

К ТЕОРИИ ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫХ СВОЙСТВ КОМПОЗИТОВ. РЕШЕТОЧНАЯ МОДЕЛЬ

*Б. Я. Балагуров**

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

Поступила в редакцию 14 января 2015 г.

Рассмотрена постановка задачи о гальваномагнитных свойствах композитов на решеточной модели. Определены эффективные гальваномагнитные характеристики 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 тензор эффективной проводимости $\hat{\sigma}_e$ бинарной решеточной модели вычислен в линейном по c приближении. Дан вывод уравнений метода эффективной среды для рассмотренной решеточной задачи. Проведено сравнение с соответствующими результатами для модели сплошной среды.

DOI: 10.7868/S0044451015070135

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из основных методов экспериментального изучения свойств металлов и полупроводников является измерение их различных гальваномагнитных характеристик (коэффициента Холла, магнитосопротивления и т. д.). Подобные макроскопические эксперименты позволяют определять концентрацию и подвижность носителей тока, а также другие микроскопические характеристики однородных по составу проводников. Возможность извлечения такой информации из опытных данных обеспечивается, например, развитой электронной теорией металлов [1]. В то же время интерпретация аналогичных экспериментов для композитов встречает серьезные затруднения из-за отсутствия общей теории гальваномагнитных явлений для неоднородных сред.

Теоретическое исследование проводимости композитов в присутствии магнитного поля напряженности \mathbf{H} наталкивается на те же, что и при $H = 0$, трудности принципиального порядка, обусловленные неупорядоченностью таких систем. К ним добавляется появление в задаче дополнительных (по сравнению с изотропной средой при $H = 0$) параметров — омической анизотропии и антисимметрич-

ной холловской составляющей тензора проводимости. Тем не менее в некоторых предельных случаях задача о гальваномагнитных свойствах композитов может быть решена аналитическими методами [2–8].

Так, например, для слабонеоднородной среды тензор эффективной проводимости $\hat{\sigma}_e$ при $H \neq 0$ вычислялся в работах [2–4]. В линейном по концентрации приближении эта задача решалась в работе [5] для сферических включений и в [4] — для включений произвольной формы. Коэффициент Холла в случае слабого магнитного поля исследовался аналитическими методами в работах [6, 7]. Последовательная теория гальваномагнитных свойств бинарных композитов в слабом магнитном поле дана в работе [8], где найдены выражения как для коэффициента Холла, так и для магнитосопротивления. Однако в общем случае аналитическое решение этой проблемы отсутствует.

Ввиду сложности теоретического изучения гальваномагнитных свойств неоднородных сред особую роль приобретает численное исследование соответствующих эффективных характеристик компьютерными методами. Для осуществления подобных экспериментов необходимо выбрать подходящую решеточную модель, на которой возможна постановка задачи о проводимости композита в магнитном поле. Сравнение результатов, полученных для дискретной и непрерывной моделей, позволяет оценить адекватность описания изучаемых явлений в рамках решеточной задачи.

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

В настоящей работе рассмотрены гальваномагнитные свойства дискретной модели, состоящей из пары связанных простых кубических решеток. Для слабонеоднородных решеток развита теория возмущений по малому параметру — отклонению тензора локальной проводимости $\hat{\sigma}(\mathbf{r})$ от его среднего значения $\langle \hat{\sigma} \rangle$. Составляющие тензора эффективной проводимости $\hat{\sigma}_e$ такой решеточной модели вычислены в квадратичном по этому параметру приближении. Оказалось, что в полученное выражение для $\hat{\sigma}_e$ входят решеточные коэффициенты $N^{(\nu)}$ ($\nu = x, y, z$) [9], заменяющие коэффициенты деполяризации эллипсоида $n^{(\nu)}$ в аналогичных формулах для непрерывной среды [4]. 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 теории эффективной среды (метод ЕМА, Effective Media Approximation).

Основные свойства коэффициентов $N^{(\nu)}$ для простой кубической решетки при одноосной анизотропии рассмотрены в работе [9], где было показано, что функциональные зависимости от параметра анизотропии γ величин $N^{(\nu)}$ и $n^{(\nu)}$ одинаковы. Различие состоит только в количественном отношении — в значениях численных величин в соответствующих выражениях для $N^{(\nu)}$ и $n^{(\nu)}$. Это обстоятельство позволяет сделать вывод, что результаты компьютерных экспериментов на рассмотренной в работе решеточной модели дают адекватное на качественном уровне описание гальваномагнитных свойств композитов.

2. МОДЕЛЬ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ

Приведем сначала краткое изложение основных аналитических результатов, полученных для непрерывной модели композита.

В модели сплошной среды для вычисления тензора эффективной проводимости $\hat{\sigma}_e$ необходимо решить систему уравнений постоянного тока:

$$\text{rot } \mathbf{E} = 0, \quad \text{div } \mathbf{j} = 0. \quad (1)$$

В линейной задаче плотность тока \mathbf{j} связана с напряженностью электрического поля \mathbf{E} законом Ома:

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

где тензор $\hat{\sigma}(\mathbf{r})$ описывает локальную проводимость среды, зависящую от координат. Тензор эффективной проводимости $\hat{\sigma}_e$ определяется с помощью соотношения

$$\langle \mathbf{j} \rangle = \hat{\sigma}_e \langle \mathbf{E} \rangle. \quad (3)$$

Здесь $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по объему образца V при $V \rightarrow \infty$.

Проводимость исходно изотропной среды, помещенной в магнитное поле напряженности \mathbf{H} , описывается антисимметричным тензором

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x & \sigma_a & 0 \\ -\sigma_a & \sigma_x & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_z \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Здесь принято, что магнитное поле \mathbf{H} направлено по оси z . В целях упрощения последующих формул в (4) введены обозначения $\sigma_x = \sigma_{xx} = \sigma_{yy}$, $\sigma_z = \sigma_{zz}$, $\sigma_a = \sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$ соответственно для поперечной, продольной и холловской составляющих тензора проводимости.

Для слабонеоднородной среды величина $\delta \hat{\sigma}(\mathbf{r}) = \hat{\sigma}(\mathbf{r}) - \langle \hat{\sigma} \rangle$ мала по сравнению с $\langle \hat{\sigma} \rangle$. В этом случае тензор эффективной проводимости может быть вычислен в квадратичном по $\delta \hat{\sigma}$ приближении. Для составляющих σ_{ex} , σ_{ea} и σ_{ez} тензора $\hat{\sigma}_e$ согласно [4] имеем

$$\sigma_{ex} = \langle \sigma_x \rangle \left\{ 1 - n^{(x)} \left[\frac{\langle (\delta \sigma_x)^2 \rangle}{(\langle \sigma_x \rangle)^2} - \frac{\langle (\delta \sigma_a)^2 \rangle}{(\langle \sigma_x \rangle)^2} \right] \right\}, \quad (5)$$

$$\sigma_{ea} = \langle \sigma_a \rangle \left\{ 1 - 2n^{(x)} \frac{\langle \delta \sigma_x \delta \sigma_a \rangle}{\langle \sigma_x \rangle \langle \sigma_a \rangle} \right\}, \quad (6)$$

$$\sigma_{ez} = \langle \sigma_z \rangle \left\{ 1 - n^{(z)} \frac{\langle (\delta \sigma_z)^2 \rangle}{(\langle \sigma_z \rangle)^2} \right\}. \quad (7)$$

Здесь $n^{(x)}$ и $n^{(z)}$ — коэффициенты деполяризации эллипсоида вращения с полуосями

$$a_x = a_y = \frac{1}{\sqrt{\langle \sigma_x \rangle}}, \quad a_z = \frac{1}{\sqrt{\langle \sigma_z \rangle}}. \quad (8)$$

Выражения (5)–(7) справедливы для слабонеоднородной среды с изотропной бинарной корреляционной функцией для $\delta \sigma(\mathbf{r})$.

Для композита с малой концентрацией ($c \ll 1$) включений сферической формы тензор $\hat{\sigma}_e$ может быть найден в линейном по c приближении. Согласно [4] имеем следующее выражение для $\hat{\sigma}_e$:

$$\hat{\sigma}_e = \hat{\sigma}_1 - c(\hat{\sigma}_1 - \hat{\sigma}_2)\hat{A}. \quad (9)$$

Здесь $\hat{\sigma}_1$ и $\hat{\sigma}_2$ — соответственно тензоры проводимости матрицы и включений. Тензор \hat{A} , имеющий такой же вид, что и (4), входит в выражение для напряженности электрического поля внутри включения $\mathbf{E}^{(i)} = \hat{A} \mathbf{E}_0$, где \mathbf{E}_0 — напряженность внешнего однородного поля. Для составляющих тензора \hat{A} имеем [4]

$$A_x = \frac{\sigma_{1x} [\sigma_{1x} - (\sigma_{1x} - \sigma_{2x}) n^{(x)}]}{\Delta}, \quad (10)$$

$$A_a = \frac{\sigma_{1x}(\sigma_{1a} - \sigma_{2a}) n^{(x)}}{\Delta}, \quad (11)$$

$$A_z = \frac{\sigma_{1z}}{\sigma_{1z} - (\sigma_{1z} - \sigma_{2z}) n^{(z)}}, \quad (12)$$

где

$$\Delta = [\sigma_{1x} - (\sigma_{1x} - \sigma_{2x}) n^{(x)}]^2 + [(\sigma_{1a} - \sigma_{2a}) n^{(x)}]^2. \quad (13)$$

В формулах (10)–(13) $n^{(x)}$ и $n^{(z)}$ — коэффициенты деполяризации эллипсоида с полуосями

$$a_x = a_y = \frac{1}{\sqrt{\sigma_{1x}}}, \quad a_z = \frac{1}{\sqrt{\sigma_{1z}}}. \quad (14)$$

Заметим, наконец, что основное уравнение приближения эффективной среды (метода ЕМА) для бинарного композита имеет вид

$$p(\hat{\sigma}_e - \hat{\sigma}_1)\hat{A}^{(1)} + (1-p)(\hat{\sigma}_e - \hat{\sigma}_2)\hat{A}^{(2)} = 0. \quad (15)$$

Здесь p — концентрация (доля занимаемого объема) первой компоненты. Выражения для составляющих тензоров $\hat{A}^{(i)}$ следуют из (10)–(13) при заменах $\hat{\sigma}_1 \rightarrow \hat{\sigma}_e$, $\hat{\sigma}_2 \rightarrow \hat{\sigma}_i$ ($i = 1, 2$). В этом случае $n^{(x)}$ и $n^{(z)}$ — коэффициенты деполяризации эллипсоида с полуосями

$$a_x = a_y = \frac{1}{\sqrt{\sigma_{ex}}}, \quad a_z = \frac{1}{\sqrt{\sigma_{ez}}}. \quad (16)$$

Отметим, что во всех трех случаях в конечные формулы входят одни и те же коэффициенты деполяризации эллипсоида $n^{(\alpha)}$, различающиеся только величиной полуосей. При этом размерность полуосей (8), (14) и (16) несущественна, так как они входят в выражения для $n^{(\alpha)}$ только в виде отношения a_x/a_z .

3. РЕШЕТОЧНАЯ МОДЕЛЬ

В работе [10] предложено моделировать гальваномагнитные явления в неоднородной среде с помощью двух решеток — основной и вспомогательной. Основная решетка является простой кубической, узлы которой заданы дискретным радиус-вектором $\mathbf{r} = n_1 \mathbf{i}_x + n_2 \mathbf{i}_y + n_3 \mathbf{i}_z$, где $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ и \mathbf{i}_β — орт координаты β ($\beta = x, y, z$). В дальнейшем ограничимся рассмотрением так называемой задачи связей. В этой задаче в случае неупорядоченной бинарной решетки каждая связь с вероятностью p принадлежит к первому типу (с проводимостями $\sigma_{1x}, \sigma_{1a}, \sigma_{1z}$), а с вероятностью $1-p$ — ко второму (с проводимостями $\sigma_{2x}, \sigma_{2a}, \sigma_{2z}$).

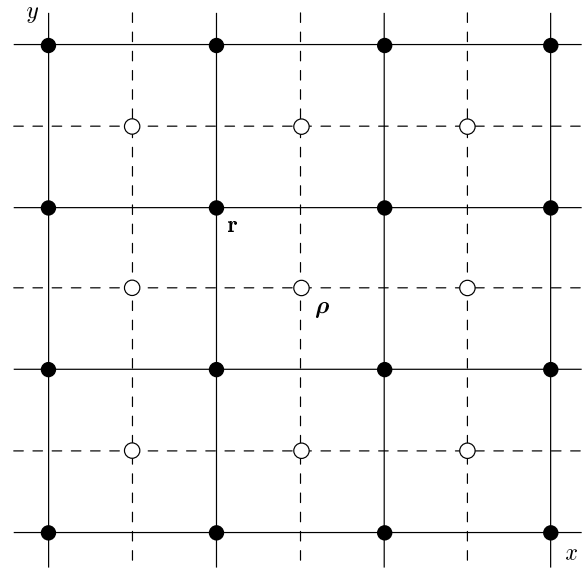


Рис. 1

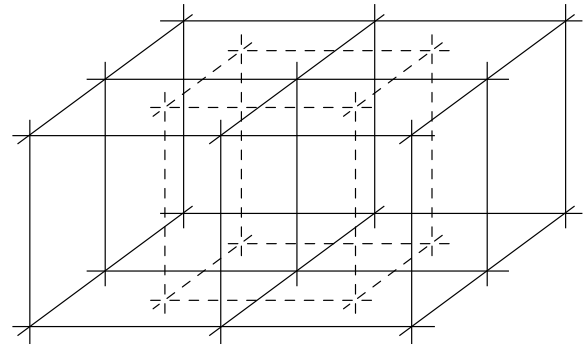


Рис. 2

Вспомогательная решетка (также простая кубическая) получается из основной переходом к дуальной (рис. 1) в плоскости (x, y) и параллельным переносом вертикальных (вдоль оси z) связей — см. рис. 2. При случайном распределении связей основная и вспомогательная решетки равноправны.

Дискретным аналогом уравнения постоянного тока $\text{div } \mathbf{j} = 0$ является первый закон Кирхгофа — равенство суммы входящих в узел \mathbf{r} токов сумме выходящих из \mathbf{r} токов. Для рассматриваемой простой кубической решетки закон Кирхгофа имеет вид

$$\sum_{\beta} \{j_{\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{i}_\beta} - j_{\mathbf{r} - \mathbf{i}_\beta, \mathbf{r}}\} = 0, \quad (17)$$

где $\beta = x, y, z$. В уравнении (17) $j_{\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{i}_\beta}$ — ток, протекающий по связи, соединяющей узлы \mathbf{r} и $\mathbf{r} + \mathbf{i}_\beta$.

Припишем каждому узлу \mathbf{r} основной решетки потенциал $V_{\mathbf{r}}$; соответственно каждому узлу

$$\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r} + \frac{1}{2} \mathbf{i}_x - \frac{1}{2} \mathbf{i}_y \quad (18)$$

вспомогательной решетки припишем потенциал $U_{\boldsymbol{\rho}}$. Тогда для выходящих из узла \mathbf{r} токов будем иметь:

$$\begin{aligned} j_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_x} &= \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^x (V_{\mathbf{r}} - V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}) + \\ &\quad + \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^a (U_{\boldsymbol{\rho}} - U_{\boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_y}), \\ j_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_y} &= \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_y}^x (V_{\mathbf{r}} - V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_y}) + \\ &\quad + \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_y}^a (U_{\boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_y} - U_{\boldsymbol{\rho}-\mathbf{i}_x+\mathbf{i}_y}), \\ j_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_z} &= \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_z}^z (V_{\mathbf{r}} - V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_z}). \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь $\sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_{\beta}}^{\nu}$ (где $\nu = x, z, a$) — соответствующая проводимость связи между узлами \mathbf{r} и $\mathbf{r} + \mathbf{i}_{\beta}$. Выражения для входящих в узел \mathbf{r} токов $j_{\mathbf{r}-\mathbf{i}_{\beta}, \mathbf{r}}$ следуют из (19) при заменах $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} - \mathbf{i}_{\beta}$ (с $\beta = x, y, z$) и $\boldsymbol{\rho} \rightarrow \boldsymbol{\rho} - \mathbf{i}_{\beta}$ (с $\beta = x, y$).

Подстановка в уравнение (17) токов $j_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_{\beta}}$ из (19) и соответствующих выражений для $j_{\mathbf{r}-\mathbf{i}_{\beta}, \mathbf{r}}$ дает

$$\begin{aligned} \sum_{\beta} \sum_{\Delta_{\beta}} \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\Delta_{\beta}}^{\beta} (V_{\mathbf{r}} - V_{\mathbf{r}+\Delta_{\beta}}) &= \\ &= -\sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^a (U_{\boldsymbol{\rho}} - U_{\boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_y}) + \\ &+ \sigma_{\mathbf{r}-\mathbf{i}_x, \mathbf{r}}^a (U_{\boldsymbol{\rho}-\mathbf{i}_x} - U_{\boldsymbol{\rho}-\mathbf{i}_x+\mathbf{i}_y}) + \\ &+ \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_y}^a (U_{\boldsymbol{\rho}-\mathbf{i}_x+\mathbf{i}_y} - U_{\boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_y}) - \\ &\quad - \sigma_{\mathbf{r}-\mathbf{i}_y, \mathbf{r}}^a (U_{\boldsymbol{\rho}-\mathbf{i}_x} - U_{\boldsymbol{\rho}}). \end{aligned} \quad (20)$$

Здесь Δ_{β} принимает значения $\pm \mathbf{i}_{\beta}$.

Для выходящих из узла $\boldsymbol{\rho}$ токов на вспомогательной решетке соответственно имеем

$$\begin{aligned} j_{\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_x} &= \sigma_{\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_x}^x (U_{\boldsymbol{\rho}} - U_{\boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_x}) + \\ &\quad + \sigma_{\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_x}^a (V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_x-\mathbf{i}_y} - V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}), \\ j_{\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_y} &= \sigma_{\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_y}^x (U_{\boldsymbol{\rho}} - U_{\boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_y}) + \\ &\quad + \sigma_{\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_y}^a (V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_x} - V_{\mathbf{r}}), \\ j_{\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_z} &= \sigma_{\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_z}^z (U_{\boldsymbol{\rho}} - U_{\boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_z}). \end{aligned} \quad (21)$$

Уравнение Кирхгофа для вспомогательной решетки имеет вид

$$\begin{aligned} \sum_{\beta} \sum_{\Delta_{\beta}} \sigma_{\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}+\Delta_{\beta}}^{\beta} (U_{\boldsymbol{\rho}} - U_{\boldsymbol{\rho}+\Delta_{\beta}}) &= \\ &= -\sigma_{\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_x}^a (V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_x-\mathbf{i}_y} - V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}) + \\ &+ \sigma_{\boldsymbol{\rho}-\mathbf{i}_x, \boldsymbol{\rho}}^a (V_{\mathbf{r}-\mathbf{i}_y} - V_{\mathbf{r}}) + \sigma_{\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_y}^a (V_{\mathbf{r}} - V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}) - \\ &\quad - \sigma_{\boldsymbol{\rho}-\mathbf{i}_y, \boldsymbol{\rho}}^a (V_{\mathbf{r}-\mathbf{i}_y} - V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_x-\mathbf{i}_y}). \end{aligned} \quad (22)$$

В уравнениях (20) и (22) $\beta = x, y, z$ и

$$\sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\Delta_{\beta}}^y = \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\Delta_{\beta}}^x, \quad \sigma_{\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}+\Delta_{\beta}}^y = \sigma_{\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}+\Delta_{\beta}}^x.$$

В соответствии с процедурой построения вспомогательной решетки имеют место следующие равенства:

$$\begin{aligned} \sigma_{\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_x}^{\nu} &= \sigma_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_x-\mathbf{i}_y, \mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^{\nu}, \quad \sigma_{\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_y}^{\nu} = \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^{\nu}, \\ \sigma_{\boldsymbol{\rho}-\mathbf{i}_x, \boldsymbol{\rho}}^{\nu} &= \sigma_{\mathbf{r}-\mathbf{i}_y, \mathbf{r}}^{\nu}, \\ \sigma_{\boldsymbol{\rho}-\mathbf{i}_y, \boldsymbol{\rho}}^{\nu} &= \sigma_{\mathbf{r}-\mathbf{i}_y, \mathbf{r}+\mathbf{i}_x-\mathbf{i}_y}^{\nu}, \dots, \\ \sigma_{\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_z}^z &= \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_z}^z, \end{aligned} \quad (23)$$

где $\nu = x, a$. Отметим, что уравнения (20) и (22) справедливы для всех узлов \mathbf{r} и $\boldsymbol{\rho}$, кроме, возможно, граничных.

Совместное решение систем уравнений (20) и (22) позволяет найти потенциалы $V_{\mathbf{r}}$ и $U_{\boldsymbol{\rho}}$, что, в свою очередь, дает возможность вычислить гальваномагнитные характеристики исследуемой решеточной модели. Соответствующие эффективные величины σ_{ex} и σ_{ea} находятся из соотношений

$$\begin{aligned} \langle j_x \rangle &= \sigma_{ex} \langle E_x \rangle + \sigma_{ea} \langle E_y \rangle, \\ \langle j_y \rangle &= -\sigma_{ea} \langle E_x \rangle + \sigma_{ex} \langle E_y \rangle. \end{aligned} \quad (24)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \langle j_x \rangle &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{r}} j_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_x}, \\ \langle E_x \rangle &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{r}} (V_{\mathbf{r}} - V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}), \end{aligned} \quad (25)$$

где суммирование ведется по всем узлам основной решетки, число которых $\mathcal{N} \rightarrow \infty$. Аналогично

$$\begin{aligned} \langle j_y \rangle &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\boldsymbol{\rho}} j_{\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_y}, \\ \langle E_y \rangle &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\boldsymbol{\rho}} (U_{\boldsymbol{\rho}} - U_{\boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_y}), \end{aligned} \quad (26)$$

здесь суммирование проводится по всем узлам дополнительной решетки. И, наконец, при определении величины σ_{ez} используем соотношение

$$\langle j_z \rangle = \sigma_{ez} \langle E_z \rangle, \quad (27)$$

где

$$\begin{aligned} \langle j_z \rangle &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{r}} j_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_z}, \\ \langle E_z \rangle &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{r}} (V_{\mathbf{r}} - V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_z}), \end{aligned} \quad (28)$$

или аналогичные формулы для вспомогательной решетки.

Заметим, что если $\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\Delta_\beta}^a$ и $\sigma_{\rho,\rho+\Delta_\beta}^a$ (при $\beta = x, y$) не зависят от координат, то правые части (20) и (22) обращаются в нуль, соответственно холловская составляющая σ_a из уравнений для потенциалов выпадает. Поэтому подстановка

$$\begin{aligned}\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\Delta_\beta}^a &\rightarrow \sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\Delta_\beta}^a + \text{const}, \\ \sigma_{\rho,\rho+\Delta_\beta}^a &\rightarrow \sigma_{\rho,\rho+\Delta_\beta}^a + \text{const}\end{aligned}\quad (29)$$

не меняет уравнения (20) и (22), оставляя неизменными потенциалы $V_{\mathbf{r}}$ и U_{ρ} , хотя токи (19) и (21) при этом очевидным образом преобразуются. Заменам (29) в непрерывном случае имеется аналог — преобразование симметрии [4]

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}', \quad \mathbf{j} = \mathbf{j}' + \hat{C}\mathbf{E}',$$

где \hat{C} — независимый от координат антисимметричный тензор: $C_{\alpha\beta} = -C_{\beta\alpha}$.

4. СЛАБОНЕОДНОРОДНАЯ РЕШЕТКА

Рассмотрим решеточную модель, для которой отклонение проводимостей связей $\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\Delta_\beta}^\nu$ от их среднего значения $\langle\sigma_\nu\rangle$ мало. В этом случае для вычисления эффективных гальваномагнитных характеристик такой модели может быть развита теория возмущений — разложение по степеням малой величины $\delta\hat{\sigma}$. Положим

$$\begin{aligned}\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\Delta_\beta}^\nu &= \langle\sigma_\nu\rangle + \delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\Delta_\beta}^\nu, \\ \sigma_{\rho,\rho+\Delta_\beta}^\nu &= \langle\sigma_\nu\rangle + \delta\sigma_{\rho,\rho+\Delta_\beta}^\nu; \\ V_{\mathbf{r}} &= -\langle\mathbf{E}\rangle \cdot \mathbf{r} + \delta V_{\mathbf{r}}, \quad U_{\rho} = -\langle\mathbf{E}\rangle \cdot \rho + \delta U_{\rho},\end{aligned}\quad (30)$$

где

$$\langle\sigma_\nu\rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\Delta_\beta}^\nu = \frac{1}{N} \sum_{\rho} \sigma_{\rho,\rho+\Delta_\beta}^\nu \quad (31)$$

и составляющие $\langle\mathbf{E}\rangle$ определены в формулах (25), (26) и (28). Средние значения величин $\delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\Delta_\beta}^\nu$, $\delta\sigma_{\rho,\rho+\Delta_\beta}^\nu$, $\delta V_{\mathbf{r}} - \delta V_{\mathbf{r}+\Delta_\beta}$ и $\delta U_{\rho} - \delta U_{\rho+\Delta_\beta}$ равны нулю.

Подстановка выражений (30) в (20) и (22) для линейных по $\delta\hat{\sigma}$ поправок $\delta V^{(1)}$ и $\delta U^{(1)}$ дает следующие уравнения ($\Delta_\beta = \pm\mathbf{i}_\beta$):

$$\begin{aligned}\sum_{\beta} \langle\sigma_\beta\rangle \sum_{\Delta_\beta} (\delta V_{\mathbf{r}}^{(1)} - \delta V_{\mathbf{r}+\Delta_\beta}^{(1)}) &= \\ &= - \sum_{\beta} \sum_{\Delta_\beta} \delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\Delta_\beta}^\beta (\langle\mathbf{E}\rangle \cdot \Delta_\beta) - \\ &- (\delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^a - \delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}-\mathbf{i}_x}^a) (\langle\mathbf{E}\rangle \cdot \mathbf{i}_y) + \\ &+ (\delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{i}_y}^a - \delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}-\mathbf{i}_y}^a) (\langle\mathbf{E}\rangle \cdot \mathbf{i}_x),\end{aligned}\quad (32)$$

$$\begin{aligned}\sum_{\beta} \langle\sigma_\beta\rangle \sum_{\Delta_\beta} (\delta U_{\rho}^{(1)} - \delta U_{\rho+\Delta_\beta}^{(1)}) &= \\ &= - \sum_{\beta} \sum_{\Delta_\beta} \delta\sigma_{\rho,\rho+\Delta_\beta}^\beta (\langle\mathbf{E}\rangle \cdot \Delta_\beta) - \\ &- (\delta\sigma_{\rho,\rho+\mathbf{i}_x}^a - \delta\sigma_{\rho,\rho-\mathbf{i}_x}^a) (\langle\mathbf{E}\rangle \cdot \mathbf{i}_y) + \\ &+ (\delta\sigma_{\rho,\rho+\mathbf{i}_y}^a - \delta\sigma_{\rho,\rho-\mathbf{i}_y}^a) (\langle\mathbf{E}\rangle \cdot \mathbf{i}_x).\end{aligned}\quad (33)$$

В том же приближении из (25), (26), (28) с учетом выражений (19) и (21) находим

$$\begin{aligned}\langle j_x \rangle &= \langle\sigma_x\rangle \langle E_x \rangle + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} \delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^x (\delta V_{\mathbf{r}}^{(1)} - \delta V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^{(1)}) + \\ &+ \langle\sigma_a\rangle \langle E_y \rangle + \frac{1}{N} \sum_{\rho} \delta\sigma_{\rho,\rho+\mathbf{i}_y}^a (\delta U_{\rho}^{(1)} - \delta U_{\rho+\mathbf{i}_y}^{(1)}),\end{aligned}\quad (34)$$

$$\begin{aligned}\langle j_y \rangle &= -\langle\sigma_a\rangle \langle E_x \rangle - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} \delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^a (\delta V_{\mathbf{r}}^{(1)} - \delta V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^{(1)}) + \\ &+ \langle\sigma_x\rangle \langle E_y \rangle + \frac{1}{N} \sum_{\rho} \delta\sigma_{\rho,\rho+\mathbf{i}_y}^x (\delta U_{\rho}^{(1)} - \delta U_{\rho+\mathbf{i}_y}^{(1)}),\end{aligned}\quad (35)$$

$$\begin{aligned}\langle j_z \rangle &= \langle\sigma_z\rangle \langle E_z \rangle + \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} \delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{i}_z}^z (\delta V_{\mathbf{r}}^{(1)} - \delta V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_z}^{(1)}).\end{aligned}\quad (36)$$

Направим $\langle\mathbf{E}\rangle$ вдоль оси x . В этом случае, решая уравнение (32) с помощью фурье-преобразования, получим

$$\begin{aligned}\delta V_{\mathbf{r}}^{(1)} &= \sum_{\mathbf{r}'} \left\{ - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_x}}{\Omega_{\mathbf{k}}} \delta\sigma_{\mathbf{r}',\mathbf{r}'+\mathbf{i}_x}^x e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} + \right. \\ &+ \left. \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_y}}{\Omega_{\mathbf{k}}} \delta\sigma_{\mathbf{r}',\mathbf{r}'+\mathbf{i}_y}^a e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \right\} \langle E_x \rangle,\end{aligned}\quad (37)$$

где

$$\Omega_{\mathbf{k}} = \sum_{\alpha} \langle\sigma_\alpha\rangle \sum_{\Delta_\alpha} (1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\Delta_\alpha}) \quad (38)$$

или, с учетом равенства $1 - \cos k = 2 \sin^2(k/2)$,

$$\Omega_{\mathbf{k}} = 4 \{ \langle\sigma_x\rangle [\sin^2(k_x/2) + \sin^2(k_y/2)] + \langle\sigma_z\rangle \sin^2(k_z/2) \}.\quad (39)$$

Используя выражение (37), находим

$$\begin{aligned}\delta V_{\mathbf{r}}^{(1)} - \delta V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^{(1)} &= \\ &= \sum_{\mathbf{r}'} \left\{ - \sum_{\mathbf{k}} \frac{(1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_x})(1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_x})}{\Omega_{\mathbf{k}}} \times \right. \\ &\quad \times \delta\sigma_{\mathbf{r}',\mathbf{r}'+\mathbf{i}_x}^x e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} + \\ &+ \left. \sum_{\mathbf{k}} \frac{(1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_y})(1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_x})}{\Omega_{\mathbf{k}}} \delta\sigma_{\mathbf{r}',\mathbf{r}'+\mathbf{i}_y}^a e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \right\} \times \\ &\quad \times \langle E_x \rangle.\end{aligned}\quad (40)$$

Аналогичным образом из уравнения (33) получаем

$$\delta U_{\rho}^{(1)} = \sum_{\rho'} \left\{ - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_x}}{\Omega_{\mathbf{k}}} \delta \sigma_{\rho', \rho'+\mathbf{i}_x}^x e^{i\mathbf{k}\cdot(\rho-\rho')} + \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_y}}{\Omega_{\mathbf{k}}} \delta \sigma_{\rho', \rho'+\mathbf{i}_y}^a e^{i\mathbf{k}\cdot(\rho-\rho')} \right\} \langle E_x \rangle. \quad (41)$$

Отсюда находим

$$\begin{aligned} \delta U_{\rho}^{(1)} - \delta U_{\rho+\mathbf{i}_y}^{(1)} &= \\ &= \sum_{\rho'} \left\{ - \sum_{\mathbf{k}} \frac{(1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_x})(1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_y})}{\Omega_{\mathbf{k}}} \times \right. \\ &\quad \times \delta \sigma_{\rho', \rho'+\mathbf{i}_x}^x e^{i\mathbf{k}\cdot(\rho-\rho')} + \\ &\quad \left. + \sum_{\mathbf{k}} \frac{(1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_y})(1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_x})}{\Omega_{\mathbf{k}}} \delta \sigma_{\rho', \rho'+\mathbf{i}_y}^a e^{i\mathbf{k}\cdot(\rho-\rho')} \right\} \times \\ &\quad \times \langle E_x \rangle. \quad (42) \end{aligned}$$

Подставив выражения (40) и (42) в (34), для эффективной проводимости σ_{ex} получим следующее равенство:

$$\begin{aligned} \sigma_{ex} &= \langle \sigma_x \rangle - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}'} \sum_{\mathbf{r}''} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \frac{|1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_x}|^2}{\Omega_{\mathbf{k}}} \delta \sigma_{\mathbf{r}', \mathbf{r}'+\mathbf{i}_x}^x \times \right. \\ &\quad \times \delta \sigma_{\mathbf{r}'', \mathbf{r}''+\mathbf{i}_x}^x e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')} - \\ &\quad - \sum_{\mathbf{k}} \frac{(1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_y})(1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_x})}{\Omega_{\mathbf{k}}} \delta \sigma_{\mathbf{r}', \mathbf{r}'+\mathbf{i}_x}^x \times \\ &\quad \times \delta \sigma_{\mathbf{r}'', \mathbf{r}''+\mathbf{i}_y}^a e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')} \left. \right\} - \\ &- \frac{1}{N} \sum_{\rho'} \sum_{\rho''} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \frac{(1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_x})(1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_y})}{\Omega_{\mathbf{k}}} \times \right. \\ &\quad \times \delta \sigma_{\rho', \rho'+\mathbf{i}_x}^x \delta \sigma_{\rho'', \rho''+\mathbf{i}_y}^a e^{i\mathbf{k}\cdot(\rho'-\rho'')} - \\ &\quad - \sum_{\mathbf{k}} \frac{|1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_y}|^2}{\Omega_{\mathbf{k}}} \delta \sigma_{\rho', \rho'+\mathbf{i}_y}^a \delta \sigma_{\rho'', \rho''+\mathbf{i}_y}^a \times \\ &\quad \times e^{i\mathbf{k}\cdot(\rho'-\rho'')} \left. \right\}. \quad (43) \end{aligned}$$

Здесь учтено, что в рассматриваемом случае $\langle j_x \rangle = \sigma_{ex} \langle E_x \rangle$, так как $\langle E_y \rangle = 0$.

Положив в (43) $\mathbf{r}'' = \mathbf{r} + \mathbf{r}'$ и $\rho'' = \rho + \rho'$, приведем это выражение к виду

$$\begin{aligned} \sigma_{ex} &= \langle \sigma_x \rangle - \sum_{\mathbf{r}} \left\{ K_{xx}^{xx}(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{k}} \frac{|1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_x}|^2}{\Omega_{\mathbf{k}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \right. \\ &\quad - K_{xy}^{xa}(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{k}} \frac{(1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_y})(1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_x})}{\Omega_{\mathbf{k}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \left. \right\} - \\ &- \sum_{\rho} \left\{ K_{xy}^{xa}(\rho) \sum_{\mathbf{k}} \frac{(1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_x})(1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_y})}{\Omega_{\mathbf{k}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\rho} - \right. \\ &\quad \left. - K_{yy}^{aa}(\rho) \sum_{\mathbf{k}} \frac{|1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_y}|^2}{\Omega_{\mathbf{k}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\rho} \right\}. \quad (44) \end{aligned}$$

Здесь

$$K_{\alpha\beta}^{\mu\nu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}'} \delta \sigma_{\mathbf{r}', \mathbf{r}'+\mathbf{i}_\alpha}^\mu \delta \sigma_{\mathbf{r}'+\mathbf{r}, \mathbf{r}'+\mathbf{r}+\mathbf{i}_\beta}^\nu \quad (45)$$

и аналогичное выражение для $K_{\alpha\beta}^{\mu\nu}(\rho)$ — бинарные корреляционные функции. Индексы μ и ν принимают значения x и a , а α и β обозначают координаты x или y .

При случайном распределении компонент корреляционные функции для рассматриваемой задачи связей имеют вид

$$\begin{aligned} K_{xx}^{xx}(\mathbf{r}) &= \langle (\delta \sigma_x)^2 \rangle \delta_{\mathbf{r}, 0}, \\ K_{xy}^{xa}(\mathbf{r}) &= K_{xy}^{xa}(\rho) = 0, \\ K_{yy}^{aa}(\rho) &= \langle (\delta \sigma_a)^2 \rangle \delta_{\rho, 0}, \end{aligned} \quad (46)$$

где

$$\begin{aligned} \langle (\delta \sigma_x)^2 \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} (\delta \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^x)^2, \\ \langle (\delta \sigma_a)^2 \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{\rho} (\delta \sigma_{\rho, \rho+\mathbf{i}_y}^a)^2. \end{aligned} \quad (47)$$

Для такой решетки выражение (44) значительно упрощается:

$$\sigma_{ex} = \langle \sigma_x \rangle \left\{ 1 - N^{(x)} \frac{\langle (\delta \sigma_x)^2 \rangle - \langle (\delta \sigma_a)^2 \rangle}{\langle (\sigma_x) \rangle^2} \right\}. \quad (48)$$

Здесь $N^{(x)}$ — один из решеточных коэффициентов (при $\alpha = x$), введенных в работе [9]:

$$N^{(\alpha)} = \langle \sigma_\alpha \rangle \sum_{\mathbf{k}} \frac{|1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_\alpha}|^2}{\Omega_{\mathbf{k}}}, \quad (49)$$

или в развернутой записи

$$\begin{aligned} N^{(\alpha)} &= \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{\langle \sigma_\alpha \rangle \sin^2 \frac{k_\alpha}{2}}{\langle \sigma_x \rangle \left[\sin^2 \frac{k_x}{2} + \sin^2 \frac{k_y}{2} \right] + \langle \sigma_z \rangle \sin^2 \frac{k_z}{2}}. \end{aligned} \quad (50)$$

В формуле (48) учтено, что $N^{(y)} = N^{(x)}$.

Подстановка (40) и (42) в (35) дает для величины σ_{ea} следующее выражение:

$$\begin{aligned} \sigma_{ea} = & \langle \sigma_a \rangle + \sum_{\mathbf{r}} \left\{ -K_{xx}^{ax}(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{k}} \frac{|1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_x}|^2}{\Omega_{\mathbf{k}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \right. \\ & + K_{xy}^{aa}(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{k}} \frac{(1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_y})(1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_x})}{\Omega_{\mathbf{k}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \left. \right\} + \\ & + \sum_{\rho} \left\{ -K_{yy}^{xa}(\rho) \sum_{\mathbf{k}} \frac{|1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_y}|^2}{\Omega_{\mathbf{k}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\rho}} + \right. \\ & + K_{yx}^{xx}(\rho) \sum_{\mathbf{k}} \frac{(1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_x})(1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_y})}{\Omega_{\mathbf{k}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\rho}} \left. \right\} \quad (51) \end{aligned}$$

с корреляционными функциями вида (45). При выводе (51) учтено, что $\langle j_y \rangle = -\sigma_{ea} \langle E_x \rangle$, так как $\langle E_y \rangle = 0$.

Для задачи связей при случайном распределении компонент имеем

$$\begin{aligned} K_{xx}^{ax}(\mathbf{r}) &= \langle \delta\sigma_a \delta\sigma_x \rangle \delta_{\mathbf{r},0}, \\ K_{xy}^{aa}(\mathbf{r}) &= K_{yx}^{xx}(\boldsymbol{\rho}) = 0, \\ K_{yy}^{xa}(\boldsymbol{\rho}) &= \langle \delta\sigma_x \delta\sigma_a \rangle \delta_{\boldsymbol{\rho},0}, \end{aligned} \quad (52)$$

где

$$\langle \delta\sigma_x \delta\sigma_a \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{r}} \delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^x \delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^a. \quad (53)$$

Для такой неупорядоченной решетки из (51) для σ_{ea} следует выражение

$$\sigma_{ea} = \langle \sigma_a \rangle \left\{ 1 - 2N^{(x)} \frac{\langle \delta\sigma_x \delta\sigma_a \rangle}{\langle \sigma_x \rangle \langle \sigma_a \rangle} \right\} \quad (54)$$

с коэффициентом $N^{(x)}$, определенным согласно (50).

При $\langle \mathbf{E} \rangle \parallel z$ уравнение (32) принимает вид

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \langle \sigma_{\alpha} \rangle \sum_{\Delta_{\alpha}} (\delta V_{\mathbf{r}}^{(1)} - \delta V_{\mathbf{r}+\Delta_{\alpha}}^{(1)}) = \\ = -(\delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{i}_z}^z - \delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}-\mathbf{i}_z}^z) \langle E_z \rangle. \end{aligned} \quad (55)$$

Отсюда находим

$$\begin{aligned} \delta V_{\mathbf{r}}^{(1)} = - \sum_{\mathbf{r}'} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_z}}{\Omega_{\mathbf{k}}} \times \\ \times \delta\sigma_{\mathbf{r}',\mathbf{r}'+\mathbf{i}_z}^z e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \langle E_z \rangle \end{aligned} \quad (56)$$

и

$$\begin{aligned} \delta V_{\mathbf{r}}^{(1)} - \delta V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_z}^{(1)} = - \sum_{\mathbf{r}'} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_z}|^2}{\Omega_{\mathbf{k}}} \times \\ \times \delta\sigma_{\mathbf{r}',\mathbf{r}'+\mathbf{i}_z}^z e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \langle E_z \rangle. \end{aligned} \quad (57)$$

Подстановка (57) в (36) дает

$$\sigma_{ez} = \langle \sigma_z \rangle - \sum_{\mathbf{r}} K_{zz}^{zz}(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{k}} \frac{|1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_z}|^2}{\Omega_{\mathbf{k}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (58)$$

где

$$K_{zz}^{zz}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{r}'} \delta\sigma_{\mathbf{r}',\mathbf{r}'+\mathbf{i}_z}^z \delta\sigma_{\mathbf{r}'+\mathbf{r},\mathbf{r}'+\mathbf{r}+\mathbf{i}_z}^z. \quad (59)$$

При случайном распределении компонент в задаче связей имеем

$$\begin{aligned} K_{zz}^{zz}(\mathbf{r}) &= \langle (\delta\sigma_z)^2 \rangle \delta_{\mathbf{r},0}, \\ \langle (\delta\sigma_z)^2 \rangle &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{r}} (\delta\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{i}_z}^z)^2, \end{aligned} \quad (60)$$

так что из (58) для σ_{ez} следует выражение

$$\sigma_{ez} = \langle \sigma_z \rangle \left\{ 1 - N^{(z)} \frac{\langle (\delta\sigma_z)^2 \rangle}{(\langle \sigma_z \rangle)^2} \right\} \quad (61)$$

с коэффициентом $N^{(z)}$, определенным согласно (50).

Выражения (48), (54) и (61) отличаются от соответствующих формул для непрерывной задачи (5)–(7) только заменой коэффициентов деполяризации $n^{(\alpha)}$ на решеточные коэффициенты $N^{(\alpha)}$. Следует подчеркнуть в то же время, что справедливость выражений (48), (54) и (61) ограничена задачей связей со случайным распределением компонент.

5. ЛИНЕЙНОЕ ПО КОНЦЕНТРАЦИИ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Рассмотрим решеточную модель со связями проводимости σ_1^{ν} ($\nu = x, a, z$), часть которых заменена на «дефектные» проводимости σ_2^{ν} . При малой концентрации дефектных связей ($c \ll 1$) для соответствующих эффективных проводимостей $\sigma_{ex}, \sigma_{ea}, \sigma_{ez}$ могут быть найдены точные выражения в линейном по c приближении.

Направим $\langle \mathbf{E} \rangle$ вдоль оси x и усредним разность $j_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{i}_x} - j_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^{(1)}$, где $j_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}$ — ток в решетке с дефектами, даваемый выражением (19), а $j_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^{(1)}$ — то же в бездефектной модели. В результате получим соотношение

$$\begin{aligned} (\sigma_{ex} - \sigma_{1x}) \langle E_x \rangle = -c \left\{ (\sigma_{1x} - \sigma_{2x}) (V_0 - V_{\mathbf{i}_x}) + \right. \\ \left. + (\sigma_{1a} - \sigma_{2a}) (U_0 - U_{\mathbf{i}_y}) \right\}. \end{aligned} \quad (62)$$

Усреднив разность $j_{\rho, \rho+i_y} - j_{\rho, \rho+i_y}^{(1)}$, аналогичным образом найдем

$$(\sigma_{ea} - \sigma_{1a}) \langle E_x \rangle = -c \left\{ (\sigma_{1a} - \sigma_{2a}) (V_0 - V_{i_x}) - (\sigma_{1x} - \sigma_{2x}) (U_0 - U_{i_y}) \right\}. \quad (63)$$

В (62) и (63) учтено, что в рассматриваемом приближении достаточно рассмотреть одну дефектную связь, соединяющую для определенности узлы $\mathbf{r} = 0$ и $\mathbf{r} = \mathbf{i}_x$ на основной решетке. На дополнительной решетке — это связь между узлами $\rho = 0$ и $\rho = \mathbf{i}_y$. Величины $V_0 - V_{i_x}$ и $U_0 - U_{i_y}$ — соответствующие падения напряжения на этих связях, значения которых находятся из уравнений (20) и (22).

Положим

$$V_{\mathbf{r}} = -\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r} + \delta V_{\mathbf{r}}, \quad U_{\rho} = -\mathbf{E}_0 \cdot \rho + \delta U_{\rho}. \quad (64)$$

Поскольку

$$\sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\Delta_{\alpha}}^{\nu} = \sigma_1^{\nu} - (\sigma_1^{\nu} - \sigma_2^{\nu}) \times \left\{ \delta_{\mathbf{r}, 0} \delta_{\Delta_{\alpha}, i_x} + \delta_{\mathbf{r}, i_x} \delta_{\Delta_{\alpha}, -i_x} \right\}, \quad (65)$$

из (20) при $\mathbf{E}_0 \parallel x$ получаем уравнение

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \sigma_{1\alpha} \sum_{\Delta_{\alpha}} (\delta V_{\mathbf{r}} - \delta V_{\mathbf{r}+\Delta_{\alpha}}) = \\ = \left\{ (\sigma_{1x} - \sigma_{2x}) [E_{0x} + (\delta V_0 - \delta V_{i_x})] + (\sigma_{1a} - \sigma_{2a}) (\delta U_0 - \delta U_{i_y}) \right\} (\delta_{\mathbf{r}, 0} - \delta_{\mathbf{r}, i_x}). \end{aligned} \quad (66)$$

Решая уравнение (66) с помощью фурье-преобразования, найдем

$$\begin{aligned} \delta V_{\mathbf{r}} = \left\{ (\sigma_{1x} - \sigma_{2x}) [E_{0x} + (\delta V_0 - \delta V_{i_x})] + (\sigma_{1a} - \sigma_{2a}) (\delta U_0 - \delta U_{i_y}) \right\} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{i}_x}}{\Omega_{\mathbf{k}}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (67)$$

Отсюда

$$\begin{aligned} \delta V_0 - \delta V_{i_x} = \left\{ (\sigma_{1x} - \sigma_{2x}) [E_{0x} + (\delta V_0 - \delta V_{i_x})] + (\sigma_{1a} - \sigma_{2a}) (\delta U_0 - \delta U_{i_y}) \right\} \frac{N^{(x)}}{\sigma_{1x}}. \end{aligned} \quad (68)$$

Здесь $N^{(x)}$ — один из решеточных коэффициентов,

$$\begin{aligned} N^{(\alpha)} = \\ = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\sigma_{1\alpha} \sin^2 \frac{k_{\alpha}}{2}}{\sigma_{1x} \left[\sin^2 \frac{k_x}{2} + \sin^2 \frac{k_y}{2} \right] + \sigma_{1z} \sin^2 \frac{k_z}{2}}, \end{aligned} \quad (69)$$

(при $\alpha = x$) аналогичным образом определенным в формулах (49), (50).

Для δU_{ρ} из (22) получаем уравнение

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \sigma_{1\alpha} \sum_{\Delta_{\alpha}} (\delta U_{\rho} - \delta U_{\rho+\Delta_{\alpha}}) = \\ = \left\{ (\sigma_{1x} - \sigma_{2x}) (\delta U_0 - \delta U_{i_y}) - (\sigma_{1a} - \sigma_{2a}) [E_{0x} + (\delta V_0 - \delta V_{i_x})] \right\} (\delta_{\rho, 0} - \delta_{\rho, i_y}). \end{aligned} \quad (70)$$

Отсюда находим

$$\begin{aligned} \delta U_{\rho} = \left\{ (\sigma_{1x} - \sigma_{2x}) (\delta U_0 - \delta U_{i_y}) - (\sigma_{1a} - \sigma_{2a}) \times \right. \\ \left. \times [E_{0x} + (\delta V_0 - \delta V_{i_x})] \right\} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{i}_y}}{\Omega_{\mathbf{k}}} e^{i\mathbf{k} \cdot \rho} \end{aligned} \quad (71)$$

и

$$\begin{aligned} \delta U_0 - \delta U_{i_y} = \left\{ (\sigma_{1x} - \sigma_{2x}) (\delta U_0 - \delta U_{i_y}) - (\sigma_{1a} - \sigma_{2a}) [E_{0x} + (\delta V_0 - \delta V_{i_x})] \right\} \frac{N^{(x)}}{\sigma_{1x}}. \end{aligned} \quad (72)$$

Из (68) и (72) находим искомые падения напряжения на дефектной связи:

$$V_0 - V_{i_x} = E_{0x} + (\delta V_0 - \delta V_{i_x}) = A_x E_{0x}, \quad (73)$$

$$U_0 - U_{i_y} = \delta U_0 - \delta U_{i_y} = -A_a E_{0x}, \quad (74)$$

где

$$A_x = \sigma_{1x} \frac{\sigma_{1x} - (\sigma_{1x} - \sigma_{2x}) N^{(x)}}{\Delta}, \quad (75)$$

$$A_a = \sigma_{1x} \frac{(\sigma_{1a} - \sigma_{2a}) N^{(x)}}{\Delta}, \quad (76)$$

$$\begin{aligned} \Delta = \left[\sigma_{1x} - (\sigma_{1x} - \sigma_{2x}) N^{(x)} \right]^2 + \\ + \left[(\sigma_{1a} - \sigma_{2a}) N^{(x)} \right]^2. \end{aligned} \quad (77)$$

Усреднив разность $j_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_z} - j_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_z}^{(1)}$, получим соотношение

$$(\sigma_{ez} - \sigma_{1z}) \langle E_z \rangle = -c (\sigma_{1z} - \sigma_{2z}) (V_0 - V_{i_z}). \quad (78)$$

Здесь предполагается, что дефектная связь соединяет узлы $\mathbf{r} = 0$ и $\mathbf{r} = \mathbf{i}_z$. В этом случае при $\mathbf{E}_0 \parallel z$ из (20) следует уравнение

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \sigma_{1\alpha} \sum_{\Delta_{\alpha}} (\delta V_{\mathbf{r}} - \delta V_{\mathbf{r}+\Delta_{\alpha}}) = (\sigma_{1z} - \sigma_{2z}) \times \\ \times [E_{0z} + (\delta V_0 - \delta V_{i_z})] (\delta_{\mathbf{r}, 0} - \delta_{\mathbf{r}, i_z}), \end{aligned} \quad (79)$$

решая которое, находим

$$\delta V_{\mathbf{r}} = (\sigma_{1z} - \sigma_{2z}) \left[E_{0z} + (\delta V_0 - \delta V_{\mathbf{i}_z}) \right] \times \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}_z}}{\Omega_{\mathbf{k}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (80)$$

Отсюда для падения напряжения на дефектной связи получаем

$$V_0 - V_{\mathbf{i}_z} = A_z E_{0z}, \quad (81)$$

где

$$A_z = \frac{\sigma_{1z}}{\sigma_{1z} - (\sigma_{1z} - \sigma_{2z}) N^{(z)}} \quad (82)$$

с решеточным коэффициентом $N^{(z)}$.

Подстановка (73), (74) и (81) в соотношения (62), (63) и (78) дает для проводимостей σ_{ex} , σ_{ea} и σ_{ez} следующие выражения:

$$\begin{aligned} \sigma_{ex} &= \sigma_{1x} - c \left\{ (\sigma_{1x} - \sigma_{2x}) A_x - (\sigma_{1a} - \sigma_{2a}) A_a \right\}, \\ \sigma_{ea} &= \sigma_{1a} - c \left\{ (\sigma_{1x} - \sigma_{2x}) A_a + (\sigma_{1a} - \sigma_{2a}) A_x \right\}, \\ \sigma_{ez} &= \sigma_{1z} - c (\sigma_{1z} - \sigma_{2z}) A_z \end{aligned} \quad (83)$$

с величинами A_x , A_a и A_z из (75), (76) и (82). При выводе (83) положено $\langle \mathbf{E} \rangle = \mathbf{E}_0$.

Нетрудно видеть, что выражения (83) вместе с определениями (75), (76) и (82) отличаются от соответствующих формул (9) и (10)–(13) для непрерывной задачи в случае композита с включениями сферической формы только заменой коэффициентов деполяризации $n^{(\alpha)}$ на решеточные коэффициенты $N^{(\alpha)}$.

6. ПРИВЛИЖЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОЙ СРЕДЫ

Для вывода одного из уравнений метода ЕМА рассмотрим разность

$$j_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_x} - \left\{ \sigma_{ex} (V_{\mathbf{r}} - V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}) + \sigma_{ea} (U_{\boldsymbol{\rho}} - U_{\boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_y}) \right\}. \quad (84)$$

Подставив выражение для $j_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_x}$ из (19) и усреднив по всем узлам решетки, получим тождество

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} \left\{ (\sigma_{ex} - \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^x) (V_{\mathbf{r}} - V_{\mathbf{r}+\mathbf{i}_x}) + \right. \\ \left. + (\sigma_{ea} - \sigma_{\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{i}_x}^a) (U_{\boldsymbol{\rho}} - U_{\boldsymbol{\rho}+\mathbf{i}_y}) \right\} = 0. \end{aligned} \quad (85)$$

Как и в разд. 5, выделим связь с проводимостями σ_{ix} и σ_{ia} , соединяющую узлы $\mathbf{r} = 0$ и $\mathbf{r} = \mathbf{i}_x$ на основной решетке, а также узлы $\boldsymbol{\rho} = 0$ и $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{i}_y$ на дополнительной. Всем остальным связям припишем

проводимости σ_{ex} , σ_{ea} и σ_{ez} . В результате, расписав тождество (85) по компонентам, получим следующее равенство:

$$\sum_i c_i \left\{ (\sigma_{ex} - \sigma_{ix}) (V_0 - V_{\mathbf{i}_x})^{(i)} + (\sigma_{ea} - \sigma_{ia}) (U_0 - U_{\mathbf{i}_y})^{(i)} \right\} = 0. \quad (86)$$

Здесь c_i — концентрация i -й компоненты, $(V_0 - V_{\mathbf{i}_x})^{(i)}$ и $(U_0 - U_{\mathbf{i}_y})^{(i)}$ — падения напряжения на выделенных связях с проводимостями σ_{ix} и σ_{ia} .

Соотношение (86) — одно из исходных уравнений метода ЕМА, пригодное для n -компонентной ($i = 1, \dots, n$) решеточной модели. Аналогичным образом получаем еще два подобных соотношения:

$$\sum_i c_i \left\{ (\sigma_{ea} - \sigma_{ia}) (V_0 - V_{\mathbf{i}_x})^{(i)} - (\sigma_{ex} - \sigma_{ix}) (U_0 - U_{\mathbf{i}_y})^{(i)} \right\} = 0, \quad (87)$$

$$\sum_i c_i (\sigma_{ez} - \sigma_{iz}) (V_0 - V_{\mathbf{i}_z})^{(i)} = 0. \quad (88)$$

Разности потенциалов на выделенных связях ищутся точно так же, как и в предыдущем разделе. В результате находим

$$\begin{aligned} (V_0 - V_{\mathbf{i}_x})^{(i)} &= A_x^{(i)} \langle E_x \rangle, \\ (U_0 - U_{\mathbf{i}_y})^{(i)} &= -A_a^{(i)} \langle E_x \rangle, \\ (V_0 - V_{\mathbf{i}_z})^{(i)} &= A_z^{(i)} \langle E_z \rangle, \end{aligned} \quad (89)$$

где выражения для $A_x^{(i)}$, $A_a^{(i)}$ и $A_z^{(i)}$ следуют из (75)–(77) и (82) при заменах $\hat{\sigma}_1 \rightarrow \hat{\sigma}_e$, $\hat{\sigma}_2 \rightarrow \hat{\sigma}_i$ ($i = 1, \dots, n$).

Подстановка (89) в (86)–(88) дает

$$\begin{aligned} \sum_i c_i \left\{ (\sigma_{ex} - \sigma_{ix}) A_x^{(i)} - (\sigma_{ea} - \sigma_{ia}) A_a^{(i)} \right\} &= 0, \\ \sum_i c_i \left\{ (\sigma_{ea} - \sigma_{ia}) A_x^{(i)} + (\sigma_{ex} - \sigma_{ix}) A_a^{(i)} \right\} &= 0, \\ \sum_i c_i (\sigma_{ez} - \sigma_{iz}) A_z^{(i)} &= 0. \end{aligned} \quad (90)$$

Равенства (90) составляют систему основных уравнений метода ЕМА для рассматриваемой решеточной модели. Система (90) может быть записана также в виде тензорного уравнения:

$$\sum_i c_i (\hat{\sigma}_e - \hat{\sigma}_i) \hat{A}^{(i)} = 0, \quad (91)$$

которое для бинарной среды по форме совпадает с равенством (15), отличаясь от него только заменой $n^{(\alpha)}$ на $N^{(\alpha)}$ в тензоре $\hat{A}^{(i)}$.

В заключение отметим следующее. Во-первых, во всех трех случаях, рассмотренных в разд. 4–6, в выражения для составляющих тензора эффективной проводимости $\hat{\sigma}_e$ входят одни и те же решеточные коэффициенты $N^{(\alpha)}$. Различаются они только значениями аргумента у величины $N^{(\alpha)}$ — параметра анизотропии γ : $\langle \sigma_x \rangle / \langle \sigma_z \rangle$, $\sigma_{1x} / \sigma_{1z}$ или $\sigma_{ex} / \sigma_{ez}$. Во-вторых, результаты, полученные для решеточной и сплошной моделей, переходят друг в друга при замене $N^{(\alpha)} \Leftrightarrow n^{(\alpha)}$. Свойства коэффициентов $N^{(\alpha)}$ достаточно подробно рассмотрены, например, в работе [9]. Как отмечено в [9], при одноосной анизотропии функциональная зависимость $N^{(\alpha)}$ и $n^{(\alpha)}$ от параметра γ одинакова. Различие между ними носит только количественный характер — в значениях численных коэффициентов в предельных выражениях для $N^{(\alpha)}$ и $n^{(\alpha)}$. Следует ожидать поэтому, что по крайней мере на качественном уровне компьютерные эксперименты для рассмотренной в настоящей работе решеточной модели будут адекватно описывать эффективные гальваномагнитные характеристики композитов.

ЛИТЕРАТУРА

1. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, *Электронная теория металлов*, Наука, Москва (1971) [I. M. Lifshitz, M. Ya. Azbel', and M. I. Kaganov, *Electron Theory of Metals*, Nauka, Moscow (1971), Consultants Bureau, New York (1973)].
2. С. Herring, J. Appl. Phys. **31**, 1939 (1960).
3. Ю. А. Дрейзин, А. М. Дыхне, ЖЭТФ **63**, 242 (1972) [Yu. A. Dreizin and A. M. Dykhne, Sov. Phys. JETP **36**, 127 (1973)].
4. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **145**, 356 (2014) [B. Ya. Balagurov, JETP **118**, 311 (2014)].
5. H. Stachowiak, Physica **45**, 481 (1970).
6. Б. И. Шкловский, ЖЭТФ **72**, 288 (1977) [B. I. Shklovskii, Sov. Phys. JETP **45**, 152 (1977)].
7. D. J. Bergman and D. Stroud, Phys. Rev. B **32**, 6097 (1985).
8. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **93**, 1888 (1987) [B. Ya. Balagurov, Sov. Phys. JETP **66**, 1079 (1987)].
9. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **146**, 810 (2014) [B. Ya. Balagurov, JETP **119**, 714 (2014)].
10. Б. Я. Балагуров, В. А. Кашин, ЖЭТФ **110**, 1001 (1996) [B. Ya. Balagurov and V. A. Kashin, JETP **83**, 553 (1996)].