

К ТЕОРИИ ПРОВОДИМОСТИ АНИЗОТРОПНЫХ КОМПОЗИТОВ. СЛАБОНЕОДНОРОДНАЯ СРЕДА

*Б. Я. Балагуров**

*Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля Российской академии наук
119334, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 7 сентября 2010 г.

Рассмотрена проводимость слабонеоднородной анизотропной среды. В квадратичном по отклонению локальной проводимости $\hat{\sigma}(\mathbf{r})$ от среднего значения $\langle \hat{\sigma} \rangle$ приближении определен тензор эффективной проводимости $\hat{\sigma}_e$ при произвольной анизотропии композита.

1. ВВЕДЕНИЕ

В обычной теории протекания [1, 2] основное внимание уделяется изучению различных свойств изотропных неоднородных сред, в том числе композитов. Обобщение соответствующих результатов на кристаллы с «нормальной», порядка единицы, анизотропией не приводит к каким-либо качественно новым явлениям, сводясь к количественным уточнениям. Однако в ряде случаев реальные композиты, как, например, слоистые кристаллы типа графита или нитевидные типа TCNQ, могут обладать достаточно сильной анизотропией. Свойства таких композитов могут существенно отличаться от свойств изотропных неупорядоченных систем уже при малой концентрации включений. К тому же дополнительные параметры задачи (например, о проводимости), связанные с анизотропией среды, определяют и большее разнообразие ее свойств. Поэтому изучение проводимости и других электрофизических характеристик анизотропных композитов представляет значительный интерес как с практической, так и с общенаучной точки зрения.

Теоретическое исследование электропроводности неупорядоченных анизотропных сред проводилось в ряде работ — см., например, [3–6]. В работах [3, 4] в рамках гипотезы подобия [1, 2] рассмотрена окрестность порога протекания — критической концентрации, при которой происходит фазовый переход металл–диэлектрик. В работах [5, 6] изучалась эффективная проводимость композитов с сильной анизотропией во всем интервале изменения концентрации

включений — как диэлектрических, так и идеально проводящих. В этих работах был выявлен ряд черт, присущих анизотропным неупорядоченным системам. Было показано, в частности, что по мере увеличения концентрации включений происходит изотропизация свойств исходно резко анизотропного композита. При приближении же к порогу протекания такой композит становится практически изотропным с «изотропными» критическими индексами.

Использованные в работах [3–6] теоретические методы имеют, в основном, качественный характер и дают оценки, справедливые только по порядку величины. Поэтому, несмотря на наличие этих и некоторых других работ, формальный аппарат анизотропной теории протекания остается развитым слабо. Так, практически отсутствуют количественные методы, аналогичные разработанным для изотропных неоднородных сред. Это, прежде всего, теория возмущений для слабонеоднородной среды, случай малой концентрации включений произвольной формы, а также методы, позволяющие давать приближенную оценку проводимости во всем диапазоне изменения концентрации.

В настоящей работе рассмотрена проводимость слабонеоднородных композитов с естественной анизотропией произвольной величины. Дана последовательная теория возмущений для тензора эффективной проводимости $\hat{\sigma}_e$ таких сред — разложение по степеням отклонения $\delta\hat{\sigma}(\mathbf{r})$ локального тензора проводимости $\hat{\sigma}(\mathbf{r})$ от своего среднего значения $\langle \hat{\sigma} \rangle$. В квадратичном по $\delta\hat{\sigma}$ приближении составляющие тензора $\hat{\sigma}_e$ найдены в достаточно общем виде в слу-

*E-mail: balagurov@deom.chph.ras.ru, byabalagurov@mail.ru

чае, когда соответствующая корреляционная функция изотропна. При этом оказалось, что поправки к главным значениям эффективного тензора проводимости выражаются через величины, аналогичные коэффициентам деполяризации эллипсоида. С использованием полученных общих формул для $\hat{\sigma}_e$ рассмотрены некоторые предельные случаи: двухкомпонентная анизотропная среда и одноосные неоднородные кристаллы типа графита и TCNQ. В Приложении приведены для справок явные выражения для коэффициентов деполяризации через эллиптические интегралы первого и второго родов.

2. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Рассмотрим неоднородную анизотропную среду с локальным тензором проводимости $\hat{\sigma}(\mathbf{r})$, направление главных осей которого, образующих декартову систему (x, y, z) , не зависит от координат:

$$\hat{\sigma}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \sigma_x(\mathbf{r}) & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_y(\mathbf{r}) & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_z(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Если отклонение $\delta\hat{\sigma}(\mathbf{r})$ тензора $\hat{\sigma}(\mathbf{r})$ от его среднего значения $\langle\hat{\sigma}\rangle$ мало, то для вычисления тензора эффективной проводимости $\hat{\sigma}_e$ такой среды может быть развита теория возмущений — разложение по степеням $\delta\hat{\sigma}$. При этом будем предполагать, что отклонения от среднего малы для каждого из главных значений тензора $\hat{\sigma}(\mathbf{r})$, в то время как отличия их друг от друга сколь угодно велики, т. е. анизотропия среды произвольна.

Для вычисления эффективного тензора проводимости $\hat{\sigma}_e$ необходимо решить систему уравнений постоянного тока

$$\operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = 0, \quad \mathbf{j} = \hat{\sigma}(\mathbf{r}) \mathbf{E}, \quad (2)$$

где \mathbf{j} — плотность тока, \mathbf{E} — напряженность электрического поля. Систему (2) следует решать при заданном среднем по объему образца V значении напряженности $\langle\mathbf{E}\rangle$. Здесь

$$\langle(\dots)\rangle = \frac{1}{V} \int_V (\dots) d\mathbf{r} \quad (3)$$

при $V \rightarrow \infty$. Тензор эффективной проводимости $\hat{\sigma}_e$ определяется из соотношения

$$\langle\mathbf{j}\rangle = \hat{\sigma}_e \langle\mathbf{E}\rangle. \quad (4)$$

Положив

$$\hat{\sigma}(\mathbf{r}) = \langle\hat{\sigma}\rangle + \delta\hat{\sigma}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{E}\rangle - \nabla\varphi(\mathbf{r}), \quad (5)$$

где $\langle\delta\hat{\sigma}\rangle = 0$ и $\langle\nabla\varphi\rangle = 0$, приведем систему (2) к уравнению для потенциала $\varphi(\mathbf{r})$:

$$\langle\sigma_{\alpha\beta}\rangle \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} = \frac{\partial \delta\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha} \langle E_\beta \rangle - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left\{ \delta\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) \frac{\partial \varphi(\mathbf{r})}{\partial x_\beta} \right\}. \quad (6)$$

При этом

$$\langle\mathbf{j}\rangle = \langle\hat{\sigma}\rangle \langle\mathbf{E}\rangle - \langle\delta\hat{\sigma} \nabla\varphi\rangle. \quad (7)$$

Для того чтобы найти разложение потенциала $\varphi(\mathbf{r})$ по степеням $\delta\hat{\sigma}$, нужно от дифференциального уравнения (6) перейти к интегральному.

Для такого перехода воспользуемся функцией Грина $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, определенной согласно формуле

$$\langle\sigma_{\alpha\beta}\rangle \frac{\partial^2 G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (8)$$

Решая уравнение (8) с помощью фурье-преобразования, найдем

$$G(\mathbf{r}) = - \int \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(\mathbf{k}\langle\hat{\sigma}\rangle\mathbf{k})} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (9)$$

В главных осях тензора $\langle\hat{\sigma}\rangle$ выражение (9) принимает вид

$$G(\mathbf{r}) = - \int \frac{\exp\{ik_x x + ik_y y + ik_z z\}}{\langle\sigma_x\rangle k_x^2 + \langle\sigma_y\rangle k_y^2 + \langle\sigma_z\rangle k_z^2} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (10)$$

Заменами

$$k_\alpha = \frac{\tilde{k}_\alpha}{\sqrt{\langle\sigma_\alpha\rangle}}, \quad x_\alpha = \sqrt{\langle\sigma_\alpha\rangle} \tilde{x}_\alpha \quad (\alpha = x, y, z) \quad (11)$$

приведем (10) к «изотропному» виду, так что

$$G(\tilde{\mathbf{r}}) = - \frac{1}{\sqrt{\langle\sigma_x\rangle \langle\sigma_y\rangle \langle\sigma_z\rangle}} \frac{1}{4\pi|\tilde{\mathbf{r}}|}, \quad (12)$$

откуда находим

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = - \frac{1}{4\pi} (\langle\sigma_x\rangle \langle\sigma_y\rangle \langle\sigma_z\rangle)^{-1/2} \times \left[\frac{(x - x')^2}{\langle\sigma_x\rangle} + \frac{(y - y')^2}{\langle\sigma_y\rangle} + \frac{(z - z')^2}{\langle\sigma_z\rangle} \right]^{-1/2}. \quad (13)$$

С помощью функции Грина $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ обычным образом переходим от дифференциального уравнения (6) к интегральному

$$\varphi(\mathbf{r}) = \langle E_\beta \rangle \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{\partial \delta\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}')}{\partial x'_\alpha} d\mathbf{r}' - \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial x'_\alpha} \left\{ \delta\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') \frac{\partial \varphi(\mathbf{r}')}{\partial x'_\beta} \right\} d\mathbf{r}'. \quad (14)$$

После интегрирования по частям равенства (14) принимает вид

$$\varphi(\mathbf{r}) = \langle E_\beta \rangle \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') \frac{\partial\varphi(\mathbf{r}')}{\partial x'_\beta} d\mathbf{r}'. \quad (15)$$

Уравнение (15) решаем итерациями — разложением по степеням $\delta\hat{\sigma}$:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi^{(1)}(\mathbf{r}) + \varphi^{(2)}(\mathbf{r}) + \dots, \quad (16)$$

где $\varphi^{(n)}(\mathbf{r})$ содержит n -ю степень $\delta\hat{\sigma}$. В линейном по $\delta\hat{\sigma}$ приближении

$$\varphi^{(1)}(\mathbf{r}) = \langle E_\delta \rangle \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta\sigma_{\gamma\delta}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (17)$$

Подстановка уравнения (17) в (7) дает квадратичную поправку к $\langle \mathbf{j} \rangle$ и, соответственно, к $\hat{\sigma}_e$:

$$\langle \mathbf{j}^{(2)} \rangle = \hat{\sigma}_e^{(2)} \langle \mathbf{E} \rangle, \quad (18)$$

где

$$\begin{aligned} (\hat{\sigma}_e^{(2)})_{\alpha\beta} = & -\frac{1}{V} \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' \delta\sigma_{\alpha\gamma}(\mathbf{r}') \times \\ & \times \frac{\partial^2 G(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'')}{\partial x'_\gamma \partial x''_\delta} \delta\sigma_{\delta\beta}(\mathbf{r}''). \end{aligned} \quad (19)$$

Положив $\mathbf{r}'' = \mathbf{r} + \mathbf{r}'$, приведем (19) к виду

$$(\hat{\sigma}_e^{(2)})_{\alpha\beta} = - \int K_{\alpha\gamma,\delta\beta}(\mathbf{r}) \frac{\partial^2 G(\mathbf{r})}{\partial x_\gamma \partial x_\delta} d\mathbf{r}, \quad (20)$$

где

$$K_{\alpha\gamma,\delta\beta}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \int \delta\sigma_{\alpha\gamma}(\mathbf{r}') \delta\sigma_{\delta\beta}(\mathbf{r}' + \mathbf{r}) d\mathbf{r}' \quad (V \rightarrow \infty) \quad (21)$$

— бинарная корреляционная функция.

Продолжая решать уравнение (15) итерациями, нетрудно найти и высшие по $\delta\hat{\sigma}$ поправки к $\varphi(\mathbf{r})$ и $\hat{\sigma}_e$. Так, например, для поправки третьего порядка $\hat{\sigma}_e^{(3)}$ получаем

$$\begin{aligned} (\hat{\sigma}_e^{(3)})_{\alpha\beta} = & \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' K_{\alpha\gamma,\delta\mu,\nu\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \times \\ & \times \frac{\partial^2 G(\mathbf{r})}{\partial x_\gamma \partial x_\delta} \frac{\partial^2 G(\mathbf{r}')}{\partial x'_\mu \partial x'_\nu}, \end{aligned} \quad (22)$$

где

$$K_{\alpha\gamma,\delta\mu,\nu\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{V} \int d\rho \delta\sigma_{\alpha\gamma}(\rho) \times \delta\sigma_{\delta\mu}(\rho + \mathbf{r}) \delta\sigma_{\nu\beta}(\rho + \mathbf{r} + \mathbf{r}') \quad (23)$$

— корреляционная функция третьего порядка (при $V \rightarrow \infty$).

3. КВАДРАТИЧНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Остановимся более подробно на квадратичном по $\delta\hat{\sigma}$ приближении. Переходя в формуле (20) к фурье-представлению для корреляционной и гриновской функций, получим

$$(\hat{\sigma}_e^{(2)})_{\alpha\beta} = - \int K_{\alpha\gamma,\delta\beta}(-\mathbf{k}) \frac{k_\gamma k_\delta}{(\mathbf{k} \langle \hat{\sigma} \rangle \mathbf{k})} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (24)$$

Выражение (24), сходное с приведенным в работе [7], справедливо для произвольной анизотропной слабо-неоднородной среды. Однако в таком общем виде оно, как и выражение (20), мало пригодно для практических целей. В то же время формуле (24) может быть придан достаточно простой и удобный для применения вид в важном частном случае изотропной корреляционной функции, когда $\hat{K}(\mathbf{r})$ зависит только от $r = |\mathbf{r}|$. При этом, как нетрудно видеть, от модуля $k = |\mathbf{k}|$ зависит и фурье-образ $\hat{K}(\mathbf{k}) = \hat{K}(k)$. Это обстоятельство позволяет отделить в формуле (24) интегрирование по углам:

$$(\hat{\sigma}_e^{(2)})_{\alpha\beta} = -Q_{\gamma\delta} \int K_{\alpha\gamma,\delta\beta}(k) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad (25)$$

где

$$Q_{\gamma\delta} = \int \frac{m_\gamma m_\delta}{(\mathbf{m} \langle \hat{\sigma} \rangle \mathbf{m})} \frac{d\mathbf{o}}{4\pi}. \quad (26)$$

В формуле (26) $\mathbf{m} = \mathbf{k}/k$. Интеграл в (25) от $\hat{K}(k)$ равен $\hat{K}(\mathbf{r})$ при $\mathbf{r} = 0$. Поэтому с учетом определения (21) имеем

$$\int K_{\alpha\gamma,\delta\beta}(k) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \langle \delta\sigma_{\alpha\gamma} \delta\sigma_{\delta\beta} \rangle. \quad (27)$$

В итоге в квадратичном по $\delta\hat{\sigma}$ приближении получаем

$$(\hat{\sigma}_e)_{\alpha\beta} = \langle \sigma_{\alpha\beta} \rangle - Q_{\gamma\delta} \langle \delta\sigma_{\alpha\gamma} \delta\sigma_{\delta\beta} \rangle \quad (28)$$

с тензором \hat{Q} из формулы (26).

В главных осях выражение (28) принимает вид

$$\sigma_{\alpha e} = \langle \sigma_\alpha \rangle - Q_\alpha \langle (\delta\sigma_\alpha)^2 \rangle \quad (\alpha = x, y, z), \quad (29)$$

где Q_α — соответствующие главные значения тензора \hat{Q} . Вводя сферические координаты ($m_x = \sin\theta \cos\varphi$, $m_y = \sin\theta \sin\varphi$, $m_z = \cos\theta$), для величины Q_z получим следующее выражение:

$$Q_z = \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi S(\theta) \cos^2\theta \sin\theta d\theta, \quad (30)$$

$$\begin{aligned} S(\theta) = & \int_0^{2\pi} \left[\sin^2\theta \left(\frac{\cos^2\varphi}{a_x^2} + \frac{\sin^2\varphi}{a_y^2} \right) + \frac{\cos^2\theta}{a_z^2} \right]^{-1} d\varphi, \end{aligned} \quad (31)$$

где

$$a_\alpha = \frac{1}{\sqrt{\langle \sigma_\alpha \rangle}} \quad (\alpha = x, y, z). \quad (32)$$

Перейдем в формуле (31) от $\cos^2 \varphi$ и $\sin^2 \varphi$ к $\cos 2\varphi$ и проинтегрируем по углу φ . В результате $S(\theta)$ примет вид

$$S(\theta) = 2\pi \left[\left(\frac{\sin^2 \theta}{a_x^2} + \frac{\cos^2 \theta}{a_z^2} \right) \times \left(\frac{\sin^2 \theta}{a_y^2} + \frac{\cos^2 \theta}{a_z^2} \right) \right]^{-1/2}. \quad (33)$$

При выводе формулы (33) учтено, что при $A > 0$ и $A > |B|$

$$\int_0^{2\pi} \frac{dx}{A + B \cos x} = \frac{2\pi}{\sqrt{A^2 - B^2}}.$$

Выражение (30) с $S(\theta)$ из (33) перепишем следующим образом:

$$Q_z = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi/2} S(\theta) \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \quad (34)$$

и введем новую переменную интегрирования s согласно равенству

$$\cos \theta = \frac{a_z}{\sqrt{s + a_z^2}}. \quad (35)$$

В результате Q_z примет окончательный вид:

$$Q_z = \frac{n^{(z)}}{\langle \sigma_z \rangle}, \quad n^{(z)} = \frac{a_x a_y a_z}{2} \int_0^\infty \frac{ds}{(s + a_z^2) R_s}, \quad (36)$$

где

$$R_s = \sqrt{(s + a_x^2)(s + a_y^2)(s + a_z^2)}. \quad (37)$$

В формуле (36) $n^{(z)}$ — один из коэффициентов деполяризации эллипсоида [8] с полюсами (32). Размерность введенных в формуле (32) полюсей несущественна, так как в $n^{(z)}$ и другие коэффициенты входят только отношения величин a_x , a_y и a_z .

При вычислении величины Q_x сферические координаты вводим согласно равенствам $m_x = \cos \theta$, $m_y = \sin \theta \cos \varphi$, $m_z = \sin \theta \sin \varphi$. В результате для Q_x получаем выражение, следующее из формулы (36) при замене $a_z \rightleftharpoons a_x$ (или $\langle \sigma_z \rangle \rightleftharpoons \langle \sigma_x \rangle$). Аналогичным образом находим и величину Q_y (с заменой в (36) $a_z \rightleftharpoons a_y$), так что для главных значений тензора \hat{Q} находим окончательно

$$Q_\alpha = \frac{n^{(\alpha)}}{\langle \sigma_\alpha \rangle} \quad (\alpha = x, y, z). \quad (38)$$

Соответственно для $\sigma_{\alpha e}$ в рассматриваемом квадратичном приближении имеем

$$\sigma_{\alpha e} = \langle \sigma_\alpha \rangle \left\{ 1 - n^{(\alpha)} \frac{\langle (\delta \sigma_\alpha)^2 \rangle}{(\langle \sigma_\alpha \rangle)^2} \right\}. \quad (39)$$

Выражение (39) справедливо для всех анизотропных слабонеоднородных систем, бинарная корреляционная функция (21) которых изотропна.

Отметим, что коэффициенты деполяризации очевидным образом положительны и подчиняются соотношению [8] $n^{(x)} + n^{(y)} + n^{(z)} = 1$, так что $0 \leq n^{(\alpha)} \leq 1$. В общем случае величины $n^{(\alpha)}$ могут быть выражены через эллиптические интегралы первого и второго родов — см. Приложение.

4. ПРЕДЕЛЬНЫЕ СЛУЧАИ

Для изотропной среды ($\sigma_\alpha = \sigma$, $\delta \sigma_\alpha = \delta \sigma$, $\sigma_{\alpha e} = \sigma_e$) имеем $n^{(x)} = n^{(y)} = n^{(z)} = 1/3$, так что для эффективной проводимости в этом случае из формулы (39) следует выражение

$$\sigma_e = \langle \sigma \rangle \left\{ 1 - \frac{1}{3} \frac{\langle (\delta \sigma)^2 \rangle}{(\langle \sigma \rangle)^2} \right\}, \quad (40)$$

совпадающее (с точностью до обозначений) с аналогичным результатом [8] для эффективной диэлектрической проницаемости слабонеоднородной среды. В двумерном случае имеем $n^{(x)} = n^{(y)} = 1/2$, а для одномерной системы отличен от нуля и равен единице только один из коэффициентов деполяризации. Все эти три случая описываются единой формулой

$$\sigma_e = \langle \sigma \rangle \left\{ 1 - \frac{1}{D} \frac{\langle (\delta \sigma)^2 \rangle}{(\langle \sigma \rangle)^2} \right\}, \quad (41)$$

где D — размерность пространства.

Для бинарного композита с тензорами проводимости компонент $\hat{\sigma}_1$ и $\hat{\sigma}_2$ имеем

$$\langle \sigma_\alpha \rangle = p \sigma_{\alpha 1} + (1 - p) \sigma_{\alpha 2}$$

и

$$\langle (\delta \sigma_\alpha)^2 \rangle = p(1 - p)(\sigma_{\alpha 1} - \sigma_{\alpha 2})^2,$$

так что

$$\sigma_{\alpha e} = \sigma_{\alpha 1} - (1 - p)(\sigma_{\alpha 1} - \sigma_{\alpha 2}) - p(1 - p)n^{(\alpha)} \frac{(\sigma_{\alpha 1} - \sigma_{\alpha 2})^2}{\sigma_{\alpha 1}}. \quad (42)$$

Здесь p — безразмерная концентрация (доля занимаемого объема) первой компоненты. В общем случае коэффициенты деполяризации $n^{(\alpha)}$ из формулы (42) даются приведенными в Приложении выражениями, в которых следует положить $a_\alpha = 1/\sqrt{\sigma_{\alpha 1}}$. Для двумерных анизотропных систем ($\sigma_x \neq \sigma_y$) коэффициенты $n^{(\alpha)}$ имеют простой вид:

$$\begin{aligned} n^{(x)} &= \frac{a_y}{a_x + a_y} \approx \frac{\sqrt{\sigma_{x1}}}{\sqrt{\sigma_{x1}} + \sqrt{\sigma_{y1}}}, \\ n^{(y)} &= \frac{a_x}{a_x + a_y} \approx \frac{\sqrt{\sigma_{y1}}}{\sqrt{\sigma_{x1}} + \sqrt{\sigma_{y1}}}. \end{aligned} \quad (43)$$

В формуле (43) учтено, что при подстановке (43) в (42) также следует положить $\langle \sigma_\alpha \rangle = \sigma_{\alpha 1}$. Подчеркнем, что выражение (42) справедливо во всем интервале изменения концентрации $0 \leq p \leq 1$.

В одноосных кристаллах $\sigma_x = \sigma_y \neq \sigma_z$, чему отвечают эллипсоиды вращения с $a_x = a_y \neq a_z$. В этих случаях коэффициенты деполяризации выражаются через элементарные функции [8]. Слоистому кристаллу ($\sigma_x = \sigma_y > \sigma_z$) соответствует вытянутый эллипсоид вращения ($a_x = a_y < a_z$), так что [8]

$$\begin{aligned} n^{(z)} &= \frac{1 - \varepsilon^2}{\varepsilon^3} \left(\frac{1}{2} \ln \frac{1 + \varepsilon}{1 - \varepsilon} - \varepsilon \right), \\ n^{(x)} &= n^{(y)} = \frac{1}{2} (1 - n^{(z)}), \\ \varepsilon &= \sqrt{1 - \frac{a_x^2}{a_z^2}} = \sqrt{1 - \frac{\langle \sigma_z \rangle}{\langle \sigma_x \rangle}}. \end{aligned} \quad (44)$$

При сильной анизотропии $\langle \sigma_z \rangle / \langle \sigma_x \rangle \ll 1$ имеем

$$\begin{aligned} n^{(z)} &\approx \frac{\langle \sigma_z \rangle}{\langle \sigma_x \rangle} \ln \left(\frac{2}{e} \sqrt{\frac{\langle \sigma_x \rangle}{\langle \sigma_z \rangle}} \right) \ll 1, \\ n^{(x)} &= n^{(y)} \approx 1/2, \end{aligned} \quad (45)$$

где $e = 2.718\dots$ — основание натуральных логарифмов. В этом предельном случае для эффективной проводимости $\sigma_e = \sigma_{xe} = \sigma_{ye}$ в плоскости (x, y) из формулы (39) с учетом (45) следует двумерное выражение — см. (41) при $D = 2$.

Нитевидному кристаллу ($\sigma_x = \sigma_y < \sigma_z$) соответствует сплюснутый эллипсоид вращения ($a_x = a_y > a_z$), для которого согласно работе [8]

$$\begin{aligned} n^{(z)} &= \frac{1 + \varepsilon^2}{\varepsilon^3} (\varepsilon - \arctg \varepsilon), \\ n^{(x)} &= n^{(y)} = \frac{1}{2} (1 - n^{(z)}), \\ \varepsilon &= \sqrt{\frac{a_x^2}{a_z^2} - 1} = \sqrt{\frac{\langle \sigma_z \rangle}{\langle \sigma_x \rangle} - 1}. \end{aligned} \quad (46)$$

При сильной анизотропии $\langle \sigma_x \rangle / \langle \sigma_z \rangle \ll 1$ имеем

$$n^{(z)} \approx 1 - \frac{\pi}{2} \frac{\langle \sigma_x \rangle}{\langle \sigma_z \rangle}, \quad n^{(x)} = n^{(y)} \approx \frac{\pi}{4} \frac{\langle \sigma_x \rangle}{\langle \sigma_z \rangle} \ll 1, \quad (47)$$

так что

$$\sigma_{xe} \approx \langle \sigma_z \rangle \left\{ 1 - \frac{\langle (\delta \sigma_z)^2 \rangle}{\langle \sigma_z \rangle^2} \right\}. \quad (48)$$

Результат (48) соответствует одномерному случаю — см. (41) при $D = 1$.

Действительно, в пределе $\langle \sigma_x \rangle = \langle \sigma_y \rangle \rightarrow 0$ задача становится одномерной и линии тока направлены вдоль оси z . Подобная ситуация аналогична последовательному соединению элементов электрической цепи, полное сопротивление которой равно сумме сопротивлений этих элементов. Поэтому для эффективной проводимости получаем

$$\sigma_{ze} = \left(\left\langle \frac{1}{\sigma_z} \right\rangle \right)^{-1}. \quad (49)$$

Выражение (49) справедливо для одномерной системы с произвольной зависимостью σ_z от координаты z . Для слабонеоднородной среды из формулы (49) в квадратичном приближении следует результат (48).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Приведем для справок выражения для коэффициентов деполяризации в случае трехосного эллипсоида

$$\frac{x^2}{a_x^2} + \frac{y^2}{a_y^2} + \frac{z^2}{a_z^2} = 1 \quad (A.1)$$

при $a_x > a_y > a_z$. Сделаем в интеграле

$$n^{(x)} = \frac{a_x a_y a_z}{2} \int_0^\infty \frac{ds}{\sqrt{(s + a_x^2)^3 (s + a_y^2) (s + a_z^2)}} \quad (A.2)$$

замену переменной

$$s = a_z^2 \frac{1 - x^2}{x^2}. \quad (A.3)$$

В результате коэффициент (A.2) примет вид

$$\begin{aligned} n^{(x)} &= \frac{a_x a_y a_z^2}{(a_x^2 - a_z^2)^{3/2} \sqrt{a_y^2 - a_z^2}} \times \\ &\times \int_0^1 \frac{x^2 dx}{\sqrt{(A^2 + x^2) (B^2 + x^2)^3}}, \end{aligned} \quad (A.4)$$

$$A^2 = \frac{a_z^2}{a_y^2 - a_z^2}, \quad B^2 = \frac{a_z^2}{a_x^2 - a_z^2}. \quad (A.5)$$

Интеграл в формуле (A.4) согласно формуле № 3.159 (1) из работы [9] выражается через эллиптические интегралы первого и второго родов. В результате получаем

$$n^{(x)} = \frac{a_x a_y a_z}{(a_x^2 - a_z^2) \sqrt{a_x^2 - a_z^2}} \{ F(\varphi, k) - E(\varphi, k) \}, \quad (A.6)$$

где

$$F(\varphi, k) = \int_0^\varphi \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}}, \quad (\text{A.7})$$

$$E(\varphi, k) = \int_0^\varphi \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta} d\theta,$$

$$\varphi = \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{a_x^2 - a_z^2}}{a_z}, \quad k = \sqrt{\frac{a_x^2 - a_y^2}{a_x^2 - a_z^2}}. \quad (\text{A.8})$$

Замена переменной интегрирования (A.3) в выражениях для $n^{(y)}$ и $n^{(z)}$ приводит соответственно к интегралам типа № 3.159 (3) и № 3.153 (1) из работы [9]. В результате получаем

$$n^{(y)} = a_x a_y a_z \frac{\sqrt{a_x^2 - a_z^2}}{a_x^2 - a_y^2} \left[\frac{E(\varphi, k)}{a_y^2 - a_z^2} - \frac{F(\varphi, k)}{a_x^2 - a_z^2} \right] - \frac{a_z^2}{a_y^2 - a_z^2}, \quad (\text{A.9})$$

$$n^{(z)} = \frac{a_y^2}{a_y^2 - a_z^2} - \frac{a_x a_y a_z E(\varphi, k)}{\sqrt{a_x^2 - a_z^2} (a_y^2 - a_z^2)} \quad (\text{A.10})$$

с теми же, что и в (A.8), углом φ и параметром k . Нетрудно видеть, что коэффициенты (A.6), (A.9) и (A.10) удовлетворяют соотношению $n^{(x)} + n^{(y)} + n^{(z)} = 1$.

При $a_x \rightarrow \infty$ (эллиптический цилиндр) имеем $\varphi \rightarrow \pi/2$, $k \rightarrow 1$, так что в этом пределе $n^{(x)} = 0$ и

$$n^{(y)} = \frac{a_z}{a_y + a_z}, \quad n^{(z)} = \frac{a_y}{a_y + a_z}. \quad (\text{A.11})$$

Эти выражения переходят в формулы (43) при замене индексов $z \leftrightarrow x$.

Для вытянутого эллипсоида вращения ($a_x > a_y = a_z$) имеем

$$\varphi = \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{a_x^2 - a_z^2}}{a_z}, \quad k = 1. \quad (\text{A.12})$$

В этом случае

$$E(\varphi, 1) = \sin \varphi = \varepsilon, \quad F(\varphi, 1) = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \varepsilon}{1 - \varepsilon}, \quad (\text{A.13})$$

так что

$$n^{(x)} = \frac{1 - \varepsilon^2}{\varepsilon^3} \left[\frac{1}{2} \ln \frac{1 + \varepsilon}{1 - \varepsilon} - \varepsilon \right], \quad (\text{A.14})$$

$$\varepsilon = \sqrt{1 - \frac{a_z^2}{a_x^2}}.$$

Эти выражения переходят в формулы (44) также при замене индексов $z \leftrightarrow x$.

Наконец, для сплюснутого эллипсоида вращения ($a_x = a_y > a_z$) имеем

$$k = 0, \quad E(\varphi, 0) = \varphi, \quad (\text{A.15})$$

где

$$\varphi = \operatorname{arctg} \varepsilon, \quad \varepsilon = \sqrt{\frac{a_x^2}{a_z^2} - 1}, \quad (\text{A.16})$$

так что для $n^{(z)}$ получаем выражение (46).

ЛИТЕРАТУРА

1. Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, УФН **117**, 401 (1975).
2. A. L. Efros and B. I. Shklovskii, Phys. Stat. Sol. B **76**, 475 (1976).
3. B. I. Shklovskii, Phys. Stat. Sol. B **85**, K111 (1978).
4. Б. И. Шкловский, Письма в ЖТФ **7**, 1312 (1981).
5. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **82**, 2053 (1982).
6. Б. Я. Балагуров, ФТТ **27**, 2375 (1985).
7. C. Herring, J. Appl. Phys. **31**, 1939 (1960).
8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1992).
9. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Физматгиз, Москва (1962).