Журнал экспериментальной и теоретической физики

Т. 59 *1970* *Вып. 7*

ПРОВОДИМОСТЬ ДВУМЕРНОЙ ДВУХФАЗНОЙ СИСТЕМЫ

А. М. Дыхне

Показано, что проводимость двухфазной тонкой пленки при равных концентрациях фаз и случайном их расположении равна геометрической средней проводимости фаз. Если одна из фаз проводит, а другая не проводит электрический ток, то рассматриваемая система при изменении состава претерпевает переход металл — диэлектрик. Показано, что этот переход происходит при равной концентрации фаз, $c_{кр} = 1/2$. Найдена проводимость двумерного поликристалла. Эти и ряд аналогичных задач допускают точное решение благодаря некоторой симметрии, характерной для двумерных систем.

1. Введение

Рассмотрим проводящую среду, состоящую из участков двух сортов произвольной формы и размеров. Размер системы предполагается много большим характерных размеров участков. Если такая среда помещена в электрическое поле, то по ней потекут токи, причем картина токов будет достаточно сложной, если участки «фаз» [1)] нерегулярны. Представляет интерес найти средние характеристики такой среды. Решение этой задачи тривиально для среды с одномерными неоднородностями (слоистая среда). Этот случай, однако, мало интересен, поскольку в нем фактически отсутствуют нерегулярности тока. Аналогичная трехмерная задача приближенно решена в случае, когда неоднородности малы (см., например, [1]).

Будет показано, что соответствующая двумерная задача допускает точное решение в случае половинного состава смеси, если обе «фазы» находятся в геометрически эквивалентных (в среднем) условиях. Рассматриваемая задача представляет интерес, главным образом, как точно решающаяся модель. Реально сходные задачи возникают при расчете проводимости неоднородных пленок, поверхностной проводимости при неоднородно покрытой поверхности, где система двумерна сама по себе, а также в плазме, помещенной в магнитном поле, где двумерность может возникать вследствие предпочтительного развития неустойчивости в плоскости, перпендикулярной магнитному полю (см., например, [2]). В последнем случае, однако, сама проводимость может быть анизотропной, что требует специального рассмотрения.

Точное решение удается найти благодаря тому, что система уравнений в описанных условиях допускает преобразование симметрии, не изменяющее макроскопических характеристик среды. Отметим, что рассматриваемая задача математически эквивалентна ряду других физических задач. В качестве примера можно привести вычисление различных диссипативных (теплопроводность, вязкость и пр.) и динамических (диэлектрическая проницаемость, скорость звука и пр.) характеристик в случайно неоднородных средах.

---

1) Мы для краткости называем фазой совокупность участков одного сорта, отделенных от других участков границей раздела. При этом фазы не обязательно находятся в состоянии термодинамического равновесия (но могут находиться в нем).

2. Соотношения симметрии. Проводимость двухфазной системы

Перейдем к формулировке и решению задачи. Система уравнений состоит из закона Ома

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{e} \tag{1}$$

и уравнений постоянного тока

$$\operatorname{rot} \mathbf{e} = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{j} = 0. \tag{2}$$

Проводимость σ считается заданной случайной функцией координат (x, y), принимающей два значения, причем области (I, II) со значениями $\sigma = \sigma_{1,2}$ статистически эквивалентны (в частности, имеют равные площади).

Нас интересует связь между средним по системе током $\mathbf{J} = V^{-1}\int \mathbf{j}dV$ и средним полем $\mathbf{E} = V^{-1}\int \mathbf{e}dV$. В силу линейности уравнений (1), (2) эта связь также будет линейной, а в силу изотропности системы в целом — скалярной. Таким образом,

$$\mathbf{J} = \sigma_{эфф}\mathbf{E}, \tag{3}$$

где $\sigma_{эфф}$ — подлежащая вычислению эффективная проводимость среды. Если среда в среднем однородна, то $\sigma_{эфф}$ является самоусредняющейся макровеличиной, дисперсия которой убывает с увеличением объема. Введем вместо $\mathbf{j}$ и $\mathbf{e}$ новые неизвестные функции:

$$\mathbf{j}' = (\sigma_1\sigma_2)^{1/2}[\mathbf{n}\mathbf{e}], \quad \mathbf{e}' = (\sigma_1\sigma_2)^{-1/2}[\mathbf{n}\mathbf{j}], \tag{4}$$

$\mathbf{n}$ — единичный вектор нормали к плоскости xy.

Подставляя (4) в (1) и (2), получим систему уравнений для штрихованных переменных:

$$\mathbf{j}' = \sigma'\mathbf{e}', \quad \sigma' = \sigma_1\sigma_2 / \sigma, \tag{5}$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{e}' = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{j}' = 0. \tag{6}$$

Система уравнений (5), (6) отличается от (1), (2) новой проводимостью (σ'). Величина σ' принимает те же значения σ_1 и σ_2 соответственно в областях II и I. Поскольку, по предположению, области I и II статистически эквивалентны, система (5), (6) порождает усредненный закон Ома

$$\mathbf{J}' = \sigma_{эфф}\mathbf{E}' \tag{7}$$

с тем же $\sigma_{эфф}$, что и в (3). С помощью (4) найдем

$$\mathbf{J}' = (\sigma_1\sigma_2)^{1/2}[\mathbf{n}\mathbf{E}], \quad \mathbf{E}' = (\sigma_1\sigma_2)^{-1/2}[\mathbf{n}\mathbf{J}]. \tag{8}$$

Подставляя (8) в (7) и сравнивая с (3), получим

$$\sigma_{эфф} = (\sigma_1\sigma_2)^{1/2}. \tag{9}$$

Таким образом, при смешении аддитивным оказывается логарифм проводимости.

Нетрудно проследить, что выражение (9) для эффективной проводимости справедливо и для периодических структур, например для шахматной доски, белые и черные поля которой обладают равными проводимостями.

3. Характеристики распределения токов и полей

В рассмотренной модели можно вычислить и другие макроскопические характеристики распределения токов и полей по «фазам», а также внутри отдельной фазы. Вычислим среднее $\mathbf{A} = \langle(\sigma - \sigma_1)\mathbf{e}\rangle$. Раскрывая скобки и усредняя почленно, получим $\mathbf{A} = \mathbf{J} - \sigma_1\mathbf{E}$. С другой стороны, усредняемое выражение отлично от нуля только во второй фазе. Учтя это, найдем $\mathbf{A} = {}^1/_2(\sigma_2 - \sigma_1)\mathbf{E}_2$, где

$$\mathbf{E}_2 = V_2^{-1}\int\limits_{(V_2)} \mathbf{e}\, dV$$

— среднее поле во второй фазе. Приравнивая два выражения для $\mathbf{A}$ и используя (9), найдем

$$\mathbf{E}_2 = \frac{2\sqrt{\sigma_1}}{\sqrt{\sigma_1}+\sqrt{\sigma_2}}\mathbf{E}$$

и аналогично

$$\mathbf{E}_1 = \frac{2\sqrt{\sigma_2}}{\sqrt{\sigma_1}+\sqrt{\sigma_2}}\mathbf{E}.$$

Легко находятся также соответствующие выражения для токов

$$\mathbf{J}_{1,2} = \frac{2\sqrt{\sigma_{1,2}}}{\sqrt{\sigma_1}+\sqrt{\sigma_2}}\mathbf{J}.$$

Для нахождения распределения диссипируемой энергии по фазам, вычислим величину

$$\alpha = \langle j^2\rangle / \langle e^2\rangle = \langle j'^2\rangle / \langle e'^2\rangle. \tag{10}$$

Используя (4), найдем $\alpha = \sigma_1^2\sigma_2^2\langle e^2\rangle / \langle j^2\rangle = \sigma_1^2\sigma_2^2/\alpha$, откуда $\alpha = \sigma_1\sigma_2$. Соотношение (10) можно переписать в виде

$$\sigma_1\sigma_2(\langle e^2\rangle_1 + \langle e^2\rangle_2) = \langle j^2\rangle_1 + \langle j^2\rangle_2 = \sigma_1^2\langle e^2\rangle_1 + \sigma_2^2\langle e^2\rangle_2.$$

Отсюда

$$\sigma_1\langle e^2\rangle_1 = \sigma_2\langle e^2\rangle_2 = (\sigma_1\sigma_2)^{1/2}E^2. \tag{11}$$

Последнее равенство получено с помощью соотношения

$$\langle(\mathbf{je})\rangle = (\mathbf{JE}),$$

справедливого в пренебрежении поверхностными эффектами. Таким образом, энергия диссипируется в фазах поровну, независимо от проводимостей.

Оказывается, что это равенство относится не только к средней диссипации, но и к функции распределения диссипируемых энергий. В самом деле, вычислим величину

$$\alpha_n = \langle j^{2n}\rangle / \langle e^{2n}\rangle = \langle j'^{2n}\rangle / \langle e'^{2n}\rangle.$$

С помощью (4) покажем, что $\alpha_n = (\sigma_1\sigma_2)^n$. Таким образом,

$$(\sigma_1\sigma_2)^n(\langle e^{2n}\rangle_1 + \langle e^{2n}\rangle_2) = \langle j^{2n}\rangle_1 + \langle j^{2n}\rangle_2 = \\ = \sigma_1^{2n}\langle e^{2n}\rangle_1 + \sigma_2^{2n}\langle e^{2n}\rangle_2,$$

откуда

$$\sigma_1^n\langle e^{2n}\rangle_1 = \sigma_2^n\langle e^{2n}\rangle_2 \text{ или } \langle(je)^n\rangle_1 = \langle(je)^n\rangle_2. \tag{12}$$

Используя (12), легко доказать равенство

$$\langle\delta((\mathbf{je}) - q)\rangle_1 = \langle\delta((\mathbf{je}) - q)\rangle_2.$$

Таким образом, распределения для джоулева тепла в обеих фазах одинаковы.

Наконец, с помощью (11) можно вычислить средний квадрат флуктуаций, характеризующий неоднородность токов и полей в системе. Имеем

$$\langle e^2\rangle = \frac{1}{2}(\langle e^2\rangle_1 + \langle e^2\rangle_2) = \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{\sigma_1}{\sigma_2}} + \sqrt{\frac{\sigma_2}{\sigma_1}}\right)E^2,$$

$$\langle j^2\rangle = \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{\sigma_1}{\sigma_2}} + \sqrt{\frac{\sigma_2}{\sigma_1}}\right)J^2,$$

$$\Delta = \frac{\langle j^2\rangle - J^2}{J^2} = \frac{\langle e^2\rangle - E^2}{E^2} = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{\sigma_1}{\sigma_2}\right)^{1/4} - \left(\frac{\sigma_2}{\sigma_1}\right)^{1/4}\right]^2.$$

4. Плавная зависимость проводимости от координат

Отмеченная симметрия позволяет получить решение и при менее жестких предположениях о виде функции $\sigma(x, y)$. Введем для удобства величину $\chi(x, y) = \ln\sigma - \langle\ln\sigma\rangle$ и рассмотрим такой ансамбль систем, что многоточечная функция распределения проводимости является четной функцией переменных χ. Примером такого распределения, кроме рассмотренного выше, может служить гауссово распределение для величин χ. Замена

$$\mathbf{j}' = \exp\{\langle\ln\sigma\rangle\}[\mathbf{ne}], \ \mathbf{e}' = \exp\{-\langle\ln\sigma\rangle\}[\mathbf{nj}]$$

преобразует закон Ома

$$\mathbf{j} = \exp(\langle\ln\sigma\rangle + \chi)\mathbf{e}$$

в

$$\mathbf{j}' = \exp(\langle\ln\sigma\rangle - \chi)\mathbf{e}'$$

и не меняет уравнений (2).

Меняя $\chi \to -\chi$ и воспользовавшись четностью функций распределения по χ, вновь найдем, что штрихованная система макроскопически эквивалентна исходной. Отсюда, повторяя рассуждения раздела 2, получим

$$\sigma_{\text{эфф}} = \exp\langle\ln\sigma\rangle = (\langle\sigma\rangle / \langle 1/\sigma\rangle)^{1/2}. \tag{13}$$

Для гауссова распределения (13) примет вид

$$\sigma_{\text{эфф}} = \langle\sigma\rangle\exp(-\Delta^2/2),$$

где $\Delta = \langle\chi^2\rangle^{1/2}$ — среднеквадратичная флуктуация логарифма проводимости.

5. Импеданс электрической цепи

Аналогичную рассмотренной в разделе 2 задачу можно сформулировать для плоской электрической цепи. Пусть имеется цепь, представляющая собой квадратную решетку, ребра которой обладают сопротивлениями, с равной вероятностью принимающими значения r_1 и r_2. Преобразование симметрии, которому в данном случае удобно подвергнуть потенциалы узлов и функции тока междуузлий, порождает переход к другой цепи, макроскопически эквивалентной первой, что приводит к выражению для эффективного сопротивления цепи $r_{\text{эфф}} = (r_1r_2)^{1/2}$. Такое же соотношение для комплексных сопротивлений имеет место в цепи квазистационарного тока.

Интересно отметить, что если в качестве двух разных сопротивлений в такой цепи взять емкость и индуктивность ($Z_1 = 1/i\omega C$, $Z_2 = i\omega L/c^2$), то для эквивалентного сопротивления цепи получим вещественную величину $Z_{эфф} = c^{-1}\sqrt{L/C}$. Таким образом, цепь, составленная из мнимых сопротивлений, не приводящих к диссипации энергии, обладает вещественным эквивалентным сопротивлением, т. е. поглощает энергию. Это кажущееся противоречие разрешается, если учесть, что в случайной системе, в отличие от периодической, могут существовать локальные колебания, т. е. участки цепи, резонансно настроенные на любую частоту. Энергия источника тратится на резонансное возбуждение локальных колебаний. При этом к истинной (конечной) диссипации приведет наличие в системе как угодно малого поглощения.

6. Переход металл — диэлектрик

Если концентрации фаз не равны, приведенный способ не дает полного решения задачи. Однако удается получить соотношение, связывающее проводимости «дополнительных систем» (с концентрациями высокопроводящей (скажем, первой) фазы c и $1-c$). В самом деле, при $c \neq {}^1/_2$ штрихованная система отличается от исходной заменой $\sigma_1 \rightleftarrows \sigma_2$ или, что то же самое, $c \rightleftarrows 1-c$. При этом вместо (9) получим

$$\sigma_{эфф}(c)\,\sigma_{эфф}(1-c) = \sigma_1\sigma_2.$$

Наиболее принципиальным представляется рассмотрение системы, в которой одна из фаз не проводит ($\sigma_2 = 0$). В этом случае система при изменении состава претерпевает переход металл — диэлектрик. В самом деле, при $c_1 \approx 1$ $\sigma_{эфф} \approx \sigma_1$, а при $c_1 \ll 1$ $\sigma_{эфф} = 0$. При этом, очевидно, существует критическая концентрация непроводящей фазы, начиная с которой $\sigma_{эфф} = 0$.

Полученные выше результаты позволяют вычислить критическую концентрацию $c_{кр}$. Вопрос о характере особенности $\sigma_{эфф}(c)$ при $c = c_{кр}$ пока остается открытым. Для нахождения критической концентрации поступим следующим образом. Рассмотрим систему, состоящую из участков трех сортов с проводимостями σ_1, σ_2 и $\sigma_3 = (\sigma_1\sigma_2)^{1/2}$. При этом $\sigma_{эфф}$ будет равно $(\sigma_1\sigma_2)^{1/2}$, если области I и II статистически эквивалентны, а область III произвольна. Перейдем теперь к пределу $\sigma_1 \to \infty$, $\sigma_2 \to 0$, $\sigma_1\sigma \to \infty$. Предельная система станет двухфазной, причем концентрация проводящей фазы (области I + III) $c \geqslant {}^1/_2$, при этом $\sigma_{эфф} = \infty$. Переходя к пределу при $\sigma_1 \to \infty$, $\sigma_2 \to 0$, $\sigma_1\sigma_2 \to 0$, получим, что при $c < {}^1/_2$ будет $\sigma_{эфф} = 0$. Таким образом, для рассмотренной системы ($\sigma_1 = \infty$, $\sigma_2 = 0$)

$$\sigma_{эфф} = \begin{cases} \infty, & c_1 > {}^1/_2 \\ 0, & c_1 < {}^1/_2, \end{cases} \tag{14}$$

и $c_{кр} = {}^1/_2$. Покажем, что то же значение $c_{кр}$ получается при произвольном σ_1. В самом деле, при $\sigma_2 = 0$ имеет место соотношение $\sigma_{эфф} = \sigma_1 f(c)$, причем $f(c_{кр} + 0) = 0$. Переходя здесь к пределу $\sigma_1 \to \infty$ и сравнивая с (14), найдем, что $f(c)$ конечно при $c < {}^1/_2$ и $f(c) = 0$ при $c > {}^1/_2$. Отсюда $c_{кр} = {}^1/_2$ [2)].

7. Проводимость двумерного поликристалла

В случае поликристалла локальный закон Ома может быть записан в виде

$$\mathbf{j} = \hat{P}_{\varphi}\hat{\sigma}\hat{P}_{-\varphi}\mathbf{e}. \tag{15}$$

---

2) Этот результат для дискретной (решеточной) модели был получен иным способом в [3].

Здесь $\hat{\sigma}$ — тензор проводимости монокристалла, не зависящий от координат. Одна из его главных осей предполагается направленной по оси z, что обеспечивает двумерность токов и полей. $\hat{P}_{\varphi}$ — матрица поворота на угол φ в плоскости (xy)

$$\hat{P}_{\varphi} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}$$

Угол φ, определяющий ориентацию данного кристаллита, является случайной функцией координат. Преобразование

$$\mathbf{j} = (\det\hat{\sigma})^{1/2}\hat{P}_{\pi/2}\mathbf{e}', \quad \mathbf{e} = (\det\hat{\sigma})^{-1/2}\hat{P}_{\pi/2}\mathbf{j}'$$

приводит к соотношению

$$\mathbf{j}' = (\det\hat{\sigma})\,\hat{P}_{-\pi/2}\hat{P}_{\varphi}\hat{\sigma}^{-1}\hat{P}_{-\varphi}\hat{P}_{\pi/2}\mathbf{e}'. \tag{16}$$

Воспользовавшись коммутативностью поворотов в плоскости и легко проверяемым тождеством

$$\hat{\sigma} = (\det\hat{\sigma})\,\hat{P}_{-\pi/2}\hat{\sigma}^{-1}\hat{P}_{\pi/2},$$

перепишем (16) в виде

$$\mathbf{j}' = \hat{P}_{\varphi}\hat{\sigma}\hat{P}_{-\varphi}\mathbf{e}'. \tag{17}$$

Сравнивая (15) и (17) и вновь повторяя рассуждения раздела 2, найдем

$$\sigma_{эфф} = (\det\hat{\sigma})^{1/2}.$$

Таким образом, проводимость двумерного поликристалла равна среднему геометрическому из главных значений тензора проводимости.

Поступила в редакцию
5 ноября 1969 г.

Литература

[1] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Электродинамика сплошных сред, Физматгиз, 1959.

[2] Е. П. Велихов, А. М. Дыхне, И. Я. Шипук. Труды VI Международной конференции по явлениям в ионизированных газах, Белград, 1965.

[3] M. F. Sykes, J. W. Essam. J. Math. Phys., 5, 1117, 1964.

CONDUCTIVITY OF A TWO-DIMENSIONAL TWO-PHASE SYSTEM

A. M. Dykhne

It is shown that for equal phase concentrations and random distribution of the phases the conductivity of a two-phase thin film is equal to the geometric mean conductivity of the phases. If one of the phases conducts and the other does not conduct an electric current, the system experiences a metal-dielectric transition on variation of the composition. It is shown that the transition occurs at equal concentrations of the phases, when $c_{cr} = {}^1/_2$. The conductivity of a two-dimensional polycrystal is determined. This and a number of other similar problems can be solved exactly due to a certain symmetry which is characteristic of two-dimensional systems.
