

# К ТЕОРИИ ПРОВОДИМОСТИ АНИЗОТРОПНЫХ КОМПОЗИТОВ. РЕШЕТОЧНАЯ МОДЕЛЬ

*Б. Я. Балагуров\**

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

Поступила в редакцию 12 мая 2014 г.

Электропроводность неупорядоченной анизотропной решеточной модели рассмотрена аналитическими методами. Определена эффективная проводимость слабонеоднородной решетки в квадратичном приближении по отклонению локального тензора проводимости  $\hat{\sigma}(\mathbf{r})$  от среднего значения  $\langle \hat{\sigma} \rangle$ . В случае малой концентрации ( $c \ll 1$ ) «дефектных» связей проводимость бинарной решеточной модели вычислена в линейном по  $c$  приближении. Дан вывод уравнений метода эффективной среды для анизотропной решетки. Проведено сравнение с соответствующими результатами для модели сплошной среды.

DOI: 10.7868/S0044451014100162

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование проводимости анизотропных композитов наталкивается на те же, что и для изотропных неоднородных сред, трудности принципиального порядка, обусловленные неупорядоченностью таких систем. К тому же наличие дополнительных параметров задачи, связанных с учетом анизотропии, еще более усложняет эту проблему. Поэтому посвященные изучению проводимости анизотропных композитов теоретические работы [1–3] носят в основном качественный характер. Тем не менее в этих работах были выявлены некоторые особенности (по сравнению с изотропным случаем) поведения эффективной проводимости подобных систем. Было показано, в частности, что по мере увеличения концентрации диэлектрических (или идеально проводящих) включений происходит изотропизация свойств композита даже с резко анизотропной матрицей. При приближении к порогу протекания такой композит становится практически изотропным с «изотропными» критическими индексами.

Количественный подход к вычислению электрофизических свойств анизотропных композитов был предложен ранее [4, 5]. В работе [4] рассмотрена слабонеоднородная среда, для вычисления проводимости которой развита последовательная теория воз-

мущений — разложение по малому отклонению локального тензора проводимости  $\hat{\sigma}(\mathbf{r})$  от его среднего значения  $\langle \hat{\sigma} \rangle$ . В квадратичном по этому отклонению приближении найдены явные выражения для составляющих тензора эффективной проводимости  $\hat{\sigma}_e$ . В работе [5] предложен общий метод вычисления проводимости анизотропных композитов с малой концентрацией включений произвольной формы. В линейном по концентрации приближении тензор  $\hat{\sigma}_e$  выражен через дипольную поляризуемость включения, определенную в некоторой преобразованной системе, в которой включение окружено изотропной матрицей.

В общем случае разнообразная информация о свойствах неоднородных анизотропных сред может быть получена при изучении решеточных моделей. Численные эксперименты на решетках позволяют найти зависимость эффективной проводимости от концентрации и других параметров задачи в широкой области их изменения, а также дают возможность детально изучить фазовый переход металл–диэлектрик в анизотропных композитах. «Микроскопический» подход, также использующий решеточные модели и основанный на методе ренормгруппы [6], дает возможность исследовать окрестность критической концентрации аналитическим путем. При этом, согласно представлениям теории протекания, найденные в решеточной задаче значения, например критических индексов, будут справедливы и для непрерывной (континуальной)

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

задачи. По этим причинам представляется необходимым выяснить, в какой мере методы (и полученные с их помощью результаты), использованные для непрерывных моделей, переносятся на решеточные задачи и в чем имеются различия.

В настоящей работе проводимость анизотропной решеточной модели исследуется аналитическими методами. Рассмотрен случай слабонеоднородной решетки, для которой развита теория возмущений по малому параметру — отклонению локальной проводимости от ее среднего значения. Составляющие тензора эффективной проводимости  $\hat{\sigma}_e$  такой решетки вычислены в квадратичном по этому параметру приближении. Оказалось, что в полученное выражение для  $\hat{\sigma}_e$  входят решеточные коэффициенты  $N^{(\nu)}$  ( $\nu = x, y, z$ ), заменяющие коэффициенты деполяризации  $n^{(\nu)}$  эллипсоида в аналогичных выражениях для непрерывной среды. Те же величины  $N^{(\nu)}$  входят и в составляющие тензора  $\hat{\sigma}_e$ , вычисленные в линейном по концентрации дефектных связей приближении, а также в уравнения в приближении эффективной среды (effective medium approximation, ЕМА). В Приложении рассмотрены основные свойства решеточных коэффициентов  $N^{(\nu)}$  в случае одноосной анизотропии и показано, что функциональная зависимость от параметра анизотропии величин  $N^{(\nu)}$  и  $n^{(\nu)}$  одинакова. Это обстоятельство позволяет сделать вывод, что результаты компьютерных экспериментов на решетках дают адекватное на качественном уровне описание проводимости бинарных анизотропных композитов.

## 2. РЕШЕТОЧНАЯ МОДЕЛЬ

Рассмотрим простую кубическую (квадратную в двумерном случае) решетку, узлы которой заданы дискретным радиус-вектором  $\mathbf{r} = n_1 \mathbf{i}_x + n_2 \mathbf{i}_y + n_3 \mathbf{i}_z$ . Здесь  $n_i$  — целые числа,  $\mathbf{i}_\nu$  — орт (единичный вектор) координаты  $\nu$  ( $\nu = x, y, z$ ). Каждому узлу  $\mathbf{r}$  приписываем потенциал  $V_{\mathbf{r}}$ , так что для тока, текущего через связь между узлами  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{r} + \mathbf{\Delta}_\nu$ , имеем выражение

$$j_{\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{\Delta}_\nu} = \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{\Delta}_\nu} (V_{\mathbf{r}} - V_{\mathbf{r} + \mathbf{\Delta}_\nu}). \quad (1)$$

Здесь  $\sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{\Delta}_\nu}$  — проводимость связи, соединяющей эти узлы; величина  $\mathbf{\Delta}_\nu$  принимает значения  $\pm \mathbf{i}_\nu$ . В дальнейшем ограничимся рассмотрением так называемой задачи связей. В этой задаче в случае неупорядоченной анизотропной двухкомпонентной решетки каждая связь между узлами  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{r} + \mathbf{\Delta}_\nu$  обладает проводимостью  $\sigma_{1\nu}$  с вероятностью  $p$  и проводимостью  $\sigma_{2\nu}$  с вероятностью  $c = 1 - p$ . Величина  $p$

выполняет роль безразмерной концентрации первой компоненты в непрерывной задаче.

Первый закон Кирхгофа для анизотропной решетки имеет вид

$$\sum_{\nu} \sum_{\mathbf{\Delta}_\nu} \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{\Delta}_\nu} (V_{\mathbf{r}} - V_{\mathbf{r} + \mathbf{\Delta}_\nu}) = 0, \quad (2)$$

$$\mathbf{\Delta}_\nu = \pm \mathbf{i}_\nu.$$

Второй закон Кирхгофа — равенство нулю приращения потенциала при обходе по замкнутому контуру — выполняется тождественно. Эффективная проводимость анизотропной решетки описывается тензором  $\hat{\sigma}_e$ , для определения составляющих которого необходимо решить уравнение (2).

Пусть на решетку наложено однородное электрическое поле. Представим потенциал  $V_{\mathbf{r}}$  в следующем виде:

$$V_{\mathbf{r}} = -\langle \mathbf{E} \rangle \cdot \mathbf{r} + \varphi_{\mathbf{r}}, \quad (3)$$

где

$$\langle E_\nu \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{r}} (V_{\mathbf{r}} - V_{\mathbf{r} + \mathbf{i}_\nu}) \quad (4)$$

— средняя напряженность электрического поля, направленная вдоль оси  $\nu$  ( $\nu = x, y, z$ ). В (4) суммирование идет по всем узлам решетки, а  $\mathcal{N}$  — их полное число ( $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ ). Подстановка выражения (3) в уравнение (2) дает неоднородное уравнение для функции  $\varphi_{\mathbf{r}}$ :

$$\sum_{\nu} \sum_{\mathbf{\Delta}_\nu} \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{\Delta}_\nu} (\varphi_{\mathbf{r}} - \varphi_{\mathbf{r} + \mathbf{\Delta}_\nu}) = - \sum_{\nu} \sum_{\mathbf{\Delta}_\nu} \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{\Delta}_\nu} \langle \mathbf{E} \rangle \cdot \mathbf{\Delta}_\nu. \quad (5)$$

Решая уравнение (5), найдем функцию  $\varphi_{\mathbf{r}}$  и, тем самым, потенциал  $V_{\mathbf{r}}$ .

С помощью найденных потенциалов вычисляется средняя плотность тока в направлении оси  $\nu$ :

$$\langle j_\nu \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{i}_\nu} (V_{\mathbf{r}} - V_{\mathbf{r} + \mathbf{i}_\nu}) = \langle \sigma_\nu \rangle \langle E_\nu \rangle + \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{i}_\nu} (\varphi_{\mathbf{r}} - \varphi_{\mathbf{r} + \mathbf{i}_\nu}), \quad (6)$$

где

$$\langle \sigma_\nu \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{i}_\nu}. \quad (7)$$

Эффективная проводимость решетки  $\sigma_{e\nu}$  в направлении оси  $\nu$  определяется из соотношения

$$\langle j_\nu \rangle = \sigma_{e\nu} \langle E_\nu \rangle. \quad (8)$$

Величины  $\sigma_{e\nu}$  ( $\nu = x, y, z$ ) — главные значения тензора эффективной проводимости  $\hat{\sigma}_e$ .

### 3. СЛАБОНЕОДНОРОДНАЯ РЕШЕТКА

Если отклонение проводимостей  $\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\Delta_\nu}$  от их среднего значения  $\langle\sigma_\nu\rangle$  мало, то для вычисления эффективной проводимости решетки может быть развита теория возмущений. При этом будем предполагать, что эти отклонения 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 решетки произвольна. Положим

$$\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\Delta_\nu} = \langle\sigma_\nu\rangle + \delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\Delta_\nu}, \quad (9)$$

$$V_{\mathbf{r}} = -\langle\mathbf{E}\rangle \cdot \mathbf{r} + \delta V_{\mathbf{r}}, \quad (10)$$

где  $\langle\mathbf{E}\rangle$ , как и в выражении (4), — средняя напряженность электрического поля, а величина  $\langle\sigma_\nu\rangle$  определена в (7). Средние значения величины  $\delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\Delta_\nu}$  и разности  $\delta V_{\mathbf{r}} - \delta V_{\mathbf{r}+\Delta_\nu}$  равны нулю.

Подстановка выражений (9) и (10) в (2) для линейной по  $\delta\sigma$  поправки  $\delta V_{\mathbf{r}}^{(1)}$  дает следующее уравнение:

$$\begin{aligned} \sum_{\nu} \langle\sigma_\nu\rangle \sum_{\Delta_\nu} (\delta V_{\mathbf{r}}^{(1)} - \delta V_{\mathbf{r}+\Delta_\nu}^{(1)}) = \\ = - \sum_{\nu} \sum_{\Delta_\nu} \delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\Delta_\nu} \langle\mathbf{E}\rangle \cdot \Delta_\nu. \end{aligned} \quad (11)$$

Уравнение (11) решаем с помощью фурье-преобразования

$$\delta V_{\mathbf{r}}^{(1)} = \sum_{\mathbf{k}} \delta V_{\mathbf{k}}^{(1)} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (12)$$

$$\delta V_{\mathbf{k}}^{(1)} = \sum_{\mathbf{r}} \delta V_{\mathbf{r}}^{(1)} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},$$

$$\sum_{\mathbf{k}} (\dots) \equiv \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (\dots) \frac{dk_x dk_y dk_z}{(2\pi)^3}. \quad (13)$$

В результате из (11) находим

$$\begin{aligned} \delta V_{\mathbf{r}}^{(1)} = \sum_{\mathbf{r}'} g_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \times \\ \times \sum_{\nu'} \sum_{\Delta_{\nu'}} \delta\sigma_{\mathbf{r}',\mathbf{r}'+\Delta_{\nu'}} \langle\mathbf{E}\rangle \cdot \Delta_{\nu'}, \end{aligned} \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned} g_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{k}} g_0(\mathbf{k}) \exp [i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')], \\ g_0(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\Omega_{\mathbf{k}}}, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\Omega_{\mathbf{k}} = \sum_{\nu} \sum_{\Delta_\nu} \langle\sigma_\nu\rangle [1 - \exp(i\mathbf{k} \cdot \Delta_\nu)]. \quad (16)$$

Для рассматриваемой простой кубической решетки

$$\begin{aligned} \Omega_{\mathbf{k}} = 2 \left\{ \langle\sigma_x\rangle (1 - \cos k_x) + \langle\sigma_y\rangle (1 - \cos k_y) + \right. \\ \left. + \langle\sigma_z\rangle (1 - \cos k_z) \right\}, \end{aligned} \quad (17)$$

где учтено, что  $|\Delta_\nu| = 1$ .

Величина  $g_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , удовлетворяющая уравнению

$$\sum_{\nu} \langle\sigma_\nu\rangle \sum_{\Delta_\nu} \left\{ g_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - g_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}' + \Delta_\nu) \right\} = -\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}, \quad (18)$$

представляет собой решеточный аналог функции Грина непрерывной задачи (см. работу [4]). При  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$  в (15) существенны малые  $\mathbf{k}$ . В этом случае

$$\Omega_{\mathbf{k}} \approx \langle\sigma_x\rangle k_x^2 + \langle\sigma_y\rangle k_y^2 + \langle\sigma_z\rangle k_z^2$$

и  $g_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  принимает вид

$$\begin{aligned} g_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \approx \\ \approx - \int \frac{\exp\{ik_x x + ik_y y + ik_z z\}}{\langle\sigma_x\rangle k_x^2 + \langle\sigma_y\rangle k_y^2 + \langle\sigma_z\rangle k_z^2} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \end{aligned} \quad (19)$$

где интегрирование по всем  $k_\nu$  распространяется от  $-\infty$  до  $+\infty$ . Заменаи

$$k_\nu = \tilde{k}_\nu / \sqrt{\langle\sigma_\nu\rangle}, \quad x_\nu = \sqrt{\langle\sigma_\nu\rangle} \tilde{x}_\nu$$

интеграл в (19) приводится к «изотропному» виду, так что

$$\begin{aligned} g_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} (\langle\sigma_x\rangle \langle\sigma_y\rangle \langle\sigma_z\rangle)^{-1/2} \times \\ \times \left[ \frac{(x - x')^2}{\langle\sigma_x\rangle} + \frac{(y - y')^2}{\langle\sigma_y\rangle} + \frac{(z - z')^2}{\langle\sigma_z\rangle} \right]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (20)$$

Выражение (20) совпадает с функцией Грина соответствующей континуальной анизотропной задачи [4].

Направим  $\langle\mathbf{E}\rangle$  вдоль оси  $\nu$ . В этом случае из (14) следует

$$\begin{aligned} \delta V_{\mathbf{r}}^{(1)} = \\ = \sum_{\mathbf{r}'} g_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \{ \delta\sigma_{\mathbf{r}',\mathbf{r}'+i_\nu} - \delta\sigma_{\mathbf{r}',\mathbf{r}'-i_\nu} \} \langle E_\nu \rangle, \end{aligned} \quad (21)$$

или

$$\begin{aligned} \delta V_{\mathbf{r}}^{(1)} = \\ = \sum_{\mathbf{r}'} \{ g_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - g_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}' - i_\nu) \} \delta\sigma_{\mathbf{r}',\mathbf{r}'+i_\nu} \langle E_\nu \rangle. \end{aligned} \quad (22)$$

Переходя в (22) к фурье-представлению для функции  $g_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , получим

$$\delta V_{\mathbf{r}}^{(1)} = \sum_{\mathbf{r}'} \sum_{\mathbf{k}} g_0(\mathbf{k}) [(1 - \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{i}_\nu)] \times \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \delta \sigma_{\mathbf{r}', \mathbf{r} + \mathbf{i}_\nu} \langle E_\nu \rangle. \quad (23)$$

С помощью (23) находим

$$\delta V_{\mathbf{r}}^{(1)} - \delta V_{\mathbf{r} + \mathbf{i}_\nu}^{(1)} = - \sum_{\mathbf{r}'} F_\nu(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta \sigma_{\mathbf{r}', \mathbf{r} + \mathbf{i}_\nu} \langle E_\nu \rangle, \quad (24)$$

где

$$F_\nu(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -2 \sum_{\mathbf{k}} g_0(\mathbf{k}) (1 - \cos k_\nu) \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')]. \quad (25)$$

Заметим, что для

$$N^{(\nu)} = \langle \sigma_\nu \rangle F_\nu(0), \quad \nu = x, y, z \quad (26)$$

с учетом равенства  $1 - \cos k = 2 \sin^2(k/2)$  имеем следующее выражение:

$$N^{(\nu)} = \sum_{\mathbf{k}} \langle \sigma_\nu \rangle \sin^2 \frac{k_\nu}{2} \times \left( \langle \sigma_x \rangle \sin^2 \frac{k_x}{2} + \langle \sigma_y \rangle \sin^2 \frac{k_y}{2} + \langle \sigma_z \rangle \sin^2 \frac{k_z}{2} \right)^{-1}, \quad (27)$$

так что

$$\sum_{\nu} N^{(\nu)} = 1. \quad (28)$$

Поскольку

$$\langle j_\nu \rangle = \langle \sigma_\nu \rangle \langle E_\nu \rangle + \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{r}} \delta \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{i}_\nu} (\delta V_{\mathbf{r}} - \delta V_{\mathbf{r} + \mathbf{i}_\nu}), \quad (29)$$

подстановка линейного по  $\delta \sigma$  выражения (24) позволяет определить главные значения  $\sigma_{e\nu}$  тензора эффективной проводимости  $\hat{\sigma}_e$  в квадратичном по  $\delta \sigma$  приближении:

$$\sigma_{e\nu} = \langle \sigma_\nu \rangle - \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{r}'} \delta \sigma_{\mathbf{r}', \mathbf{r}' + \mathbf{i}_\nu} \times \sum_{\mathbf{r}''} F_\nu(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \delta \sigma_{\mathbf{r}'', \mathbf{r}'' + \mathbf{i}_\nu}. \quad (30)$$

Положив  $\mathbf{r}'' = \mathbf{r}' + \mathbf{r}$ , приведем выражение (30) к виду

$$\sigma_{e\nu} = \langle \sigma_\nu \rangle - \sum_{\mathbf{r}} K_{\nu\nu}(\mathbf{r}) F_\nu(\mathbf{r}), \quad (31)$$

где

$$K_{\nu\nu}(\mathbf{r}) = \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{r}'} \delta \sigma_{\mathbf{r}', \mathbf{r}' + \mathbf{i}_\nu} \delta \sigma_{\mathbf{r}' + \mathbf{r}, \mathbf{r}' + \mathbf{r} + \mathbf{i}_\nu} \right\} \quad (32)$$

— корреляционная функция.

Для задачи связей формула (31) допускает дальнейшее упрощение, так как при случайном распределении компонент корреляционная функция имеет вид

$$K_{\nu\nu}(\mathbf{r}) = \langle (\delta \sigma_\nu)^2 \rangle \delta_{\mathbf{r}, 0}, \quad (33)$$

где

$$\langle (\delta \sigma_\nu)^2 \rangle = \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{r}} (\delta \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{i}_\nu})^2 \right\} \quad (34)$$

и  $\delta_{\mathbf{r}, 0}$  — символ Кронекера. С учетом (33) и определения (26) формула (31) принимает окончательный вид:

$$\sigma_{e\nu} = \langle \sigma_\nu \rangle \left\{ 1 - N^{(\nu)} \frac{\langle (\delta \sigma_\nu)^2 \rangle}{\langle \sigma_\nu \rangle^2} \right\}, \quad \nu = x, y, z. \quad (35)$$

Сравнение (35) с соответствующим выражением для  $\sigma_{e\nu}$  из [4] показывает, что величины  $N^{(\nu)}$  выполняют в решеточной задаче ту же роль, что и коэффициенты деполяризации  $n^{(\nu)}$  эллипсоида с полуосями  $a_\nu = 1/\sqrt{\langle \sigma_\nu \rangle}$  в непрерывной (континуальной) задаче. Следует отметить, что применимость формулы (35) ограничена задачей связей со случайным распределением компонент.

#### 4. МАЛАЯ КОНЦЕНТРАЦИЯ ВКЛЮЧЕНИЙ

Рассмотрим теперь анизотропную решетку со связями проводимости  $\sigma_{1\nu}$ , часть которых заменена на «дефектные» (примесные) связи проводимости  $\sigma_{2\nu}$ . При малой концентрации ( $c \ll 1$ ) таких примесей эффективная проводимость системы может быть найдена в линейном по  $c$  приближении.

Направим  $\langle \mathbf{E} \rangle$  вдоль оси  $\nu$  и усредним по всей решетке величину  $j_\nu - \sigma_{1\nu} E_\nu$ . В результате получим соотношение

$$(\sigma_{e\nu} - \sigma_{1\nu}) \langle E_\nu \rangle = -c(\sigma_{e\nu} - \sigma_{2\nu})(V_0 - V_{\mathbf{i}_\nu}), \quad (36)$$

где  $V_0 - V_{\mathbf{i}_\nu}$  — падение напряжения на отдельной примесной связи. Считаем, что она соединяет узлы  $\mathbf{r} = 0$  и  $\mathbf{r} = \mathbf{i}_\nu$ .

Для определения разности потенциалов  $V_0 - V_{\mathbf{i}_\nu}$  на выделенной примесной связи запишем уравнение (2) в виде

$$\sum_{\nu'} \sigma_{1\nu'} \sum_{\Delta_{\nu'}} (V_{\mathbf{r}} - V_{\mathbf{r} + \Delta_{\nu'}}) = (\sigma_{1\nu} - \sigma_{2\nu})(V_0 - V_{\mathbf{i}_\nu})(\delta_{\mathbf{r}, 0} - \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{i}_\nu}). \quad (37)$$

Здесь неоднородность, вызванная примесной связью, перенесена в правую часть равенства (37). Уравнение (37) решаем с помощью фурье-преобразования (12), (13). В результате получаем

$$V_{\mathbf{r}} = -\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r} - (\sigma_{1\nu} - \sigma_{2\nu})(V_0 - V_{\mathbf{i}_\nu}) \times \sum_{\mathbf{k}} g_0(\mathbf{k}) [1 - \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{i}_\nu)] \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (38)$$

где  $-\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}$  — потенциал однородного поля  $V_{\mathbf{r}}^{(0)}$ , приложенного к решетке в направлении оси  $\nu$  и

$$g_0(\mathbf{k}) = -\frac{1}{4} \times \left( \sigma_{1x} \sin^2 \frac{k_x}{2} + \sigma_{1y} \sin^2 \frac{k_y}{2} + \sigma_{1z} \sin^2 \frac{k_z}{2} \right)^{-1}. \quad (39)$$

Полагая в (38)  $\mathbf{r} = 0$  и  $\mathbf{r} = \mathbf{i}_\nu$ , найдем

$$V_0 - V_{\mathbf{i}_\nu} = \frac{\sigma_{1\nu}}{\sigma_{1\nu} - (\sigma_{1\nu} - \sigma_{2\nu})N^{(\nu)}} E_{0\nu}. \quad (40)$$

Здесь

$$N^{(\nu)} = -2\sigma_{1\nu} \sum_{\mathbf{k}} g_0(\mathbf{k}) [1 - \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{i}_\nu)], \quad (41)$$

или, с учетом (39),

$$N^{(\nu)} = \sum_{\mathbf{k}} \sigma_{1\nu} \sin^2 \frac{k_\nu}{2} \times \left( \sigma_{1x} \sin^2 \frac{k_x}{2} + \sigma_{1y} \sin^2 \frac{k_y}{2} + \sigma_{1z} \sin^2 \frac{k_z}{2} \right)^{-1}. \quad (42)$$

В линейном по концентрации примесных связей приближении следует положить  $E_{0\nu} = \langle E_\nu \rangle$ , так что подстановка (40) в (36) дает

$$\sigma_{e\nu} = \sigma_{1\nu} \left\{ 1 - c \frac{\sigma_{1\nu} - \sigma_{2\nu}}{\sigma_{1\nu} - (\sigma_{1\nu} - \sigma_{2\nu})N^{(\nu)}} \right\}. \quad (43)$$

Сравнение с соответствующим результатом из работы [5] показывает, что и в этом случае величины  $N^{(\nu)}$  из (42) выполняют в решеточной задаче ту же роль, что и коэффициенты деполяризации  $n^{(\nu)}$  эллипсоида с полуосями  $a_\nu = R/\sqrt{\sigma_{1\nu}}$  в континуальной задаче о проводимости анизотропного композита с включениями сферической формы радиуса  $R$ .

### 5. МЕТОД ЕМА

Для описания проводимости неупорядоченных анизотропных решеток при немалых концентрациях может быть применен приближенный подход — метод ЕМА, обобщающий метод, используемый для изотропных решеток [7]. Для вывода основных уравнений этого метода усредним по всей решетке величину  $j_\nu - \sigma_{e\nu} E_\nu$ . По определению,  $\langle j_\nu \rangle = \sigma_{e\nu} \langle E_\nu \rangle$ , поэтому  $\langle j_\nu - \sigma_{e\nu} E_\nu \rangle = 0$ . Подставляя сюда выражения для  $j_\nu$  и  $E_\nu$ , получим соотношение (тождество)

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} (\sigma_{e\nu} - \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{i}_\nu}) (V_{\mathbf{r}} - V_{\mathbf{r} + \mathbf{i}_\nu}) = 0. \quad (44)$$

По аналогии с изотропным случаем [7] выделим связь с проводимостью  $\sigma_{i\nu}$  ( $i = 1, 2$ ), соединяющую узлы  $\mathbf{r} = 0$  и  $\mathbf{r} = \mathbf{i}_\nu$ , а всем остальным связям припишем проводимость  $\sigma_{e\nu}$ . Расписав тождество (44) по компонентам, получим равенство

$$p(\sigma_{e\nu} - \sigma_{1\nu})(V_0 - V_{\mathbf{i}_\nu})^{(1)} + c(\sigma_{e\nu} - \sigma_{2\nu})(V_0 - V_{\mathbf{i}_\nu})^{(2)} = 0. \quad (45)$$

Здесь  $p$  и  $c$  — концентрации соответственно первой (со связями проводимости  $\sigma_{1\nu}$ ) и второй (со связями проводимости  $\sigma_{2\nu}$ ) компонент, а  $(V_0 - V_{\mathbf{i}_\nu})^{(i)}$  — падение напряжения на выделенной связи с проводимостью  $\sigma_{i\nu}$ .

Поместим решетку во внешнее однородное поле  $\mathbf{E}_0$ , направленное вдоль оси  $\nu$ . Разность потенциалов на выделенной связи ищется точно так же, как и в предыдущем разделе. В результате находим

$$(V_0 - V_{\mathbf{i}_\nu})^{(i)} = \frac{\sigma_{e\nu}}{\sigma_{e\nu} - (\sigma_{e\nu} - \sigma_{i\nu})N^{(\nu)}} E_{0\nu}, \quad (46)$$

где в данном случае

$$N^{(\nu)} = \sum_{\mathbf{k}} \sigma_{e\nu} \sin^2 \frac{k_\nu}{2} \times \left( \sigma_{ex} \sin^2 \frac{k_x}{2} + \sigma_{ey} \sin^2 \frac{k_y}{2} + \sigma_{ez} \sin^2 \frac{k_z}{2} \right)^{-1}. \quad (47)$$

Подстановка (46) в (45) при  $\mathbf{E}_0 = \langle \mathbf{E} \rangle$  дает искомые уравнения метода ЕМА для анизотропной двухкомпонентной решетки (ср. с [8]):

$$p \frac{\sigma_{e\nu} - \sigma_{1\nu}}{\sigma_{e\nu} - (\sigma_{e\nu} - \sigma_{1\nu})N^{(\nu)}} + c \frac{\sigma_{e\nu} - \sigma_{2\nu}}{\sigma_{e\nu} - (\sigma_{e\nu} - \sigma_{2\nu})N^{(\nu)}} = 0. \quad (48)$$

Для  $n$ -компонентной решетки эти уравнения имеют вид

$$\sum_{i=1}^n c_i \frac{\sigma_{e\nu} - \sigma_{i\nu}}{\sigma_{e\nu} - (\sigma_{e\nu} - \sigma_{i\nu})N^{(\nu)}} = 0, \quad (49)$$

где  $c_i$  — концентрация связей с проводимостью  $\sigma_{i\nu}$ . Наконец, если распределение проводимостей связей непрерывно, то уравнение (49) в пределе  $n \rightarrow \infty$  переходит в

$$\left\langle \frac{\sigma_{e\nu} - \sigma_\nu}{\sigma_{e\nu} - (\sigma_{e\nu} - \sigma_\nu)N^{(\nu)}} \right\rangle = 0. \quad (50)$$

Здесь усреднение происходит по ансамблю с функцией распределения  $\mathcal{F}(\sigma_\nu)$ . Так, для двухкомпонентной решетки

$$\mathcal{F}(\sigma_\nu) = p\delta(\sigma_\nu - \sigma_{1\nu}) + c\delta(\sigma_\nu - \sigma_{2\nu}), \quad (51)$$

и из (50) следует уравнение (48).

Отметим, что в работе [8] был проведен численный эксперимент на анизотропной квадратной решетке  $20 \times 20$ . Сравнение его результатов с предсказаниями решеточного метода ЕМА показало, что это приближение удовлетворительно описывает проводимость такой решетки в широком диапазоне изменения концентрации за исключением критической области.

В случае континуальной задачи уравнения метода ЕМА для бинарного анизотропного композита с включениями сферической формы радиуса  $R$  имеют вид (см., например, [9])

$$p \frac{\sigma_{e\nu} - \sigma_{1\nu}}{\sigma_{e\nu} - (\sigma_{e\nu} - \sigma_{1\nu})n^{(\nu)}} + c \frac{\sigma_{e\nu} - \sigma_{2\nu}}{\sigma_{e\nu} - (\sigma_{e\nu} - \sigma_{2\nu})n^{(\nu)}} = 0, \quad (52)$$

где  $n^{(\nu)}$  — коэффициенты деполяризации эллипсоида с полуосями

$$a_\nu = \frac{R}{\sqrt{\sigma_{e\nu}}}. \quad (53)$$

Этими же уравнениями в рамках метода ЕМА описывается проводимость бинарной случайно-неоднородной анизотропной среды.

Сравнение (52) с (48) показывает, что величины  $N^{(\nu)}$  в решеточном методе ЕМА выполняют ту же роль, что и коэффициенты деполяризации  $n^{(\nu)}$  в континуальном.

### 6. КОЭФФИЦИЕНТЫ $N^{(\nu)}$ И $n^{(\nu)}$

Свойства коэффициентов  $N^{(\nu)}$  рассмотрены в Приложении. Приведем основные результаты.

1. В двумерном случае решеточные коэффициенты

$$N^{(\nu)} = \sum_{\mathbf{k}} \sigma_\nu \sin^2 \frac{k_\nu}{2} \times \left( \sigma_x \sin^2 \frac{k_x}{2} + \sigma_y \sin^2 \frac{k_y}{2} \right)^{-1}, \quad \nu = x, y \quad (54)$$

могут быть вычислены в аналитическом виде (ср. с [8])

$$N^{(x)} = \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{1}{\gamma}, \quad N^{(y)} = \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg} \gamma, \quad (55) \\ \gamma = \sqrt{\sigma_y / \sigma_x}.$$

Поскольку  $\operatorname{arctg} x + \operatorname{arctg}(1/x) = \pi/2$  при  $x > 0$  [10], выражения (55) очевидным образом удовлетворяют соотношению  $N^{(x)} + N^{(y)} = 1$ .

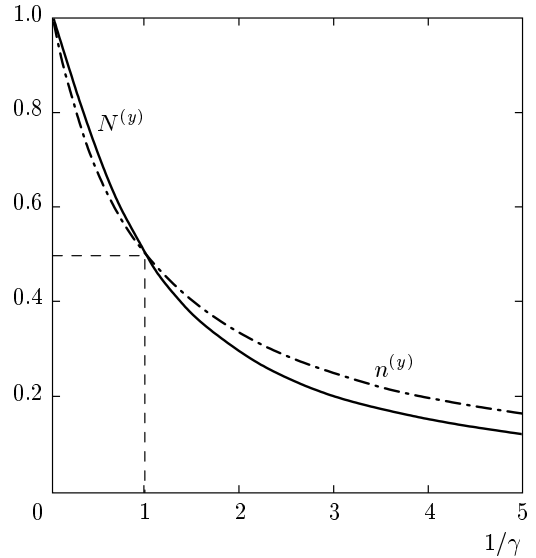


Рис. 1. Коэффициент  $N^{(y)}$  для квадратной решетки как функция  $1/\gamma$  (сплошная линия). Штрихпунктирная линия — аналогичная зависимость коэффициента деполяризации  $n^{(y)}$  эллипса (эллиптического цилиндра)

Для коэффициентов деполяризации эллипса (эллиптического цилиндра) с полуосями  $a_x$  и  $a_y$  имеем

$$n^{(x)} = \frac{a_y}{a_x + a_y}, \quad n^{(y)} = \frac{a_x}{a_x + a_y}. \quad (56)$$

При  $a_\nu = R/\sqrt{\sigma_\nu}$  из (56) следуют выражения

$$n^{(x)} = \frac{1}{1 + \gamma}, \quad n^{(y)} = \frac{\gamma}{1 + \gamma}, \quad (57) \\ \gamma = \sqrt{\sigma_y / \sigma_x}.$$

В изотропном случае имеем

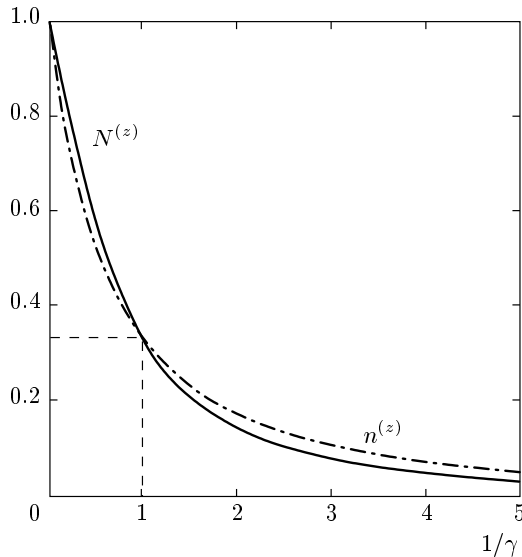
$$\gamma = 1 : \quad N^{(x)} = N^{(y)} = 1/2, \quad (58) \\ n^{(x)} = n^{(y)} = 1/2.$$

Зависимость величин  $N^{(y)}$  и  $n^{(y)}$  от  $1/\gamma$  представлена на рис. 1.

В различных предельных случаях из (55) и (57) следует

$$\gamma \ll 1 : \quad N^{(y)} \approx \frac{2}{\pi} \gamma, \quad n^{(y)} \approx \gamma, \quad (59)$$

$$|\gamma - 1| \ll 1 : \quad N^{(y)} \approx \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi}(\gamma - 1), \quad (60) \\ n^{(y)} \approx \frac{1}{2} + \frac{1}{4}(\gamma - 1),$$



**Рис. 2.** Коэффициент  $N^{(z)}$  для простой кубической решетки с одноосной анизотропией как функция  $1/\gamma$  (сплошная линия). Штрихпунктирная линия — аналогичная зависимость коэффициента деполяризации  $n^{(z)}$  эллипсоида вращения

$$\gamma \gg 1 : N^{(y)} \approx 1 - \frac{2}{\pi\gamma}, \quad n^{(y)} \approx 1 - \frac{1}{\gamma}. \quad (61)$$

Как видно из выражений (59)–(61), функциональная зависимость  $N^{(y)}$  и  $n^{(y)}$  от  $\gamma$  одинакова во всех рассмотренных случаях. Различие состоит только в численных коэффициентах.

**2.** Для простой кубической решетки коэффициенты

$$N^{(\nu)} = \sum_{\mathbf{k}} \sigma_{\nu} \sin^2 \frac{k_{\nu}}{2} \times \left( \sigma_x \sin^2 \frac{k_x}{2} + \sigma_y \sin^2 \frac{k_y}{2} + \sigma_z \sin^2 \frac{k_z}{2} \right)^{-1} \quad (62)$$

( $\nu = x, y, z$ ) в общем случае могут быть определены только численными методами. При одноосной ( $\sigma_x = \sigma_y \neq \sigma_z$ ) анизотропии решетки величина  $N^{(z)}$  как функция  $1/\gamma$  представлена на рис. 2, где

$$\gamma = \sqrt{\frac{\sigma_z}{\sigma_x}} \quad (63)$$

— параметр, характеризующий степень анизотропии решетки.

На рис. 2 приведена также зависимость от  $1/\gamma$  коэффициента деполяризации  $n^{(z)}$  эллипсоида вращения ( $a_x = a_y \neq a_z$ ). Соответствующие аналитические выражения для  $n^{(z)}$  имеют вид [11]

$$\gamma < 1 : n^{(z)} = \frac{1 - \epsilon^2}{\epsilon^3} \left\{ \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \epsilon}{1 - \epsilon} - \epsilon \right\}, \quad (64)$$

$$\epsilon = \sqrt{1 - \gamma^2},$$

$$\gamma > 1 : n^{(z)} = \frac{1 + \epsilon^2}{\epsilon^3} \{ \epsilon - \arctg \epsilon \}, \quad (65)$$

$$\epsilon = \sqrt{\gamma^2 - 1}.$$

Здесь учтено, что в согласии с (53)  $a_x/a_z = \sqrt{\sigma_z/\sigma_x} = \gamma$ .

Для решетки с одноосной анизотропией коэффициент  $N^{(z)}$  в некоторых предельных случаях может быть найден в аналитическом виде. Так, при малых  $\gamma$  (модель слоистого кристалла с сильной анизотропией  $\sigma_z \ll \sigma_x = \sigma_y$ ) имеем

$$\gamma \ll 1 : N^{(z)} \approx \frac{\gamma^2}{\pi} \left\{ \ln \frac{1}{\gamma} + \frac{5}{2} \ln 2 - \frac{1}{2} \right\}, \quad (66)$$

$$n^{(z)} \approx \frac{\gamma^2}{2} \left\{ \ln \frac{1}{\gamma} + \ln 2 - 1 \right\}.$$

При малой анизотропии

$$|\gamma - 1| \ll 1 : N^{(z)} \approx \frac{1}{3} + 0.336(\gamma - 1), \quad (67)$$

$$n^{(z)} \approx \frac{1}{3} + \frac{4}{15}(\gamma - 1).$$

При больших  $\gamma$  (модель нитевидного кристалла с сильной анизотропией  $\sigma_z \gg \sigma_x = \sigma_y$ )

$$\gamma \gg 1 : N^{(z)} \approx 1 - \frac{0.958}{\gamma}, \quad (68)$$

$$n^{(z)} \approx 1 - \frac{\pi}{2\gamma}.$$

В выражениях (66)–(68) приведены и соответствующие разложения для коэффициента деполяризации  $n^{(z)}$ .

Заметим, что функциональная зависимость  $N^{(\nu)}$  от параметра анизотропии  $\gamma$  во всех рассмотренных предельных случаях та же, что и коэффициентов деполяризации  $n^{(\nu)}$ . Различие состоит только в количественном отношении — в значениях численных величин в соответствующих выражениях для  $N^{(\nu)}$  и  $n^{(\nu)}$ . Следует ожидать поэтому, что по крайней мере на качественном уровне компьютерные эксперименты на решетках адекватно описывают проводимость неупорядоченных анизотропных композитов.

**ПРИЛОЖЕНИЕ**

1. Рассмотрим сначала двумерный случай. Запишем коэффициент  $N^{(x)}$  из (54) в следующем виде:

$$N^{(x)} = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{(1 - \cos k_x) dk_x dk_y}{(1 - \cos k_x) + \gamma^2(1 - \cos k_y)}, \quad (\text{A.1})$$

где  $\gamma$  — то же, что и в (55). Согласно формуле (446.00) из [12]

$$\int_0^\pi \frac{dx}{a + b \cos x} = \frac{\pi}{\sqrt{a^2 - b^2}}, \quad a^2 > b^2. \quad (\text{A.2})$$

Поэтому интегрирование в (A.1) по  $k_y$  дает

$$N^{(x)} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \sqrt{\frac{1 - \cos k_x}{1 - \cos k_x + 2\gamma^2}} dk_x. \quad (\text{A.3})$$

Поскольку  $1 - \cos k_x = 2 \sin^2(k_x/2)$ , после замены переменной  $k_x/2 = x$  получим

$$N^{(x)} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{\sin x dx}{\sqrt{\gamma^2 + \sin^2 x}}. \quad (\text{A.4})$$

Введя переменную  $t = \cos x$ , приведем (A.4) к табличному интегралу:

$$N^{(x)} = \frac{2}{\pi} \arcsin \frac{1}{\sqrt{1 + \gamma^2}}. \quad (\text{A.5})$$

Аналогичным образом для коэффициента  $N^{(y)}$  получим выражение

$$N^{(y)} = \frac{2}{\pi} \arcsin \frac{\gamma}{\sqrt{1 + \gamma^2}}. \quad (\text{A.6})$$

Согласно [10],

$$\arcsin \frac{x}{\sqrt{1 + x^2}} = \arctg x, \quad (\text{A.7})$$

так что выражения (A.5) и (A.6) принимают вид (см., например, [8])

$$N^{(x)} = \frac{2}{\pi} \arctg \frac{1}{\gamma}, \quad N^{(y)} = \frac{2}{\pi} \arctg \gamma. \quad (\text{A.8})$$

2. Для трехмерной решетки коэффициенты  $N^{(\nu)}$  в общем случае должны определяться численными методами. В то же время в некоторых предельных случаях зависимость коэффициента  $N^{(z)}$  от параметра анизотропии  $\gamma$  может быть найдена в аналитическом виде.

Запишем коэффициент  $N^{(z)}$  из (62) для простой кубической решетки с одноосной анизотропией ( $\sigma_x = \sigma_y \neq \sigma_z$ ) в виде

$$N^{(z)} = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi \int_0^\pi dk_x dk_y dk_z \gamma^2 \sin^2 \frac{k_z}{2} \times \left( \sin^2 \frac{k_x}{2} + \sin^2 \frac{k_y}{2} + \gamma^2 \sin^2 \frac{k_z}{2} \right)^{-1} \quad (\text{A.9})$$

с  $\gamma$  из (63). Выражение (A.9) можно представить также следующим образом:

$$N^{(z)} = 1 - \frac{1}{\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi \int_0^\pi dk_x dk_y dk_z \times \left( \sin^2 \frac{k_x}{2} + \sin^2 \frac{k_y}{2} \right) \times \left( \sin^2 \frac{k_x}{2} + \sin^2 \frac{k_y}{2} + \gamma^2 \sin^2 \frac{k_z}{2} \right)^{-1}. \quad (\text{A.10})$$

Положив  $\sin^2(k_z/2) = (1 - \cos k_z)/2$  и проинтегрировав затем по  $k_z$  с помощью формулы (A.2), приведем (A.10) к виду

$$N^{(z)} = \frac{4}{\pi^2} \int_0^{\pi/2} dx \times \int_0^{\pi/2} \left\{ 1 - \sqrt{\frac{\sin^2 x + \sin^2 y}{\gamma^2 + \sin^2 x + \sin^2 y}} \right\} dy. \quad (\text{A.11})$$

Для нитевидной ( $\gamma > 1$ ) решеточной модели в случае сильной анизотропии из (A.11) следует

$$\gamma \gg 1: \quad N^{(z)} \approx 1 - \frac{1}{\gamma} I_1, \quad I_1 \approx 0.958, \quad (\text{A.12})$$

где

$$I_1 = \frac{4}{\pi^2} \int_0^{\pi/2} dx \int_0^{\pi/2} \sqrt{\sin^2 x + \sin^2 y} dy. \quad (\text{A.13})$$

Для слоистой ( $\gamma < 1$ ) решеточной модели при сильной анизотропии ( $\gamma \ll 1$ ) зависимость  $N^{(z)}$  от параметра  $\gamma$  содержит логарифм. Для вычисления коэффициента  $N^{(z)}$  в этом случае поступим следующим образом. Введем величину  $\rho$  такую, что

$$\gamma \ll \rho \ll 1, \quad (\text{A.14})$$

и разобьем интеграл в (A.11) на две части:



$$N^{(z)} = \frac{4}{\pi^2} \{J_1 + J_2\}. \quad (A.15)$$

В интеграле  $J_1$  интегрирование ограничено четвертью круга радиуса  $\rho$  в первом квадранте ( $0 \leq \varphi \leq \pi/2$ ):

$$J_1 = \iint_{r \leq \rho} \left\{ 1 - \sqrt{\frac{\sin^2 x + \sin^2 y}{\gamma^2 + \sin^2 x + \sin^2 y}} \right\} dx dy, \quad (A.16)$$

где  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ . Так как  $x \leq \rho \ll 1$  и  $y \leq \rho \ll 1$ , этот интеграл принимает вид

$$J_1 \approx \int_0^{\pi/2} d\varphi \int_0^{\rho} \left( 1 - \frac{r}{\sqrt{\gamma^2 + r^2}} \right) r dr, \quad (A.17)$$

или

$$J_1 \approx \frac{\pi\gamma^2}{2} \int_0^{\rho/\gamma} \left( 1 - \frac{x}{\sqrt{1+x^2}} \right) x dx. \quad (A.18)$$

Поскольку

$$\int \frac{x^2 dx}{\sqrt{1+x^2}} = \frac{x}{2} \sqrt{1+x^2} - \frac{1}{2} \ln|x + \sqrt{1+x^2}|, \quad (A.19)$$

из (A.18) следует

$$J_1 \approx \frac{\pi\gamma^2}{4} \left\{ \frac{\rho^2}{\gamma^2} - \frac{\rho}{\gamma} \sqrt{1 + \frac{\rho^2}{\gamma^2}} + \ln \left( \frac{\rho}{\gamma} + \sqrt{1 + \frac{\rho^2}{\gamma^2}} \right) \right\}. \quad (A.20)$$

Отсюда с учетом условия  $\rho/\gamma \gg 1$  находим

$$J_1 \approx \frac{\pi\gamma^2}{4} \left\{ \ln \frac{2\rho}{\gamma} - \frac{1}{2} \right\}. \quad (A.21)$$

Во втором интеграле из (A.15) существенны  $x \gg \gamma$  и  $y \gg \gamma$ , так что в нем проведем разложение по  $\gamma$ :

$$J_2 \approx \frac{\gamma^2}{2} \iint_{r \geq \rho} \frac{dx dy}{\sin^2 x + \sin^2 y}. \quad (A.22)$$

Интегрирование в (A.22) ведется по площади квадрата со стороной  $\pi/2$  за вычетом четверти круга радиуса  $\rho$ . Поэтому этот интеграл может быть представлен в виде суммы двух слагаемых:

$$J_2 = J_2^{(1)} + J_2^{(2)}, \quad (A.23)$$

где

$$J_2^{(1)} = \frac{\gamma^2}{2} \int_0^{\rho} dx \int_0^{\pi/2} \frac{dy}{\sin^2 x + \sin^2 y}, \quad (A.24)$$

$$J_2^{(2)} = \frac{\gamma^2}{2} \int_{\rho}^{\pi/2} dx \int_0^{\pi/2} \frac{dy}{\sin^2 x + \sin^2 y}. \quad (A.25)$$

Согласно формуле (436.5) из [12],

$$\int \frac{dx}{a^2 + b^2 \sin^2 x} = \frac{1}{a\sqrt{a^2 + b^2}} \times \times \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{a^2 + b^2} \operatorname{tg} x}{a}, \quad (A.26)$$

так что

$$\int_{\sqrt{\rho^2 - x^2}}^{\pi/2} \frac{dy}{\sin^2 x + \sin^2 y} = \frac{1}{\sin x \sqrt{1 + \sin^2 x}} \times \times \left\{ \frac{\pi}{2} - \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{1 + \sin^2 x} \operatorname{tg} \sqrt{\rho^2 - x^2}}{\sin x} \right\}, \quad (A.27)$$

или, с учетом того, что  $\rho \ll 1$  и  $x \ll 1$ ,

$$\int_{\sqrt{\rho^2 - x^2}}^{\pi/2} \frac{dy}{\sin^2 x + \sin^2 y} \approx \approx \frac{1}{x} \left\{ \frac{\pi}{2} - \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{\rho^2 - x^2}}{x} \right\}. \quad (A.28)$$

Поэтому интеграл  $J_2^{(1)}$  после подстановки  $x = \rho t$  принимает вид

$$J_2^{(1)} \approx \frac{\gamma^2}{2} \int_0^1 \left\{ \frac{\pi}{2} - \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{1-t^2}}{t} \right\} \frac{dt}{t}. \quad (A.29)$$

Интегрирование по частям дает

$$J_2^{(1)} \approx -\frac{\gamma^2}{2} \int_0^1 \frac{\ln t}{\sqrt{1-t^2}} dt, \quad (A.30)$$

после чего с учетом формулы (863.41) из [12] получаем

$$J_2^{(1)} \approx \frac{\pi\gamma^2}{4} \ln 2. \quad (A.31)$$

Для величины  $J_2^{(2)}$  из (A.25) после интегрирования по переменной  $y$  с помощью формулы (A.26) получаем

$$J_2^{(2)} \approx \frac{\pi\gamma^2}{4} \int_{\rho}^{\pi/2} \frac{dx}{\sin x \sqrt{1 + \sin^2 x}}. \quad (A.32)$$

Подстановка  $\cos x = t$  дает

$$J_2^{(2)} \approx \frac{\pi\gamma^2}{4} \int_0^{\cos \rho} \frac{dt}{(1-t^2)\sqrt{2-t^2}}, \quad (\text{A.33})$$

так что

$$J_2^{(2)} \approx \frac{\pi\gamma^2}{8} \ln \left| \frac{\sqrt{2-t^2} + t}{\sqrt{2-t^2} - t} \right|_0^{\cos \rho}. \quad (\text{A.34})$$

Здесь использован частный случай формулы (387) из [12]. Поскольку  $\rho \ll 1$ , из (A.34) следует

$$J_2^{(2)} \approx \frac{\pi\gamma^2}{8} \ln \frac{2}{\rho^2}. \quad (\text{A.35})$$

В результате

$$J_2 = J_2^{(1)} + J_2^{(2)} \approx \frac{3\pi\gamma^2}{8} \ln 2 - \frac{\pi\gamma^2}{4} \ln \rho. \quad (\text{A.36})$$

Подстановка (A.21) и (A.36) в (A.15) дает окончательно

$$\gamma \ll 1: \quad N^{(z)} \approx \frac{\gamma^2}{2\pi} \left( 2 \ln \frac{1}{\gamma} + 5 \ln 2 - 1 \right). \quad (\text{A.37})$$

Отметим, что  $5 \ln 2 - 1 = 2.4657\dots$ , в то время как в работе [8] для соответствующей константы приведено несколько иное значение: 2.3557.

При  $\gamma = 1$ , как и в непрерывной задаче,  $N^{(x)} = N^{(y)} = N^{(z)} = 1/3$ . При параметре анизотропии, близком к единице, имеем

$$|\gamma - 1| \ll 1: \quad N^{(z)} \approx \frac{1}{3} + (\gamma^2 - 1)I_2, \quad (\text{A.38})$$

$$I_2 \approx 0.168,$$

где

$$I_2 = \frac{16}{\pi^3} \int_0^{\pi/2} dx \int_0^{\pi/2} dy \times$$

$$\times \int_0^{\pi/2} dz \frac{\sin^2 x \sin^2 y}{(\sin^2 x + \sin^2 y + \sin^2 z)^2}. \quad (\text{A.39})$$

## ЛИТЕРАТУРА

1. В. И. Шкловский, Phys. Stat. Sol. B **85**, K111 (1978).
2. Б. И. Шкловский, Письма в ЖТФ **7**, 1312 (1981).
3. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **82**, 2053 (1982).
4. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **139**, 378 (2011).
5. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **140**, 976 (2011).
6. С. J. Lobb, D. J. Frank, and M. Tinkham, Phys. Rev. B **23**, 2262 (1981).
7. S. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys. **45**, 574 (1973).
8. J. Bernasconi, Phys. Rev. B **9**, 4575 (1974).
9. Б. Я. Балагуров, ФТТ **27**, 2375 (1985).
10. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и производений*, Физматгиз, Москва (1962).
11. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1992).
12. Г. Б. Двайт, *Таблицы интегралов*, Наука, Москва (1966).