где индекс α нумерует пространственные декартовы координаты и обозначает проекцию вектора.

Учтем важное свойство трансляционной инвариантности, которое накладывает ограничение на вид матрицы силовых констант в виде правила сумм $\sum_i \Phi_{ij} = \sum_j \Phi_{ij} = 0$. Такое правило следует из того, что потенциальная энергия системы, связанная с $\hat{\Phi}$ соотношением (2), не меняется при сдвиге системы как целой, т.е. инвариантна при замене u_i на $u_i + \text{const}$. Как следует из формул (10)–(11), это приводит к тому, что правило сумм накладывается и на ковариационную матрицу:

$$\sum_{i=1}^N C_{ij}^k = \sum_{j=1}^N C_{ij}^k = 0. \quad (\text{A.32})$$

Тогда, с учетом соотношений (A.31)–(A.32), действие матрицы $\hat{C}^{(k)}$ в точке расположения \mathbf{r}^k связи k на $h(\mathbf{r}_i)$ можно записать в виде

$$\sum_i C_{ij}^k h(\mathbf{r}_i) = \sum_\alpha \frac{\partial h(\mathbf{r}^k)}{\partial \alpha} \sum_i r_{i\alpha} C_{ij}^k. \quad (\text{A.33})$$

Аналогичным образом, рассматривая две плавные функции координат $h_1(\mathbf{r}_i)$ и $h_2(\mathbf{r}_j)$, можно получить следующее соотношение:

$$\sum_{i,j} C_{ij}^k h_1(\mathbf{r}_i) h_2(\mathbf{r}_j) = \sum_{\alpha,\beta} \frac{\partial h_1(\mathbf{r}^k)}{\partial \alpha} \frac{\partial h_2(\mathbf{r}^k)}{\partial \beta} \chi_{\alpha\beta}^k. \quad (\text{A.34})$$

в котором

$$\chi_{\alpha\beta}^k = \sum_{i,j} r_{i\alpha} r_{j\beta} C_{ij}^k \quad (\text{A.35})$$

является тензором второго ранга. В случае изотропной среды тензор $\chi_{\alpha\beta}^k$ является диагональным с равными компонентами. Кроме того, при рассмотрении однородной среды, когда связи не различаются между собой, тензор $\chi_{\alpha\beta}^k$ не зависит от номера связи k :

$$\chi_{\alpha\beta}^k = \chi \delta_{\alpha\beta}, \quad \chi = \frac{1}{3K} \sum_{ijk} \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_j C_{ij}^k, \quad (\text{A.36})$$

где (\cdot) обозначает скалярное произведение векторов. Таким образом, с учетом выражения (A.36), уравнение (A.34) можно представить в следующем виде:

$$\sum_{i,j} C_{ij}^k h_1(\mathbf{r}_i) h_2(\mathbf{r}_j) = \chi \nabla_{\mathbf{r}^k} h_1(\mathbf{r}^k) \cdot \nabla_{\mathbf{r}^k} h_2(\mathbf{r}^k), \quad (\text{A.37})$$

где операция $\nabla_{\mathbf{r}^k}$ в декартовой системе координат $\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\}$ означает взятие градиента по координате \mathbf{r}^k :

$$\nabla_{\mathbf{r}^k} = \frac{\partial}{\partial r_x^k} \mathbf{e}_x + \frac{\partial}{\partial r_y^k} \mathbf{e}_y + \frac{\partial}{\partial r_z^k} \mathbf{e}_z. \quad (\text{A.38})$$

Найденное соотношение (A.37) также имеет место при рассмотрении действия матрицы \hat{C}^k в точке расположения \mathbf{r}^k связи k на плавную пространственную функцию $h(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$, которая зависит от двух координат атомов i и j :

$$\sum_{i,j} C_{ij}^k h(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \chi \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \Big|_{\mathbf{r}_i=\mathbf{r}_j=\mathbf{r}^k}. \quad (\text{A.39})$$

Полученные в данном Разделе соотношения позволяют перейти к непрерывному пределу и проанализировать пространственные свойства коррелятора неаффинных деформаций \mathcal{R}^{na} .

Приложение 2

Исходя из уравнения (16), \hat{D} является резольвентой для матрицы $\kappa^2 \hat{T}$, и элементы D^{kl} удовлетворяют следующему уравнению:

$$D^{kl} - \kappa^2 \sum_m T^{ml} D^{km} = \delta_{kl}, \quad (\text{A.40})$$

где δ_{kl} — символ Кронекера.

Для нахождения функции $D(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^l)$, действующей в непрерывном представлении и зависящей от двух координат связей \mathbf{r}^k и \mathbf{r}^l , разложим $D(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^m)$ вблизи связи l :

$$\begin{aligned} D(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^m) &\simeq D(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^l) + \sum_\alpha D_\alpha^{(0,1)}(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^l) (\mathbf{r}^m - \mathbf{r}^l)_\alpha \\ &+ \sum_{\alpha,\beta} \frac{D_{\alpha\beta}^{(0,2)}(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^l)}{2} (\mathbf{r}^m - \mathbf{r}^l)_\alpha (\mathbf{r}^m - \mathbf{r}^l)_\beta, \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

где запись $(0,1)$ и $(0,2)$ обозначает взятие первой и второй производных по соответствующей переменной. Тогда

$$\sum_m T^{ml} D(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^m) = D(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^l) \sum_m T^{ml} + \sum_{\alpha, \beta} D_{\alpha\beta}^{(0,2)}(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^l) g_{\alpha\beta}^l, \quad (\text{A.42})$$

где был учтен симметричный вид матрицы \hat{T} , который следует из ее определения (17), в результате чего $\sum_m (\mathbf{r}^m - \mathbf{r}^l)_\alpha T^{ml} = 0$. Тензор $g_{\alpha\beta}^l$ определен как

$$g_{\alpha\beta}^l = \frac{1}{2} \sum_m (\mathbf{r}^m - \mathbf{r}^l)_\alpha (\mathbf{r}^m - \mathbf{r}^l)_\beta T^{ml} \quad (\text{A.43})$$

и является тензором второго ранга. В случае изотропной среды тензор $g_{\alpha\beta}^l$ является диагональным с равными компонентами. Кроме того, при рассмотрении однородной среды, когда связи не различаются между собой, тензор $g_{\alpha\beta}^l$ не зависит от номера связи l :

$$g_{\alpha\beta}^l = g \delta_{\alpha\beta}, \quad g = \frac{1}{6K} \sum_{m,l} T^{ml} (\mathbf{r}^m - \mathbf{r}^l)^2. \quad (\text{A.44})$$

Как следует из соотношений (12)–(14),

$$\sum_m T^{ml} = \sum_l T^{ml} = \frac{1 - \kappa}{\kappa^2}, \quad (\text{A.45})$$

поэтому для $\kappa \ll 1$ имеем соотношение $g \propto \kappa^{-2}$.

Таким образом, с учетом полученных выражений (A.44) и (A.45), уравнение (A.42) представляется в виде

$$\sum_m T^{ml} D(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^m) = \frac{(1 - \kappa)}{\kappa^2} D(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^l) + g \Delta_{\mathbf{r}^l} D(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^l), \quad (\text{A.46})$$

где $\Delta_{\mathbf{r}^l}$ означает оператор Лапласа, действующий по координате \mathbf{r}^l расположения связи l , который в декартовой системе координат $\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\}$ имеет вид

$$\Delta_{\mathbf{r}^l} = \nabla_{\mathbf{r}^l} \cdot \nabla_{\mathbf{r}^l} = \frac{\partial^2}{\partial (r_x^l)^2} \mathbf{e}_x + \frac{\partial^2}{\partial (r_y^l)^2} \mathbf{e}_y + \frac{\partial^2}{\partial (r_z^l)^2} \mathbf{e}_z. \quad (\text{A.47})$$

С учетом найденного выражения (A.46), уравнение (A.40) в непрерывном пределе принимает следующий вид:

$$\kappa D(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^l) - g \kappa^2 \Delta_{\mathbf{r}^l} D(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^l) = \delta(\mathbf{r}^k - \mathbf{r}^l), \quad (\text{A.48})$$

где $\delta(\mathbf{r})$ соответствует дельта-функции Дирака. Это уравнение на функцию $D(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^l)$ имеет вид уравнения Гельмгольца, решением которого для трехмерной системы является следующая функция, зависящая от разницы координат $|\mathbf{r}^k - \mathbf{r}^l|$:

$$D(|\mathbf{r}^k - \mathbf{r}^l|) = \frac{e^{-|\mathbf{r}^k - \mathbf{r}^l|/\xi}}{4\pi\kappa\xi^2|\mathbf{r}^k - \mathbf{r}^l|}, \quad (\text{A.49})$$

где параметр $\xi = \sqrt{g\kappa}$ определяет некоторый пространственный масштаб. Поскольку $g \propto \kappa^{-2}$ для $\kappa \ll 1$, то $\xi \propto \kappa^{-1/2}$.

Аналогичным образом, для нахождения резольвенты $G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ в непрерывном представлении как функции двух координат атомов решается уравнение Пуассона

$$\Delta G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{1}{\kappa\chi} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j). \quad (\text{A.50})$$

Для трехмерной системы решением этого уравнения является следующая функция, зависящая от разницы координат $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$:

$$G(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = -\frac{1}{4\pi\kappa\chi|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (\text{A.51})$$

Список литературы

- [1] F. Leonforte, R. Boissière, A. Tanguy, J.P. Wittmer, J.-L. Barrat, Phys. Rev. B **72**, 22, 224206 (2005).
- [2] C.E. Maloney. Phys. Rev. Lett. **97**, 3, 035503 (2006).
- [3] R. Jana, L. Pastewka. J. Phys. Mater. **2**, 4, 045006 (2019).
- [4] Q. Wen, A. Basu, P.A. Janmey, A.G. Yodh, Soft Matter **8**, 31, 8039 (2012).
- [5] E. Del Gado, P. Ilg, M. Kröger, H.C. Öttinger. Phys. Rev. Lett. **101**, 9, 095501 (2008).
- [6] C. Goldenberg, A. Tanguy, J.-L. Barrat. Europhysics Letters (EPL) **80**, 1, 16003 (2007).
- [7] F. Léonforte, A. Tanguy, J.P. Wittmer, J.-L. Barrat. Phys. Rev. Lett. **97**, 5, 055501 (2006).
- [8] M. Baggioli, M. Landry, A. Zacccone. Phys. Rev. E **105**, 2, 024602 (2022).
- [9] S. Gelin, H. Tanaka, A. Lemaitre. Nat. Mater. **15**, 11, 1177 (2016).
- [10] S. Chakraborty, K. Ramola. Soft Matter **20**, 25, 4895 (2024).
- [11] А.А. Семенов, Д.А. Коных, Я.М. Бельтюков. ФТТ **64**, 8, 1039 (2022).
- [12] Y.M. Beltukov, D.A. Conyuh, I.A. Solov'yov. Phys. Rev. E **105**, 1, L012501 (2022).
- [13] D.A. Conyuh, A.A. Semenov, Y.M. Beltukov. Phys. Rev. E **108**, 4, 045004 (2023).
- [14] A. Lemaitre, C. Maloney. J. Stat. Phys. **123**, 2, 415 (2006).
- [15] C. Maloney, A. Lemaitre. Phys. Rev. Lett. **93**, 19, 195501 (2004).
- [16] I. Kriuchevskiy, V.V. Palyulin, R. Milkus, R.M. Elder, T.W. Sirk, A. Zacccone. Phys. Rev. B **102**, 2, 024108 (2020).
- [17] S. Alexander. Phys. Rep. **296**, 2, 65 (1998).
- [18] E. Lerner, E. Bouchbinder. Phys. Rev. E **97**, 3, 032140 (2018).
- [19] B.A. DiDonna, T.C. Lubensky. Phys. Rev. E **72**, 6, 066619 (2005).
- [20] A. Tanguy, J.P. Wittmer, F. Leonforte, J.-L. Barrat. Phys. Rev. B **66**, 17, 174205 (2002).
- [21] Y.M. Beltukov, V.I. Kozub, D.A. Parshin. Phys. Rev. B **87**, 13, 134203 (2013).
- [22] D.A. Conyuh, Y.M. Beltukov. Phys. Rev. B **103**, 10, 104204 (2021).
- [23] M. Tømterud, S.D. Eder, C. Büchner, L. Wondraczek, I. Simonsen, W. Schirmacher, J.R. Manson, B. Holst. Nat. Phys. **19**, 12, 1910 (2023).
- [24] Я.М. Бельтюков, Д.А. Паршин. ФТТ **53**, 1, 142 (2011).
- [25] L. Pastur, M. Shcherbina. Eigenvalue Distribution of Large Random Matrices. American Mathematical Society, (2011). 601 p.

- [26] М.В. Садовский. Диаграмматика. Институт компьютерных исследований, Екатеринбург (2019). 294 с.
- [27] B. Holst, G. Alexandrowicz, N. Avidor, G. Benedek, G. Bracco, W.E. Ernst, D. Farías, A.P. Jardine, K. Lefmann, J.R. Manson, R. Marquardt, S.M. Artés, S.J. Sibener, J.W. Wells, A. Tamtögl, and W. Allison. Phys. Chem. Chem. Phys. **23**, 13, 7653 (2021).

Редактор Ю.Э. Китаев