

04,13

Корреляционный масштаб неоднородного упругого отклика аморфных сред

© Д.В. Бабин^{1,2}, Д.А. Конюх¹, 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 2 апреля 2026 г.

В окончательной редакции 6 мая 2026 г.

Принята к публикации 6 мая 2026 г.

В рамках подхода теории случайных матриц исследуются корреляционные свойства упругого отклика аморфных систем на внешние силы. Для описания неупорядоченных сред вблизи устойчивого положения равновесия применяется коррелированный ансамбль Вишарта. Показано, что величина беспорядка характеризуется наибольшим собственным значением θ_0 корреляционного супероператора, которое для сильно неупорядоченных систем приближается к критическому значению, равному единице. При этом в корреляционных функциях отклика возникает корреляционный масштаб длин $\xi \sim (1 - \theta_0)^{-1/2}$, который может значительно превосходить межатомные расстояния, разделяя микроскопическую область сильных флуктуаций и макроскопический континуальный режим. Для систем, близких к изостатическим, найденное соотношение согласуется с критическим поведением $\xi \sim (z - z_c)^{-1/2}$ в зависимости от среднего координационного числа z . Полученные результаты обобщают описание упругого отклика на различные типы возмущений (однородные деформации, локальные силы) и устанавливают связь между масштабом неоднородности, неаффинностью деформаций и критическими явлениями в системах с беспорядком.

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

DOI: 10.61011/FTT.2026.05.63443.9371

1. Введение

Аморфные твердые тела, к которым относятся неорганические стекла, металлические стекла, аморфные полимеры и другие неупорядоченные диэлектрики, характеризуются отсутствием дальнего порядка, что обуславливает качественное отличие их механических и колебательных свойств от свойств кристаллов [1–4]. В частности, для таких систем наблюдаются универсальные аномалии тепловых и акустических свойств при низких температурах [5–7]. Несмотря на длительную историю исследований, микроскопическая природа этих эффектов остается предметом активного обсуждения.

С механической точки зрения одной из ключевых особенностей аморфных материалов является неупорядоченный характер упругого отклика на внешнее воздействие [8]. В отличие от кристаллов, где атомные смещения в значительной степени следуют аффинному полю деформации, в неупорядоченных системах возникают дополнительные флуктуирующие в пространстве неаффинные смещения, которые сильно влияют на эффективные упругие модули и локальные напряжения [9,10]. На достаточно малых масштабах, где влияние таких флуктуирующих смещений существенно, теория континуальной упругости, как ожидается, перестает быть применимой [11]. Переход между этими двумя режимами

характеризуется некоторой длиной неоднородности, которая, по некоторым оценкам, может достигать десятков межатомных расстояний [12,13].

Вопрос о природе и универсальности масштаба неоднородности находится в центре современных исследований аморфных материалов. Важность его изучения обусловлена тем, что он проявляет себя в широком круге явлений — от квазилокальных низкочастотных колебаний, определяющих низкотемпературные аномалии стекол [14–16], до характера затухания упругих полей, создаваемых точечными дефектами [17–19] и нановключениями [20]. Кроме аморфных тел, масштаб неоднородности изучался и в гранулярных телах вблизи порога потери жесткости (англ. *jamming transition*) [21–23]. Характерные масштабы обнаружены также в модели деформационно-упрочняющихся сетей [24], в нелокальности гранулярных течений [25], а также в корреляциях флуктуаций объемного модуля упругости в случайных сетях [26].

Одним из ключевых аспектов, требующих дальнейшего осмысления, является взаимосвязь между пространственной неоднородностью структуры, неаффинной природой упругого отклика и универсальными закономерностями в динамике аморфных систем. Ранее было показано, что в стеклах различной природы существует универсальный пространственный масштаб порядка

1 nm, который играет столь же важную роль, как размер элементарной ячейки для кристаллов [27–29]. Данный масштаб взаимосвязан с избыточной (по сравнению с дебаевской) плотностью колебательных состояний в области 2–10 meV (так называемый бозонный пик), который наблюдается практически во всех стеклах [28]. Более того, существование характерного масштаба позволяет объяснить выполнение критерия Иоффе–Регеля для фононов в области плато теплопроводности, где длина свободного пробега фононов оказывается сопоставимой с длиной волны и корреляционной длиной структуры [30]. Эти данные указывают на то, что неоднородности структуры с характерным масштабом ~ 1 nm играют фундаментальную роль в формировании физических свойств аморфных материалов.

Для исследования аморфного состояния активно применяется подход, основанный на теории случайных матриц [31–34]. В рамках этого подхода матрица силовых констант аморфного тела моделируется с использованием ансамблей случайных матриц, в частности ансамбля Вишарта, который учитывает механическую устойчивость системы. Однако не каждый ансамбль случайных матриц учитывает особые корреляции между элементами матрицы силовых констант, что важно при описании аморфного состояния. Поэтому в последние годы развивается подход с использованием коррелированного ансамбля Вишарта, который позволяет описать бозонный пик [35], переход Иоффе–Регеля [36], наличие квазилокальных мод [37], а также упругие особенности аморфных нанокомпозитов [38]. При этом, как показывают эти работы, перечисленные явления тесно связаны с существованием в аморфных материалах масштаба неоднородности.

В настоящей работе подход теории случайных матриц используется для исследования пространственной структуры механического упругого отклика аморфных систем. Основное внимание уделено анализу корреляционных функций отклика и выявлению характерного масштаба длины неоднородности, разделяющего микроскопический режим с сильными флуктуациями и макроскопический континуальный режим. Особый интерес представляет установление связи между этим масштабом и параметрами модели, характеризующими беспорядок в системе.

2. Отклик на внешнее воздействие

Рассмотрим механический отклик аморфного твердого тела, охлажденного до нулевой температуры, на некоторую небольшую внешнюю силу. Такая сила может быть распределена по поверхности аморфного тела за счет приложенного механического напряжения, а также может быть вызвана локальным упругим воздействием на аморфную систему. Последний тип воздействия реализуется, например, при непосредственном контакте зонда атомно-силовой микроскопии с аморфной сре-

дой [39], а также вследствие концентрации напряжений в окрестности нановключений [40–42] или вблизи аномально мягких областей аморфного тела [15].

Будем рассматривать такое возмущение в виде внешних сил $\mathbf{f}_i$, при котором охлажденная до нулевой температуры система остается вблизи локального положения равновесия и не достигает других локальных минимумов потенциальной энергии. Тогда в линейном приближении упругий отклик в виде смещений атомов $\mathbf{u}_i$ определяется следующей системой линейных уравнений:

$$\sum_{j\beta} \Phi_{i\alpha,j\beta} u_{j\beta} = f_{i\alpha}, \quad (1)$$

где $\hat{\Phi}$ — матрица силовых констант. Индексы i и j нумеруют атомы в системе ($1 \dots N$), а α и β обозначают декартовы индексы соответствующих атомов (x, y, z для трехмерных систем или x, y для двумерных систем). Элементы матрицы силовых констант $\hat{\Phi}$ определяются вторыми производными полной потенциальной энергии U по положению атомов:

$$\Phi_{i\alpha,j\beta} = \left. \frac{\partial^2 U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)}{\partial r_{i\alpha} \partial r_{j\beta}} \right|_{\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i^{\text{eq}}} \quad (2)$$

при равновесных атомных координатах $\mathbf{r}_i^{\text{eq}}$.

Конкретные равновесные координаты $\mathbf{r}_1^{\text{eq}}, \mathbf{r}_2^{\text{eq}}, \dots, \mathbf{r}_N^{\text{eq}}$ зависят от процесса охлаждения аморфообразующего материала из расплава. Следовательно, компоненты матрицы силовых констант $\hat{\Phi}$ зависят от конкретной рассматриваемой системы и могут варьироваться в широком диапазоне [43]. В результате, под действием внешнего возмущения в системе возникают не только макроскопические деформации, но и локальные смещения атомов, которые зависят от степени разупорядоченности.

Так как при каждой реализации аморфной системы равновесные координаты атомов оказываются разными, мы вводим понятие референсной решетки — простой кубической решетки (в двумерном пространстве — квадратной), плотность узлов которой равна средней плотности атомов аморфной системы. При этом каждому атому будем сопоставлять определенный расположенный рядом узел референсной решетки. При механическом воздействии на систему каждый атом смещается на некоторый вектор $\mathbf{u}_i$, ассоциируемый с соответствующим узлом референсной решетки. Такая процедура позволяет regularизировать нахождение корреляционных функций смещений атомов и не вносит существенных искажений в крупномасштабном поведении корреляционных функций.

Определим флуктуирующую в пространстве компоненту смещений $\mathbf{u}_i^{\Pi}$ как разницу между самими смещениями и их усредненными значениями [44]:

$$\mathbf{u}_i^{\Pi} = \mathbf{u}_i - \langle \mathbf{u}_i \rangle, \quad (3)$$

где скобки $\langle \dots \rangle$ означают усреднение по разным реализациям аморфной системы (усреднение по ансамблю).

Усредненная компонента смещений

$$\bar{u}_{i\alpha} \equiv \langle u_{i\alpha} \rangle = \sum_{j\beta} G_{i\alpha,j\beta} f_{j\beta} \quad (4)$$

определяет средний отклик вещества на приложенное возмущение, которое является одинаковым для всего ансамбля неупорядоченных систем, что в соответствии с уравнением (1) выражается через резольвенту $G = \langle \hat{\Phi}^{-1} \rangle$.

Задача определения макроскопической деформации неограниченной упругой среды под действием сосредоточенной силы известна как задача Кельвина [45]. Для заданного воздействия $\mathbf{f}_i$ средний отклик $\bar{\mathbf{u}}_i$ в линейном приближении может быть найден путем решения уравнения (4). Рассматриваемая аморфная среда обладает однородными статистическими свойствами, в результате чего резольвента $G_{i\alpha j\beta}$ зависит только от разности координат $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$. Это позволяет определить функцию Грина как Фурье-преобразование резольвенты

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{ij} G_{i\alpha j\beta} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}, \quad (5)$$

где вектора $\mathbf{r}_i$ и $\mathbf{r}_j$ соответствуют координате i -го и j -го атома.

Аналогичным образом, Фурье-преобразование усредненных атомных смещений и сил имеет следующий вид:

$$\bar{u}_{i\alpha}(\mathbf{q}) = \sum_i \bar{u}_{i\alpha} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_i}, \quad (6)$$

$$f_{i\alpha}(\mathbf{q}) = \sum_i f_{i\alpha} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_i} \quad (7)$$

Следовательно, уравнение (4) принимает вид

$$\bar{u}_{i\alpha}(\mathbf{q}) = G_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) f_{i\beta}(\mathbf{q}), \quad (8)$$

где используется правило суммирования Эйнштейна для декартовых индексов. При этом для изотропной упругой среды функция Грина выражается через модули Ламе λ и μ и имеет универсальный для любой размерности тензорный вид [46]:

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\delta_{\alpha\beta}}{q^2} - \frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} \frac{q_{\alpha} q_{\beta}}{q^4} \right). \quad (9)$$

Обратное Фурье-преобразование функции Грина, согласно математической терминологии, является тензором Грина $G_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ (англ. *elastic Green tensor*) [47]:

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V_b} \int_{V_b} G_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d\mathbf{q}, \quad (10)$$

где интеграл берется по первой зоне Бриллюэна объемом V_b референсной решетки, а результат интегрирования зависит от размерности системы. При этом $V_b = n_{\text{at}}(2\pi)^d$, где n_{at} — концентрация атомов, а d —

размерность пространства ($d = 3$ для трехмерных и $d = 2$ для двумерных систем).

Классическая теория упругости не учитывает микроскопическую природу смещений и описывает поведение только их усредненной компоненты (4) с помощью тензора Грина (10). Такое описание применимо к аморфным системам только на масштабах, превышающих их характерный масштаб неоднородности. На масштабе неоднородности проявляется дополнительная флуктуирующая составляющая смещений, требующая описания на микроскопическом уровне. Получение континуальных уравнений, учитывающих неоднородность смещений и описывающих масштаб неоднородности, является предметом данной работы.

Для исследования этого вопроса мы рассматриваем парные пространственные корреляции между флуктуирующими смещениями $\mathbf{u}_i^{\text{fl}}$ и $\mathbf{u}_j^{\text{fl}}$, вызванными действием внешней силы:

$$K_{i\alpha,j\beta} = \langle u_{i\alpha}^{\text{fl}} u_{j\beta}^{\text{fl}} \rangle. \quad (11)$$

В соответствии с уравнениями (1) и (3) такие корреляции выражаются через матрицу силовых констант:

$$K_{ab} = \sum_{a'b'} \left(\langle (\Phi^{-1})_{aa'} (\Phi^{-1})_{bb'} \rangle - G_{aa'} G_{bb'} \right) f_{a'} f_{b'}, \quad (12)$$

где для упрощения обозначений здесь и далее при последующем анализе мы заменяем объединенные индексы $i\alpha$ и $j\beta$ на более простые индексы a и b соответственно. Число возможных значений таких индексов равно произведению размерности пространства d на число атомов N , то есть равняется числу степеней свободы dN .

Как показывает выражение (12), для получения корреляций K_{ab} необходимо провести усреднение по разным реализациям матрицы силовых констант, соответствующим ансамблю неупорядоченных систем. Такая процедура усреднения представляет собой основную задачу, которую мы решаем в рамках теории случайных коррелированных матриц.

3. Теория случайных матриц

Ключевой аспект применения теории случайных матриц к изучению механических свойств твердых тел заключается в требовании их механической устойчивости, что соответствует положительной определенности матрицы силовых констант $\hat{\Phi}$. Существует также симметричное правило перестановки $\Phi_{ab} = \Phi_{ba}$, которое следует из определения $\hat{\Phi}$ (2). Вышеупомянутые условия эквивалентны возможности представления $\hat{\Phi}$ в следующей матричной форме [33]:

$$\Phi_{ab} = \sum_k A_{ak} A_{bk}, \quad (13)$$

что можно записать как $\hat{\Phi} = \hat{A} \cdot \hat{A}^T$, где $(\cdot)$ означает свертку по одному внутреннему индексу.

Матрица $\hat{A}$ в соотношении (13) может быть интерпретирована следующим образом. Первый индекс a обозначает степени свободы, а второй индекс k — связи внутри системы ($1 \dots N_b$), каждая из которых обладает положительно определенной квадратичной потенциальной энергией

$$U_k = \frac{1}{2} \left(\sum_a A_{ak} u_a \right)^2. \quad (14)$$

Такое рассмотрение соответствует тому, что полная энергия системы выражается через матрицу $\hat{\Phi}$ как

$$U = \sum_k U_k = \frac{1}{2} \sum_{ab} \Phi_{ab} u_a u_b, \quad (15)$$

что соответствует ее определению (2). Число связей в системе N_b может отличаться от числа степеней свободы dN , поэтому матрица $\hat{A}$ не обязательно квадратная и имеет размер $dN \times N_b$.

Наличие беспорядка в атомных расположениях приводит к случайному характеру матрицы $\hat{A}$. Поэтому для описания аморфного состояния можно предположить, что ненулевые элементы матрицы A_{ak} являются случайными числами. Следуя данным работы [38], мы рассматриваем коррелированные гауссовы случайные числа A_{ak} с нулевым средним и ковариацией

$$\langle A_{ak} A_{bl} \rangle = C_{ab,kl}. \quad (16)$$

Для такой случайной матрицы $\hat{A}$ матричный ансамбль $\hat{A} \cdot \hat{A}^T$ образует коррелированный ансамбль Вишарта.

Ковариационная матрица $\hat{C}$ играет ключевую роль в описании общих свойств сильно разупорядоченных систем, так как заключает в себе их основные особенности. Разреженная структура $\hat{C}$ соответствует тому, что в реальных аморфных твердых телах короткодействующие взаимодействия между атомами преобладают над дальнедействующими. В то же время она обладает рядом важных особенностей, которые следуют из определения (16) и отражают основные свойства механической системы.

Так как полная энергия системы U не изменяется при перемещении или вращении системы целиком, существуют правила суммирования для матрицы $\hat{A}$. Как следует из уравнений (2), (13), трансляционная инвариантность при перемещении всей системы на постоянный вектор приводит к правилу суммирования

$$\sum_i A_{i\alpha,k} = 0 \quad (17)$$

для любого декартова индекса α и числа связей k . При повороте системы на бесконечно малый угол смещения атомов выражаются как $u_{i\alpha} = \sum_\beta \omega_{\alpha\beta} r_{i\beta}$, где $\omega_{\alpha\beta}$ — элементы бесконечно малого тензора вращения [48]. Поэтому, как следует из уравнений (2) и (13), поворотная инвариантность приводит к правилу

$$\sum_i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} r_{i\beta} A_{i\alpha,k} = 0 \quad (18)$$

для любого числа связей k и декартова индекса γ , где $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ — символ Леви-Чивиты. Полученные соотношения (17) и (18) для матрицы $\hat{A}$ накладывают соответствующие ограничения на форму корреляционной матрицы $\hat{C}$:

$$\sum_i C_{i\alpha\beta,kl} = \sum_j C_{i\alpha\beta,kl} = 0, \quad (19)$$

$$\sum_i \epsilon_{\alpha\gamma\eta} r_{i\gamma} C_{i\alpha\beta,kl} = \sum_j \epsilon_{\beta\gamma\eta} r_{j\gamma} C_{i\alpha\beta,kl} = 0. \quad (20)$$

Учет корреляций приводит к специфической статистике частот аморфной системы, которая является предметом многих исследований [9,35], что помогло описать общеизвестные колебательные феномены аморфных твердых тел, такие как бозонный пик и переход Иоффе–Регеля при трансформации фононов в диффузионный тип колебаний [33,35]. При этом, как было показано в работе [38] с помощью диаграммной техники, корреляционная матрица $\hat{C}$ связана с резольвентой $\hat{G}$ через связанную систему уравнений Дайсона

$$\hat{G} = \frac{1}{\hat{C} : \hat{G}^b}, \quad (21)$$

$$\hat{G}^b = \frac{1}{\hat{C}^T : \hat{G} + 1}, \quad (22)$$

где двоеточие $(:)$ означает свертку по двум внутренним индексам, а транспонирование матрицы $\hat{C}$ означает перестановку левых и правых индексов: $C_{kl,i\alpha\beta}^T = C_{i\alpha\beta,kl}$. Такое линейное преобразование, переводящее одну матрицу (оператор) в другую матрицу (оператор), также известно как действие супероператора.

4. Пространственная зависимость корреляций флуктуирующих смещений

Применяя разработанную диаграммную технику для коррелированного ансамбля Вишарта случайных матриц, описанную в работе [38], мы произвели усреднение по различным реализациям системы и получили выражение для коррелятора флуктуирующих смещений (12) в следующем матричном виде:

$$K_{ab} = K_{ab}^{\text{ld}} + K_{ab}^{\text{tw}}, \quad (23)$$

в котором лестничный K^{ld} и веерный K^{tw} вклады в корреляции

$$K_{ab}^{\text{ld}} = \sum_{a'b'c'd'} G_{aa'} G_{bb'} \mathcal{D}_{a'b'c'd'} \bar{u}_{c'} \bar{u}_{d'}, \quad (24)$$

$$K_{ab}^{\text{tw}} = \sum_{a'b'c'd'} G_{aa'} G_{bb'} \mathcal{D}_{a'd'c'b'} \bar{u}_{c'} \bar{u}_{d'}, \quad (25)$$

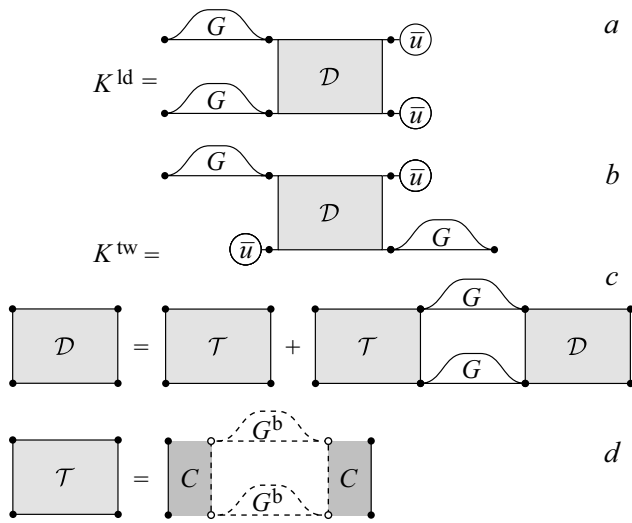


Рис. 1. Диаграммы для расчета корреляционных функций флуктуирующих смещений, соответствующие уравнениям (24)–(27).

выражаются через матрицу $\hat{\mathcal{D}}$, определяемую уравнением Дайсона

$$\hat{\mathcal{D}} = \hat{\mathcal{T}} + \hat{\mathcal{T}} : \hat{\mathcal{R}} : \hat{\mathcal{D}}. \quad (26)$$

Матрицы $\hat{\mathcal{R}}$ и $\hat{\mathcal{T}}$ имеют вид

$$\mathcal{T}_{ab,a'b'} = \sum_{klk'l'} C_{ab,kl} G_{kk'}^b G_{l'l'}^b C_{a'b',k'l'}, \quad (27)$$

$$\mathcal{R}_{ab,a'b'} = G_{aa'} G_{bb'} \quad (28)$$

Уравнения (24)–(27) соответствуют диаграммам *a*–*d* на рис. 1.

Матрицы $\hat{\mathcal{R}}$ и $\hat{\mathcal{T}}$ симметричны относительно транспонирования левой и правой пары индексов: $\hat{\mathcal{R}} = \hat{\mathcal{R}}^T$, $\hat{\mathcal{T}} = \hat{\mathcal{T}}^T$. Такие самосопряженные линейные супероператоры, действующие на матрицы, можно проанализировать с помощью решения обобщенной задачи на собственные значения

$$\hat{\mathcal{T}} : \hat{\mathcal{R}} : \hat{S}^{(v)} = \theta_v \hat{S}^{(v)} \quad (29)$$

где $\hat{S}^{(v)}$ — собственные матрицы, которые являются ортонормированными с весом $\hat{\mathcal{R}}$ в следующем смысле:

$$\hat{S}^{(v)} : \hat{\mathcal{R}} : \hat{S}^{(v')*} \equiv \text{Tr}[\hat{S}^{(v)} \cdot \hat{G} \cdot \hat{S}^{(v')*} \cdot \hat{G}] = N \delta_{vv'}. \quad (30)$$

В результате решения обобщенной задачи на собственные значения матрицы $\hat{\mathcal{R}}$ и $\hat{\mathcal{T}}$ можно разложить как

$$\mathcal{R}_{ab,a'b'} = \frac{1}{N} \sum_v (\hat{\mathcal{R}} : \hat{S}^{(v)})_{ab} (\hat{\mathcal{R}} : \hat{S}^{(v)*})_{a'b'}, \quad (31)$$

$$\mathcal{T}_{ab,a'b'} = \frac{1}{N} \sum_v S_{ab}^{(v)} \theta_v S_{a'b'}^{(v)*}. \quad (32)$$

Подставляя такой вид для $\hat{\mathcal{R}}$ и $\hat{\mathcal{T}}$ в уравнение Дайсона (26), найдем, что

$$\mathcal{D}_{ab,a'b'} = \frac{1}{N} \sum_v S_{ab}^{(v)} \frac{\theta_v}{1 - \theta_v} S_{a'b'}^{(v)*}. \quad (33)$$

Тогда выражения для лестничного (24) и всеерного (25) вкладов в корреляции флуктуирующих смещений можно представить в следующем виде:

$$K_{ab}^{\text{ld}} = \frac{1}{N} \sum_v (\hat{G} \cdot \hat{S}^{(v)} \cdot \hat{G})_{ab} \frac{\theta_v}{1 - \theta_v} (\bar{u} \cdot \hat{S}^{(v)*} \cdot \bar{u}), \quad (34)$$

$$K_{ab}^{\text{tw}} = \frac{1}{N} \sum_v (\hat{G} \cdot \hat{S}^{(v)} \cdot \bar{u})_a \frac{\theta_v}{1 - \theta_v} (\bar{u} \cdot \hat{S}^{(v)*} \cdot \hat{G})_b, \quad (35)$$

Для анализа полученных матричных выражений удобно перейти в пространство волновых векторов, определив Фурье-преобразование для функции двух координат следующим образом:

$$K_{\alpha\beta}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = \sum_{ij} K_{i\alpha j\beta} e^{i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_i - i\mathbf{q}_2 \mathbf{r}_j}. \quad (36)$$

Вследствие статистической однородности системы все собственные значения θ_v можно сгруппировать по волновому вектору $\mathbf{p}$, так как существует взаимно однозначное соответствие между индексом v и парой $(n\mathbf{p})$, где n — номер ветви. Это свойство аналогично теореме Блоха [49]. Другими словами, можно ввести соответствие $\theta_n(\mathbf{p}) = \theta_{(n\mathbf{p})}$, что является аналогом зонной структуры (см. рис. 2). Наличие такой зонной структуры не противоречит тому, что исходное аморфное тело является разупорядоченным, так как раскладываются корреляционные супероператоры, обладающие трансляционной симметрией. Введенная для удобства решетка

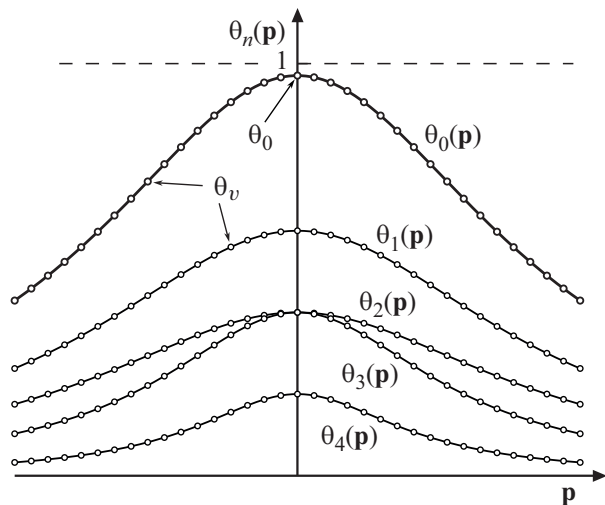


Рис. 2. Схематическая иллюстрация зон $\theta_n(\mathbf{p})$ (линии) для бесконечной системы и дискретных собственных значений θ_v (точки) для конечной системы с периодическими граничными условиями.

референсных точек не играет существенной роли до тех пор, пока $\mathbf{p}$ остается вблизи центра первой зоны Бриллюэна.

Учитывая это, введем Фурье-преобразование для собственных матриц $\bar{S}^{(v)}$ как

$$S_{\alpha\beta}^{(n)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = \sum_{ij} \sum_{\mathbf{p}} S_{i\alpha j\beta}^{(n\mathbf{p})} e^{i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_i - i\mathbf{q}_2 \mathbf{r}_j}. \quad (37)$$

Применяя Фурье-преобразование к уравнениям (34) и (35), получим выражение для коррелятора в пространстве волновых векторов:

$$K_{\alpha\beta}^{\text{ld/tw}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}_1) H_{\alpha'\beta'}^{\text{ld/tw}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) G_{\beta'\beta}(\mathbf{q}_2). \quad (38)$$

Для лестничного вклада

$$H_{\alpha\beta}^{\text{ld}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = \sum_n h_n(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) S_{\alpha\beta}^{(n)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2), \quad (39)$$

где

$$h_n(\mathbf{p}) = \frac{\theta_n(\mathbf{p})}{1 - \theta_n(\mathbf{p})} Y^{(n)}(\mathbf{p}), \quad (40)$$

$$Y^{(n)}(\mathbf{p}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \bar{u}_{\beta}(\mathbf{q}) S_{\beta\alpha}^{(n)*}(\mathbf{q}, \mathbf{q} - \mathbf{p}) \bar{u}_{\alpha}(\mathbf{p} - \mathbf{q}). \quad (41)$$

Для веерного вклада

$$H_{\alpha\beta}^{\text{tw}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = \frac{1}{N} \sum_{n,\mathbf{p}} F_{\alpha}^{(n)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}) \frac{\theta_n(\mathbf{p})}{1 - \theta_n(\mathbf{p})} \tilde{F}_{\beta}^{(n)}(\mathbf{q}_2, \mathbf{p}), \quad (42)$$

где

$$F_{\alpha}^{(n)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}) = S_{\alpha\beta}^{(n)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{p}) \bar{u}_{\beta}(\mathbf{q}_1 - \mathbf{p}), \quad (43)$$

$$\tilde{F}_{\beta}^{(n)}(\mathbf{q}_2, \mathbf{p}) = S_{\beta\alpha}^{(n)*}(\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2 - \mathbf{p}) \bar{u}_{\alpha}(\mathbf{p} - \mathbf{q}_2). \quad (44)$$

Взяв обратное Фурье-преобразование по первой зоне Бриллюэна референсной решетки

$$K_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{V_b^2} \iint_{V_b} K_{\alpha\beta}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) e^{-i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{q}_2 \mathbf{r}_2} d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \quad (45)$$

позволяет получить выражение для пространственной зависимости корреляций флуктуирующих смещений (23), которое в общем виде зависит от двух точек наблюдения $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ и состоит из двух вкладов:

$$K_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = K_{\alpha\beta}^{\text{ld}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + K_{\alpha\beta}^{\text{tw}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (46)$$

Лестничный вклад в корреляции имеет следующий вид:

$$K_{\alpha\beta}^{\text{ld}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = n_{\text{at}}^3 \iiint G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}') \times \sum_n h_n(\mathbf{r}') S_{\alpha'\beta'}^{(n)}(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) G_{\beta'\beta}(\mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}') d\mathbf{r}'_1 d\mathbf{r}'_2 d\mathbf{r}', \quad (47)$$

где

$$h_n(\mathbf{r}) = n_{\text{at}} \int D_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}') Y^{(n)}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (48)$$

$$D_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{V_b} \int \frac{\theta_n(\mathbf{p})}{1 - \theta_n(\mathbf{p})} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}} d\mathbf{p}. \quad (49)$$

Веерный вклад в корреляции имеет следующий вид:

$$K_{\alpha\beta}^{\text{tw}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = n_{\text{at}}^2 \iint \sum_n V_{\alpha}^{(n)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') D_n(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') \times \tilde{V}_{\beta}^{(n)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'') d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'', \quad (50)$$

где

$$V_{\alpha}^{(n)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') = n_{\text{at}} \int G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) F_{\alpha'}^{(n)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r}, \quad (51)$$

$$\tilde{V}_{\beta}^{(n)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'') = n_{\text{at}} \int G_{\beta'\beta}(\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}) \tilde{F}_{\beta'}^{(n)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') d\mathbf{r}, \quad (52)$$

В Приложении 1 и 2 к настоящей работе более подробно показан вывод полученных выражений.

5. Корреляционный масштаб

Супероператоры $\hat{\mathcal{R}}$ и $\hat{\mathcal{T}}$ являются положительными в том смысле, что они любую положительно полуопределенную матрицу $\hat{X}$ переводят в другую положительно полуопределенную матрицу $\hat{Y}$. К таким супероператорам применима теорема Перрона–Фробениуса, согласно которой наибольшее собственное значение θ_0 невырождено. В силу статистической изотропности системы это значение соответствует $\mathbf{p} = 0$. Поэтому вблизи $\mathbf{p} = 0$ можно считать, что

$$\theta_0(\mathbf{p}) = \theta_0 - \xi_0^2 p^2, \quad (53)$$

где ξ_0 — некоторый пространственный масштаб порядка межатомного расстояния или другого характерного масштаба структурного элемента в системе (например, размер мономера в полимерных системах или размер гранул в дисперсных средах). Разложение (53) применимо до тех пор, пока $\xi_0 p \ll 1$.

В случае отсутствия беспорядка амплитуда флуктуаций атомных смещений зануляется, и все собственные значения становятся равными нулю. В случае сильного беспорядка наибольшее собственное значение θ_0 близко к 1, и амплитуда флуктуирующих смещений расходится. Поэтому можно предположить, что в этом случае только верхняя ветвь близка к 1 и дает наибольший вклад в приведенные ранее выражения (см. рис. 2). Такое наблюдение существенно упрощает анализ полученных выражений и позволяет интерпретировать безразмерную величину θ_0 как универсальную величину, характеризующую степень беспорядка.

Учитывая разложение (53), согласно формуле (49), найдем функцию $D_0(\mathbf{r})$, которая имеет разный вид для систем различной размерности пространства:

$$D_0(\mathbf{r}) = \frac{K_0(r/\xi)}{2\pi\xi_0^2}, \quad d = 2, \quad (54)$$

$$D_0(\mathbf{r}) = \frac{e^{-r/\xi}}{4\pi r \xi_0^2} \quad d = 3, \quad (55)$$

где пространственный масштаб

$$\xi = \xi_0 / \sqrt{1 - \theta_0} \quad (56)$$

расходится при $\theta_0 \rightarrow 1$. Для трехмерных систем $D_0(\mathbf{r})$ имеется явное экспоненциальное затухание, заданное уравнением (55). Для двумерных систем уравнение (54) содержит $K_0(x)$ — модифицированную функцию Бесселя второго рода, которая определяет асимптотическое экспоненциальное поведение $D_0(\mathbf{r}) = \xi_0^{-2} e^{-r/\xi} \sqrt{\xi/(8\pi r)}$ при $r \gg \xi$.

Наличие экспоненциального ядра $D_0(\mathbf{r})$ с нетривиальным масштабом ξ в итоговых уравнениях (46)–(52) является главным результатом работы. Он показывает, что при приложении нагрузки к аморфному телу в нем будут возникать корреляции атомных смещений с масштабом ξ , который может существенно превосходить размер структурных элементов аморфного тела. Данный масштаб обусловлен учетом флуктуирующих компонент смещений и связан с беспорядком в системе, поэтому он не проявляется в уравнениях макроскопической теории упругости, где эти факторы не учитываются. Другими словами, полученный корреляционный масштаб ξ можно ассоциировать с масштабом неоднородности аморфной системы.

Конкретный вид коррелятора зависит от способа приложения сил. Функции $Y_n(\mathbf{r})$ и $h_n(\mathbf{r})$ зависят только от пространственного распределения нагрузки и не зависят от координат $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$, в которых измеряется корреляция смещения атомов. Поэтому, если к телу приложено однородное напряжение, то вклад экспоненциального ядра в лестничном вкладе $K_{\alpha\beta}^{\text{id}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ будет отсутствовать. В частности, в случае однородной объемной деформации аморфного тела коррелятор дивергенции смещений атомов

$$K_{\text{div}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{\partial^2 K_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{\partial r_{1\alpha} \partial r_{2\beta}} \quad (57)$$

будет иметь вид

$$K_{\text{div}}(\mathbf{r}) = c_1 \delta(\mathbf{r}) + c_2 D_0(\mathbf{r}), \quad (58)$$

где c_1 и c_2 — некоторые константы, зависящие от силы и характера беспорядка в аморфном теле. Такой коррелятор наиболее ярко подчеркивает наличие экспоненциально спадающего вклада в корреляционную функцию смещений атомов.

В случае более сложного характера приложения нагрузки корреляторы необходимо рассчитывать в каждом случае индивидуально. Однако из общих соображений можно получить, что в случае локализованного воздействия на аморфное тело в точке $\mathbf{r}$ наиболее ярко будут проявляться корреляции смещения атомов в точках $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$, если $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}|$ и $|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}|$ меньше или порядка масштаба ξ .

6. Оценка степени беспорядка

В уравнениях Дайсона (21) и (22) важную роль играет соотношение числа связей N_b и числа степеней свободы dN :

$$\kappa = 1 - dN/N_b. \quad (59)$$

Случай $\kappa = 0$ соответствует минимальному числу связей, необходимых для жесткости системы, заданному правилом подсчета Максвелла [50], также известному как изостатическое условие.

Из уравнений Дайсона (21) и (22) следует, что

$$\text{Tr}[\hat{G}^b] = N_b - dN. \quad (60)$$

Поэтому среднее собственных значений матрицы $\hat{G}^b$ равно параметру κ .

Используя $\hat{G}^{-1}$ в качестве первого приближения базисной матрицы $\hat{S}^{(0)}$, собственное значение θ_0 можно оценить с помощью уравнения (29) и соотношения ортогональности (30) как

$$\theta_0 \approx \frac{\hat{G}^{-1} : \hat{\mathcal{R}} : \hat{\mathcal{T}} : \hat{\mathcal{R}} : \hat{G}^{-1}}{\hat{G}^{-1} : \hat{\mathcal{R}} : \hat{G}^{-1}}, \quad (61)$$

$$\theta_0 \approx \frac{\text{Tr}[(\hat{1} - \hat{G}^b)^2]}{dN} \approx \frac{N_b}{dN} - 2 \frac{\text{Tr}[\hat{G}^b]}{dN} = \frac{1 - 2\kappa}{1 - \kappa}. \quad (62)$$

Следовательно, при $\kappa \ll 1$ собственное значение θ_0 близко к 1 и $1 - \theta_0 \sim \kappa$. Поэтому параметр $0 \leq \kappa < 1$ количественно определяет удаленность системы от изостатичности и служит обратной мерой силы беспорядка, причем $\kappa \rightarrow 0$ соответствует критическому, сильно разупорядоченному пределу.

7. Обсуждение

В работе исследовались корреляционные свойства упругого отклика аморфных тел на произвольный тип приложенного воздействия. Полученные уравнения учитывают пространственную неоднородность в аморфной системе и содержат масштаб ξ , разделяющий микроскопическое и макроскопическое описания. На масштабах, больших, чем масштаб неоднородности ξ , смещения могут быть описаны в рамках континуальной теории упругости путем решения уравнения (4) с тензором Грина $\hat{G}$ (10). Однако на масштабе неоднородности ξ смещения проявляют дополнительную флуктуирующую составляющую. На таких масштабах классическая (континуальная) теория упругости становится неприменимой, поскольку невозможно определить гладкую зависимость смещения от координаты. Этот принципиально новый результат отличается от классических континуальных уравнений в рамках макроскопической теории упругости, где не учитывается неоднородный характер смещений и нет соответствующего пространственного масштаба. В предыдущих работах, посвященных неаффинному упругому отклику, рассматривались флуктуации упругих модулей в рамках континуальной теории,

и единственным масштабом являлся корреляционный масштаб структурного беспорядка [44].

Полученные уравнения описывают отклик системы на нагрузки разного вида. В случае приложения однородной деформации макроскопический отклик представляет собой аффинные смещения и выражается через тензор деформаций $\hat{\varepsilon}$ как $v_{i\alpha} = \varepsilon_{\alpha\beta} r_{i\beta}$. Это приводит к зависимости коррелятора только от разности координат $K_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = K_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, что гомогенизирует задачу. Однако в случае приложения локализованной силы (например, точечной или дипольной) корреляции между флуктуирующими деформациями не сводятся к зависимости от разности координат, что в общем виде выражается через двухточечную функцию отклика, как показывают найденные уравнения.

Результаты работы обобщают описание отклика на воздействие в неупорядоченных системах и важны в разных областях физики. Под действием однородной внешней деформации в аморфных системах проявляются так называемые неаффинные смещения как флуктуирующие дополнительные смещения по сравнению с аффинным откликом. Исследование неаффинных деформаций и их корреляционных свойств является предметом многих работ [17,20,44,51]. Полученные в работе уравнения описывают корреляционные свойства неаффинных деформаций и показывают наличие характерного масштаба неаффинности ξ , зависящего от величины беспорядка как $\xi \sim (1 - \theta_0)^{-1/2}$. Такое соотношение согласуется с результатами предыдущих работ, в том числе посвященных исследованию гранулярных сред [14,17], где связь между числом степеней свободы в системе и числом связей играет решающую роль, а критический параметр беспорядка может быть определен как $1 - \theta_0 \sim z - z_c$, где z — координационное число, а z_c — порог Максвелла. Соответствующая длина $l_c \sim (z - z_c)^{-1/2}$ характеризует переход между механическими откликами на атомистическом масштабе и в континуальном приближении на различные локальные и глобальные возмущения [14,17].

Полученное соотношение $\xi \sim (1 - \theta_0)^{-1/2}$ между масштабом неоднородности ξ и параметром беспорядка θ_0 показывает, что с ростом беспорядка масштаб ξ также увеличивается. Это позволяет говорить о том, что в аморфных системах, полученных путем быстрого охлаждения из расплава, возрастает влияние неаффинных деформаций на упругие свойства материала. Аналогичное масштабное соотношение наблюдалось в работах других научных групп по исследованию деформационно-упрочняющихся податливых структур [24] и в моделях мягких сфер и дисков [18,23,52].

Разработанный подход в рамках теории случайных матриц предоставляет универсальные выражения (34) и (35) для анализа упругого отклика смещений как на макроскопическую деформацию, так и на локальное силовое возмущение. С одной стороны, такое возмущение возникает как собственная дилатация дефектов в упругой среде (задача Эшелби) [40–42]. С другой стороны, локальные воздействия могут быть внешними.

Например, в атомно-силовой микроскопии при сканировании поверхности зонд создает дополнительные напряжения в структуре вокруг себя [39]. Как показывают результаты данной работы, на масштабах $r \gg \xi$ вдали от действия приложенной силы упругие характеристики будут определяться макроскопическим откликом и проявлять убывающие степенные зависимости. Однако на масштабах $r \lesssim \xi$ отклик будет определяться флуктуирующими компонентами смещений, что проявится в экспоненциальной зависимости упругих характеристик на этом масштабе.

Результаты данного исследования имеют большое значение для физики нанокомпозитов. Ранее было показано, что в сильно разупорядоченной среде с жесткими включениями нанометровых размеров вокруг таких нановключений образуется эффективная упругая оболочка за счет подавления неаффинных смещений [20,38,53]. Модули упругости такой оболочки превышают модули упругости того же материала вдали от нановключений, а толщина оболочки зависит от степени разупорядоченности. Например, моделирование методом молекулярной динамики полистирола с наночастицей диоксида кремния показывает увеличение жесткости на расстоянии около 1.4 nm вокруг наночастицы [20]. Толщина оболочки имеет тот же масштаб, что и полученный в данном исследовании масштаб длины неоднородности ξ . В то же время дополнительные модули упругости оболочки экспоненциально убывают с увеличением расстояния от наночастицы. Этот факт подчеркивает связь между локальными упругими свойствами и неаффинными деформациями, так как последние имеют экспоненциальную корреляционную функцию $\exp(-r/\xi)$. Аналогичное поведение модулей упругости наблюдалось также вблизи границы раздела между аморфным и кристаллическим слоями [51].

Существует взаимосвязь между ξ и масштабом длины низкочастотных колебаний. Предыдущие исследования [54–56] показали соотношение $\omega_b \simeq \omega_{IR}$ между частотой бозонного пика ω_b и частотой кроссовера Иоффе–Регеля ω_{IR} . Соответствующий пространственный масштаб l_{IR} , который разделяет фононы и колебания диффузионного типа, связан с силой беспорядка в таких системах. Обычно он составляет порядка нескольких нанометров и подчиняется масштабному соотношению через критический параметр беспорядка $l_{IR} \propto \kappa^{-1/2}$ [21,22,35,36]. Это указывает на взаимосвязь между ξ , характеризующей экспоненциальное затухание, и длиной Иоффе–Регеля $l_{IR} \approx \xi$.

Результаты работы показывают потенциальную применимость разработанного теоретического описания для глубокого изучения особенностей квазилокальных мод. Как было показано в работе [15], масштаб длины, наблюдаемый в функциях отклика на локальную дипольную силу, характеризует размер ядра мягких квазилокальных возбуждений в стеклообразном веществе. Таким образом, изучение упругого отклика на локальный силовой

диполь имеет большое значение для низкоэнергетических возбуждений в неупорядоченных системах [16,57]. Как следует из проведенных нами исследований, можно ожидать, что отклик на локальную упругую силу (точечную или дипольную) будет демонстрировать как степенную зависимость, так и экспоненциальное затухание, что также предсказывается работами [19,37]. Детальное рассмотрение упругого отклика на локальное возмущение при исследовании мягких областей является предметом наших дальнейших исследований.

Необходимо отметить, что полученные корреляционные супероператоры не являются абстрактными теоретическими объектами, а могут быть выражены с помощью одночастичной функции Грина (резольвенты) $G_{ab} = \langle (\Phi^{-1})_{ab} \rangle$ и двухчастичной функции Грина $G_{aa',bb'} = \langle (\Phi^{-1})_{aa'} (\Phi^{-1})_{bb'} \rangle$. Такие характеристики могут быть определены, например, с помощью методов молекулярной динамики для различных реалистичных моделей аморфных тел. Поэтому зонная структура, изображенная на рис. 2, может быть рассчитана для различных материалов, что открывает широкие перспективы в дальнейшем исследовании аморфных твердых тел.

8. Заключение

В данной работе мы применили теорию случайных матриц для анализа линейного отклика неупорядоченной системы на внешнюю силу произвольного типа. Качественное отличие от классической теории упругости заключается в наличии флуктуирующей компоненты, зависящей от степени неупорядоченности. В рамках теории случайных матриц мера беспорядка описывается наибольшим собственным значением θ_0 корреляционного супероператора. Флуктуации упругих свойств растут с увеличением θ_0 . При этом граница потери устойчивости системы соответствует критическому значению $\theta_0 = 1$. Для систем, близких к изостатическим, величину θ_0 можно оценить как dN/N_b , где N — число атомов в системе, N_b — число связей, а d — размерность пространства.

Анализ собственных значений корреляционного супероператора, полученного из уравнения Дайсона, показывает, что наибольший вклад в коррелятор смещений атомов дает наибольшее собственное значение θ_0 , которое определяет корреляционный масштаб $\xi \sim (1 - \theta_0)^{-1/2}$. Для сильно разупорядоченных материалов такой масштаб может значительно превосходить характерный межатомный масштаб.

На основе развитого формализма показано, что корреляционные функции смещений атомов содержат экспоненциально спадающие вклады с масштабом ξ , который расходится при приближении системы к критической границе устойчивости.

Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда в рамках реализации проекта № 22-72-10083-П. Теоретический расчет методом диаграммной техники выполнен при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики „БАЗИС“ (заявка № 24-1-2-36-2).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] K. Yoshimoto, T.S. Jain, K. Van Workum, P.F. Nealey, J.J. De Pablo. Phys. Rev. Lett. **93**, 17, 175501 (2004).
- [2] M. Tsamados, A. Tanguy, C. Goldenberg, J.-L. Barrat. Phys. Rev. E **80**, 2, 026112 (2009).
- [3] H. Wagner, D. Bedorf, S. Kuechemann, M. Schwabe, B. Zhang, W. Arnold, K. Samwer. Nat. Mater. **10**, 6, 439 (2011).
- [4] H. Mizuno, S. Mossa, J.-L. Barrat. Phys. Rev. E **87**, 4, 042306 (2013).
- [5] R.C. Zeller, R.O. Pohl. Phys. Rev. B **4**, 6, 2029 (1971).
- [6] W.X. Zhou, Y. Cheng, K.Q. Chen, G. Xie, T. Wang, G. Zhang. Adv. Funct. Mater. **30**, 8, 1903829 (2020).
- [7] Y.-C. Hu, H. Tanaka. Nat. Phys. **18**, 6, 669 (2022).
- [8] A. Zacccone. Theory of Disordered Solids: From Atomistic Dynamics to Mechanical, Vibrational, and Thermal Properties. Springer, Cham (2023). 452 c.
- [9] F. Léonforte, A. Tanguy, J.P. Wittmer, J.-L. Barrat. Phys. Rev. Lett. **97**, 5, 055501 (2006).
- [10] S. Chakraborty, K. Ramola. Soft Matter **20**, 25, 4895 (2024).
- [11] A. Tanguy, J.P. Wittmer, F. Leonforte, J.-L. Barrat. Phys. Rev. B **66**, 17, 174205 (2002).
- [12] F. Léonforte, R. Boissi'ere, A. Tanguy, J.P. Wittmer, J.-L. Barrat. Phys. Rev. B **72**, 22, 224206 (2005).
- [13] C.E. Maloney. Phys. Rev. Lett. **97**, 3, 035503 (2006).
- [14] E. Lerner. Eur. Phys. J. E **41**, 8, 93 (2018).
- [15] C. Rainone, E. Bouchbinder, E. Lerner. Proc. Natl. Acad. Sci. USA **117**, 10, 5228 (2020).
- [16] E. Lerner, E. Bouchbinder. J. Chem. Phys. **155**, 20, 200901 (2021).
- [17] E. Lerner, E. DeGiuli, G. Düring, M. Wyart. Soft Matter **10**, 28, 5085 (2014).
- [18] K. Karimi, C.E. Maloney. Phys. Rev. E **92**, 2, 022208 (2015).
- [19] E. Lerner, E. Bouchbinder. Soft Matter **19**, 6, 1076 (2023).
- [20] Ya.M. Beltukov, D.A. Conyuh, I.A. Solov'yov. Phys. Rev. E **105**, 1, L012501 (2022).
- [21] L.E. Silbert, A.J. Liu, S.R. Nagel. Phys. Rev. Lett. **95**, 9, 098301 (2005).
- [22] M. Wyart. EPL **89**, 6, 64001 (2010).
- [23] K. Baumgarten, D. Vågberg, B.P. Tighe. Phys. Rev. Lett. **118**, 9, 098001 (2017).
- [24] G. Düring, E. Lerner, M. Wyart. Phys. Rev. E **89**, 2, 022305 (2014).
- [25] M. Bouzid, M. Trulsson, P. Claudin, E. Clément, B. Andreotti. Phys. Rev. Lett. **111**, 23, 238301 (2013).
- [26] D. Hexner, A.J. Liu, S.R. Nagel. Soft Matter **14**, 2, 312 (2018).
- [27] В.К. Малиновский. ФТТ **41**, 5, 805 (1999).

- [28] В.К. Малиновский, В.Н. Новиков, А.П. Соколов. УФН **163**, 5, 119 (1993).
- [29] Z. Zhang, W. Kob. Phys. Rev. B **110**, 10, 104203 (2024).
- [30] C.C. Yu, J.J. Freeman. Phys. Rev. B **36**, 14, 7620 (1987).
- [31] T.S. Grigera, V. Martín-Mayor, G. Parisi, P. Verrocchio. J. Phys.: Condens. Matter **14**, 9, 2167 (2002).
- [32] M.L. Manning, A.J. Liu. EPL **109**, 3, 36002 (2015).
- [33] Y.M. Beltukov, V.I. Kozub, D.A. Parshin. Phys. Rev. B **87**, 13, 134203 (2013).
- [34] M. Baggioli, R. Milkus, A. Zaccone. Phys. Rev. E **100**, 6, 062131 (2019).
- [35] D.A. Conyuh, Y.M. Beltukov. Phys. Rev. B **103**, 10, 104204 (2021).
- [36] D.A. Conyuh, Y.M. Beltukov. Phys. Rev. E **103**, 4, 042608 (2021).
- [37] D.A. Conyuh, Ya.M. Beltukov. Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. **87**, 11, 1649 (2023).
- [38] D.A. Conyuh, A.A. Semenov, Y.M. Beltukov. Phys. Rev. E **108**, 4, 045004 (2023).
- [39] C. Tian, J. Cui, N. Ning, L. Zhang, M. Tian. Compos. Sci. Technol. **222**, 109367 (2022).
- [40] J.D. Eshelby. Proc. R. Soc. Lond. A **241**, 1226, 376 (1957).
- [41] J.D. Eshelby. Proc. R. Soc. Lond. A **252**, 1271, 561 (1959).
- [42] H.G.E. Hentschel, A. Kumar, I. Procaccia, S. Roy. Phys. Rev. E **110**, 3, L033001 (2024).
- [43] S. Alexander. Phys. Rep. **296**, 2–4, 65 (1998).
- [44] B.A. DiDonna, T.C. Lubensky. Phys. Rev. E **72**, 6, 066619 (2005).
- [45] W. Thomson. Cambridge Dublin Math. J. **3**, 87 (1848).
- [46] T. Mura. Micromechanics of Defects in Solids. Springer, Dordrecht (1987). 587 с.
- [47] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория упругости. Наука, М. (1965). 204 с.
- [48] A.A. Maradudin, E.W. Montroll, G.H. Weiss, L.P. Ipatova. Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation. Academic Press, New York (1971). 319 с.
- [49] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin. Solid State Physics. Harcourt College Publishers, New York (1976). 826 с.
- [50] J.C. Maxwell. London Edinburgh Dublin Philos. Mag. J. Sci. **27**, 182, 294 (1864).
- [51] А.А. Семенов, Д.А. Конюх, Я.М. Бельтюков. ФТТ **64**, 8, 1039 (2022).
- [52] D. Hexner, N. Pashine, A.J. Liu, S.R. Nagel. Phys. Rev. Research **2**, 4, 043231 (2020).
- [53] I.O. Raikov, D.A. Conyuh, Y.M. Beltukov. In: 2025 IEEE International Conference on Manipulation, Manufacturing and Measurement on the Nanoscale (3M-NANO), p. 553 (2025).
- [54] E. DeGiuli, A. Laversanne-Finot, G. Düring, E. Lerner, M. Wyart. Soft Matter **10**, 30, 5628 (2014).
- [55] H. Mizuno, H. Shiba, A. Ikeda. Proc. Natl. Acad. Sci. USA **114**, 46, E9767 (2017).
- [56] H. Shintani, H. Tanaka. Nature Mater. **7**, 11, 870 (2008).
- [57] D.A. Conyuh, Y.M. Beltukov. St. Petersburg State Polytech. Univ. J. Phys. Math. **16**, 1.1, 178 (2023).

Редактор А.Н. Смирнов

Приложение 1: Фурье-преобразование

Уравнения (34) и (35) можно записать в следующем виде:

$$K_{ab}^{\text{ld}} = \frac{1}{N} \sum_v W_{ab}^{(v)} \frac{\theta_v}{1 - \theta_v} Y^{(v)}, \quad (\text{П1})$$

$$K_{ab}^{\text{tw}} = \frac{1}{N} \sum_v V_a^{(v)} \frac{\theta_v}{1 - \theta_v} \tilde{V}_b^{(v)}, \quad (\text{П2})$$

где для удобства записи введены следующие конструкции:

$$W_{ab}^{(v)} = (\hat{G} \cdot \hat{S}^{(v)} \cdot \hat{G})_{ab}, \quad Y^{(v)} = (\bar{u} \cdot \bar{S}^{(v)*} \cdot \bar{u}), \quad (\text{П3})$$

$$V_a^{(v)} = (\hat{G} \cdot \hat{S}^{(v)} \cdot \hat{u})_a, \quad \tilde{V}_b^{(v)} = (\bar{u} \cdot \bar{S}^{(v)*} \cdot \hat{G})_b, \quad (\text{П4})$$

Перейдем к взаимно однозначному соответствию между индексом v и парой $(\mathbf{np})$ и применим Фурье-преобразование (36). Тогда для лестничного вклада получим, что

$$K_{\alpha\beta}^{\text{id}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{np}} \sum_{ij} W_{i\alpha j\beta}^{(\mathbf{np})} e^{i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_i - i\mathbf{q}_2 \mathbf{r}_j} \frac{\theta_n(\mathbf{p})}{1 - \theta_n(\mathbf{p})} Y^{(n)}(\mathbf{p}), \quad (\text{П5})$$

где

$$\begin{aligned} \sum_{ij} W_{i\alpha j\beta}^{(\mathbf{np})} e^{i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_i - i\mathbf{q}_2 \mathbf{r}_j} &= \sum_{iji'\alpha'j'\beta'} G_{iai'\alpha'} e^{i\mathbf{q}_1(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'})} \\ &\times S_{i'\alpha'j'\beta'}^{(\mathbf{np})} e^{i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_{i'} - i\mathbf{q}_2 \mathbf{r}_{j'}} G_{j'\beta'j\beta} e^{i\mathbf{q}_2(\mathbf{r}_{j'} - \mathbf{r}_j)} \\ &= G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}_1) S_{\alpha'\beta'}^{(n)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2} G_{\beta'\beta}(\mathbf{q}_2), \end{aligned} \quad (\text{П6})$$

$$\begin{aligned} Y^{(n)}(\mathbf{p}) &= \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2} \bar{u}_{\beta}(\mathbf{q}_2) \sum_{ij} S_{j\beta i\alpha}^{(\mathbf{np})*} e^{-i(\mathbf{q}_2 \mathbf{r}_j + \mathbf{q}_1 \mathbf{r}_i)} \bar{u}_{\alpha}(\mathbf{q}_1) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}_2} \bar{u}_{\beta}(\mathbf{q}_2) S_{\beta\alpha}^{(n)*}(\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2 - \mathbf{p}) \bar{u}_{\alpha}(\mathbf{p} - \mathbf{q}_2). \end{aligned} \quad (\text{П7})$$

Верный вклад имеет вид

$$\begin{aligned} K_{\alpha\beta}^{\text{tw}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{np}} \sum_i V_{i\alpha}^{(\mathbf{np})} e^{i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_i} \\ &\times \frac{\theta_n(\mathbf{p})}{1 - \theta_n(\mathbf{p})} \sum_j \tilde{V}_{j\beta}^{(\mathbf{np})} e^{-i\mathbf{q}_2 \mathbf{r}_j}, \end{aligned} \quad (\text{П8})$$

где

$$\begin{aligned} \sum_i V_{i\alpha}^{(\mathbf{np})} e^{i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_i} &= \sum_{iij'\beta'} G_{iai'\alpha'} e^{i\mathbf{q}_1(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'})} \\ &\times S_{i'\alpha'j'\beta'}^{(\mathbf{np})} e^{i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_{i'} - i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_{j'}} \bar{u}_{j'\beta'} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_{j'}} \\ &= G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}_1) S_{\alpha'\beta'}^{(n)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{p}) \bar{u}_{\beta'}(\mathbf{q}_1 - \mathbf{p}), \end{aligned} \quad (\text{П9})$$

$$\begin{aligned} \sum_j \tilde{V}_{j\beta}^{(np)} e^{-i\mathbf{q}_2 \mathbf{r}_j} &= \sum_{ji'j'} G_{j'\beta'j\beta} e^{i\mathbf{q}_2(\mathbf{r}_{j'} - \mathbf{r}_j)} \\ &\times S_{j'\beta'i'\alpha'}^{(np)*} e^{-i(\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_{i'} + \mathbf{q}_2 \mathbf{r}_{j'})} \bar{u}_{i'\alpha'} e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_{i'}} \\ &= G_{\beta'\beta}(\mathbf{q}_2) S_{\beta'\alpha'}^{(n)*}(\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2 - \mathbf{p}) \bar{u}_{\alpha'}(\mathbf{p} - \mathbf{q}_2). \end{aligned} \quad (\text{П10})$$

Таким образом, как лестничный, так и веерный вклад принимают вид

$$K_{\alpha\beta}^{\text{ld/tw}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}_1) H_{\alpha'\beta'}^{\text{ld/tw}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) G_{\beta'\beta}(\mathbf{q}_2). \quad (\text{П11})$$

Для лестничного вклада

$$H_{\alpha\beta}^{\text{ld}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = \sum_n h_n(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) S_{\alpha\beta}^{(n)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2), \quad (\text{П12})$$

$$h_n(\mathbf{p}) = \frac{\theta_n(\mathbf{p})}{1 - \theta_n(\mathbf{p})} Y^{(n)}(\mathbf{p}). \quad (\text{П13})$$

Для веерного вклада

$$H_{\alpha\beta}^{\text{tw}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = \frac{1}{N} \sum_{np} F_{\alpha}^{(n)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}) \frac{\theta_n(\mathbf{p})}{1 - \theta_n(\mathbf{p})} \tilde{F}_{\beta}^{(n)}(\mathbf{q}_2, \mathbf{p}), \quad (\text{П14})$$

где

$$F_{\alpha}^{(n)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}) = S_{\alpha\beta}^{(n)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{p}) \bar{u}_{\beta}(\mathbf{q}_1 - \mathbf{p}), \quad (\text{П15})$$

$$\tilde{F}_{\beta}^{(n)}(\mathbf{q}_2, \mathbf{p}) = S_{\beta\alpha}^{(n)*}(\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2 - \mathbf{p}) \bar{u}_{\alpha}(\mathbf{p} - \mathbf{q}_2). \quad (\text{П16})$$

Приложение 2: Обратное Фурье-преобразование

Рассмотрим обратное Фурье-преобразование корреляции флуктуирующих смещений:

$$K_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} K_{\alpha\beta}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) e^{-i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{q}_2 \mathbf{r}_2}. \quad (\text{П17})$$

Тогда лестничный вклад можно преобразовать как

$$\begin{aligned} K_{\alpha\beta}^{\text{ld}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}_1) \sum_n h_n(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \\ &\times S_{\alpha'\beta'}^{(n)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) G_{\beta'\beta}(\mathbf{q}_2) e^{-i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{q}_2 \mathbf{r}_2} \\ &= n_{\text{at}}^3 \iiint G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}') \sum_n h_n(\mathbf{r}') \\ &\times S_{\alpha'\beta'}^{(n)}(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) G_{\beta'\beta}(\mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}') d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'_1 d\mathbf{r}'_2. \end{aligned} \quad (\text{П18})$$

Веерный вклад можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned} H_{\alpha\beta}^{\text{tw}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) &= \frac{1}{N} \sum_{np} \sum_{\mathbf{p}'} F_{\alpha}^{(n)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}') \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \frac{\theta_n(\mathbf{p})}{1 - \theta_n(\mathbf{p})} \\ &\times \sum_{\mathbf{p}''} \tilde{F}_{\beta}^{(n)}(\mathbf{q}_2, \mathbf{p}) \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}''} = n_{\text{at}}^2 \iint \sum_n F_{\alpha}^{(n)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}') \\ &\times D_n(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') \tilde{F}_{\beta}^{(n)}(\mathbf{q}_2, \mathbf{r}'') d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'', \end{aligned} \quad (\text{П19})$$

где

$$\begin{aligned} D_n(\mathbf{r}) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\theta_n(\mathbf{p})}{1 - \theta_n(\mathbf{p})} e^{-i\mathbf{p} \mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{V_b} \int \frac{\theta_n(\mathbf{p})}{1 - \theta_n(\mathbf{p})} e^{-i\mathbf{p} \mathbf{r}} d\mathbf{p}. \end{aligned} \quad (\text{П20})$$

Тогда

$$\begin{aligned} K_{\alpha\beta}^{\text{tw}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= n_{\text{at}}^2 \iint \sum_n V_{\alpha}^{(n)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') D_n(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') \\ &\times \tilde{V}_{\beta}^{(n)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'') d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'', \end{aligned} \quad (\text{П21})$$

где

$$\begin{aligned} V_{\alpha}^{(n)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}_1} G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}_1) F_{\alpha'}^{(n)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_1} \\ &= n_{\text{at}} \int G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) F_{\alpha'}^{(n)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (\text{П22})$$

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{\beta}^{(n)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'') &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}_2} G_{\beta'\beta}(\mathbf{q}_2) \tilde{F}_{\beta'}^{(n)}(\mathbf{q}_2, \mathbf{r}'') e^{i\mathbf{q}_2 \mathbf{r}_2} \\ &= n_{\text{at}} \int G_{\beta'\beta}(\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}) \tilde{F}_{\beta'}^{(n)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (\text{П23})$$