01

Эффективные свойства двухфазных смесей

© В.И. Алешин

Научно-исследовательский институт физики при Ростовском государственном университете,
344090 Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: aleshin@rsu.ru

(Поступило в Редакцию 6 апреля 2006 г.)

Исследуются выражения для эффективной проводимости и сопротивления двухфазной среды в виде рядов, полученных на основе преобразований Фурье. Представлены соотношения, связывающие коэффициенты Фурье локальной проводимости и сопротивления взаимных систем, полученных путем перестановки фаз, без изменения геометрической структуры материала. Показано, что такие соотношения в некоторых случаях позволяют провести вычисление произвольного члена ряда для эффективных констант. На примере двумерной задачи показано, как можно провести перенормировку всех членов ряда, что позволяет связать эффективные константы взаимных систем.

PACS: 02.30.Nw

Введение

Одно из направлений в исследовании свойств неоднородных материалов связано с возможностью представить выражения для эффективных констант в виде некоторого формального ряда, каждый последующий член которого содержит более полную по сравнению с предыдущим информацию о структуре материала [1–6]. Математический аппарат, используемый при построении таких рядов, может быть различным, соответственно различной оказывается и математическая интерпретация членов ряда. Однако во всех случаях их точное вычисление должно приводить в конечном итоге к разложению в ряд по степеням некоторого параметра, характеризующего локальную анизотропию системы (например, в случае двухфазной смеси проводящих изотропных материалов с проводимостями σ_1 и σ_2 параметр анизотропии может быть представлен в виде $(\sigma_1-\sigma_2)/\langle\sigma\rangle$, где угловые скобки означают усреднение по объему).

Провести точное вычисление всех членов ряда, как правило, не удается из-за больших математических трудностей, связанных с необходимостью учета статистики и характера неоднородностей. Поэтому ограничиваются учетом либо только первых членов разложения [1,3], вычисление которых не требует подробной информации о структуре материала, либо вводят дополнительные предположения, позволяющие провести приближенное суммирование таких рядов [2].

Как правило, при построении общих выражений для эффективных констант привлекается аппарат теории случайных функций, что, в частности, позволяет дать наглядную интерпретацию полученных результатов и возникающих трудностей [3–6]. В настоящей работе исследуются ряды, полученные с использованием другого математического аппарата, основанного на преобразованиях Фурье [1,2].

Ряды Херринга для проводимости и сопротивления

Рассмотрим макроскопически однородную (но необязательно изотропную) двухфазную смесь. Будем полагать, что фазы в системе изотропны и характеризуются проводимостями σ_1 и σ_2 (сопротивлениями ρ_1 и ρ_2). Исходная система уравнений имеет вид

$$\mathbf{j}(\mathbf{r})=\sigma(\mathbf{r})\mathbf{e}(\mathbf{r}),\quad \mathbf{e}(\mathbf{r})=\rho(\mathbf{r})\mathbf{j}(\mathbf{r}),$$
$$\operatorname{div}\mathbf{j}(\mathbf{r})=0,\quad \operatorname{rot}\mathbf{e}(\mathbf{r})=0,\tag{1}$$

где $\mathbf{e}(\mathbf{r}),\mathbf{j}(\mathbf{r}),\sigma(\mathbf{r}),\rho(\mathbf{r})$ — локальные величины, характеризующие электрическое поле, ток, проводимость и сопротивление соответственно. Для усредненных значений имеем

$$\langle\mathbf{j}\rangle=\hat{\sigma}_{\text{eff}}\langle\mathbf{e}\rangle,\quad \langle\mathbf{e}\rangle=\hat{\rho}_{\text{eff}}\langle\mathbf{j}\rangle.\tag{2}$$

Здесь $\hat{\sigma}_{\text{eff}}$, $\hat{\rho}_{\text{eff}}$ — эффективные значения проводимости и сопротивления соответственно (в общем случае произвольные тензоры второго ранга). Угловые скобки означают усреднение по объему.

Рассмотрим кратко предложенную в [1] процедуру вывода выражений для $\hat{\sigma}_{\text{eff}}$, $\hat{\rho}_{\text{eff}}$. Разложим все флуктуирующие величины в ряды Фурье в достаточно большом объеме V

$$\sigma=\langle\sigma\rangle+\sum_{\mathbf{k}\neq0}\sigma_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{kr}},\qquad \mathbf{j}=\langle\mathbf{j}\rangle+\sum_{\mathbf{k}\neq0}\mathbf{j}_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{kr}},$$
$$\mathbf{e}=\langle\mathbf{e}\rangle+\sum_{\mathbf{k}\neq0}\mathbf{e}_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{kr}}.\tag{3}$$

Из (1) имеем

$$\mathbf{e}_{\mathbf{k}}\parallel\mathbf{k},\quad \mathbf{j}_{\mathbf{k}}\perp\mathbf{k}.\tag{4}$$

Подставив (3) в (1) и сравнив коэффициенты при одинаковых экспонентах, находим

$$\langle\mathbf{j}\rangle=\langle\sigma\rangle\langle\mathbf{e}\rangle+\sum_{\mathbf{k}\neq0}\sigma_{-\mathbf{k}}\mathbf{e}_{\mathbf{k}}\quad\text{для}\quad\mathbf{k}=0,\tag{5}$$

$$\mathbf{j}_{\mathbf{k}}=\langle\sigma\rangle\mathbf{e}_{\mathbf{k}}+\sigma_{\mathbf{k}}\langle\mathbf{e}\rangle+\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq0}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\mathbf{e}_{\mathbf{k}_1}\quad\text{для}\quad\mathbf{k}\neq0.\tag{6}$$

Умножив последнее уравнение скалярно на $\mathbf{f}=\mathbf{k}/|\mathbf{k}|$, с учетом (4) имеем

$$\mathbf{e_k}=-\frac{\sigma_\mathbf{k}}{\langle\sigma\rangle}(\langle\mathbf{e}\rangle\mathbf{f})\mathbf{f}-\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}\frac{\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}}{\langle\sigma\rangle}(\mathbf{e}_{\mathbf{k}_1}\mathbf{f})\mathbf{f}.$$

Повторив итерационную процедуру, находим

$$\mathbf{e_k}=-\frac{\sigma_\mathbf{k}}{\langle\sigma\rangle}\mathbf{f}(\mathbf{f}\langle\mathbf{e}\rangle)+\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}\frac{\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1}}{\langle\sigma\rangle^2}\mathbf{f}(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)(\mathbf{f}_1\langle\mathbf{e}\rangle)-\ldots\,. \tag{7}$$

Подстановка (7) в (5) позволяет получить выражение

$$\sigma_{\text{eff}}^{(\mathbf{a})}=\langle\sigma\rangle-\sum_{\mathbf{k}\neq 0}(\mathbf{f}\,\mathbf{a})^2\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_\mathbf{k}}{\langle\sigma\rangle}+\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}(\mathbf{f}\,\mathbf{a})(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)(\mathbf{f}_1\,\mathbf{a})\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1}}{\langle\sigma\rangle^2}-\ldots\,, \tag{8}$$

которое имеет смысл эффективной проводимости системы в направлении $\mathbf{a}=\langle\mathbf{e}\rangle/|\langle\mathbf{e}\rangle|$, вдоль одной из главных осей тензора $\hat{\sigma}_{\text{eff}}$.

Аналогичным способом можно получить выражение

$$\rho_{\text{eff}}^{(\mathbf{b})}=\langle\rho\rangle-\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{\rho_{-\mathbf{k}}\rho_\mathbf{k}}{\langle\rho\rangle}K_2^{(\mathbf{b})}+\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}\frac{\rho_{-\mathbf{k}}\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\rho_{\mathbf{k}_1}}{\langle\rho\rangle^2}K_3^{(\mathbf{b})}-\ldots\,, \tag{9}$$

где

$$K_2^{(\mathbf{b})}=\big(\big[\mathbf{f}\times[\mathbf{b}\times\mathbf{f}]\big]\mathbf{b}\big)=1-(\mathbf{f}\,\mathbf{b})^2,$$
$$K_3^{(\mathbf{b})}=\Big(\Big[\mathbf{f}\times\Big[\big[\mathbf{f}_1\times[\mathbf{b}\times\mathbf{f}_1]\big]\times\mathbf{f}\Big]\Big]\mathbf{b}\Big)=1-(\mathbf{f}\,\mathbf{b})^2-(\mathbf{f}_1\,\mathbf{b})^2+(\mathbf{f}\,\mathbf{b})(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)(\mathbf{f}_1\mathbf{b}), \tag{10}$$

которое имеет смысл эффективного сопротивления системы в направлении $\mathbf{b}=\langle\mathbf{j}\rangle/|\langle\mathbf{j}\rangle|$, вдоль одной из главных осей тензора $\hat{\sigma}_{\text{eff}}$.

Выражения (8) и (9) полезно представить также в инвариантной форме, исключив зависимость правых частей от вектров $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$, характеризующих ориентацию средних полей в системе. Введем в рассмотрение три взаимно перпендикулярных единичных вектора $\mathbf{a}\perp\mathbf{b}\perp\mathbf{c}$. Подстановка в (8) $\mathbf{a}=[\mathbf{b}\times\mathbf{c}]$, а в (9) $\mathbf{b}=[\mathbf{a}\times\mathbf{c}]$ с последующим преобразованием векторно-скалярных произведений приводит к следующим выражениям:

$$\frac{1}{3}\Big(\sigma_{\text{eff}}^{(\mathbf{a})}+\sigma_{\text{eff}}^{(\mathbf{b})}+\sigma_{\text{eff}}^{(\mathbf{c})}\Big)=\langle\sigma\rangle-\frac{1}{3}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_\mathbf{k}}{\langle\rho\rangle}+\frac{1}{3}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)^2\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1}}{\langle\sigma\rangle^2}-\ldots\,, \tag{11}$$

$$\frac{1}{3}\Big(\rho_{\text{eff}}^{(\mathbf{a})}+\rho_{\text{eff}}^{(\mathbf{b})}+\rho_{\text{eff}}^{(\mathbf{c})}\Big)=\langle\rho\rangle-\frac{1}{3}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{\rho_{-\mathbf{k}}\rho_\mathbf{k}}{\langle\rho\rangle}K_2+\frac{1}{3}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}\frac{\rho_{-\mathbf{k}}\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\rho_{\mathbf{k}_1}}{\langle\rho\rangle^2}K_3-\ldots\,, \tag{12}$$

где коэффициенты K_n в (12) имеют вид

$$K_2=2,\qquad K_3=1+(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)^2,$$
$$K_4=(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)^2+(\mathbf{f}\mathbf{f}_2)^2+(\mathbf{f}_1\,\mathbf{f}_2)^2-(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)(\mathbf{f}_1\,\mathbf{f}_2)(\mathbf{f}\mathbf{f}_2),$$
$$\ldots\,. \tag{13}$$

Левые части выражений (11) и (12) содержат суммы проводимостей и сопротивлений соответственно вдоль трех главных осей тензоров $\hat{\sigma}_{\text{eff}}$ и $\hat{\rho}_{\text{eff}}$. Отметим, что в случае изотропного распределения компонент в системе выражения (8) и (9) не должны зависеть от выбора направления приложенного поля. При этом (8) и (9) можно непосредственно усреднить (под знаками сумм) по различным ориентациям векторов $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$. При этом получаются выражения, по форме совпадающие с (11) и (12). Однако правые части (11) и (12) не предполагают изотропного распределения фаз. Выражения (11), (12) имеют силу для произвольного анизотропного случая. В частности, в случае слоистой двухфазной системы с изотропными фазами выражение в левой части (11) будет иметь вид

$$\frac{1}{3}\Big[2(\theta_1\sigma_1+\theta_2\sigma_2)+\frac{\sigma_1\sigma_2}{\theta_1\sigma_2+\theta_2\sigma_1}\Big]=(\theta_1\sigma_1+\theta_2\sigma_2)-\frac{1}{3}\,\frac{\theta_1\theta_2(\sigma_1-\sigma_2)^2}{\theta_1\sigma_2+\theta_2\sigma_1}. \tag{14}$$

Здесь $\theta_2=1-\theta_1$ — концентрации фаз. В правой части все векторы $\mathbf{f}_i$ параллельны. При этом ряд

$$\langle\sigma\rangle-\frac{1}{3}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_\mathbf{k}}{\langle\sigma\rangle}+\frac{1}{3}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1}}{\langle\sigma\rangle^2}-\ldots\,. \tag{15}$$

можно просуммировать. Ниже будет показано, как можно вычислить произвольный член ряда (15). Вычисления приводят к соотношению (14).

Соотношения между коэффициентами Фурье взаимных систем

Исходная система — с функцией проводимости $\sigma(\sigma_1,\sigma_2,\mathbf{r})$. Дополнительная система с переставленными компонентами $\sigma'(\sigma_1,\sigma_2,\mathbf{r})=\sigma(\sigma_2,\sigma_1,\mathbf{r})$ (без изменения геометрии). Имеют место очевидные соотношения

$$\sigma(\mathbf{r})\sigma'(\mathbf{r})=\sigma_1\sigma_2,\quad \sigma(\mathbf{r})+\sigma'(\mathbf{r})=\sigma_1+\sigma_2,$$
$$\rho(\mathbf{r})=\frac{1}{\sigma(\mathbf{r})}. \tag{16}$$

Для коэффициентов Фурье сопротивления можно записать

$$\rho_\mathbf{k}=\frac{1}{V}\int\limits_V\frac{\sigma'}{\sigma_1\sigma_2}e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}dV=\frac{\sigma'_\mathbf{k}}{\sigma_1\sigma_2},\quad\text{для любого }\mathbf{k}. \tag{17}$$

В частности, для $\mathbf{k}=0$ имеем

$$\langle\rho\rangle=\frac{\langle\sigma'\rangle}{\sigma_1\sigma_2}. \tag{18}$$

Второе соотношение в (16) дает при $\mathbf{k}\neq 0$

$$\frac{1}{V}\int_V(\sigma+\sigma')e^{-i\mathbf{kr}}dV=\sigma_{\mathbf{k}}+\sigma'_{\mathbf{k}}$$

$$=\frac{1}{V}(\sigma_1+\sigma_2)\int_V e^{-i\mathbf{kr}}dV=0.$$

Отсюда имеем

$$\sigma_{\mathbf{k}}=-\sigma'_{\mathbf{k}}\quad\text{при}\quad\mathbf{k}\neq 0. \tag{19}$$

Рассмотрим соотношение (при $\mathbf{k}\neq 0$)

$$\frac{1}{V}\int_V\sigma\sigma' e^{-i\mathbf{kr}}dV=\frac{1}{V}\sigma_1\sigma_2\int_V e^{-i\mathbf{kr}}dV=0,$$

Подставив разложения подынтегральных величин в ряды Фурье, находим

$$\frac{1}{V}\int_V\sigma\sigma' e^{-i\mathbf{kr}}dV=\frac{1}{V}\int_V\sum_{\mathbf{k}_1}\sum_{\mathbf{k}_2}\sigma_{\mathbf{k}_1}\sigma'_{\mathbf{k}_2}e^{i(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2-\mathbf{k})\mathbf{r}}dV=0.$$

После интегрирования остаются отличные от нуля члены с $\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2-\mathbf{k}=0$, т.е. $\mathbf{k}_2=\mathbf{k}-\mathbf{k}_1$. Отсюда имеем

$$\sum_{\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1}\sigma'_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}=0.$$

Суммирование по $\mathbf{k}_2=\mathbf{k}-\mathbf{k}_1$ сводится к суммированию по $\mathbf{k}_1$, поскольку $\mathbf{k}$ — фиксированный вектор. Выделяя члены с $\mathbf{k}_1=0$ и $\mathbf{k}-\mathbf{k}_1=0$, находим

$$\langle\sigma\rangle\sigma'_{\mathbf{k}}+\sigma_{\mathbf{k}}\langle\sigma'\rangle+\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}\sigma_{\mathbf{k}_1}\sigma'_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}=0.$$

Учитывая, что $\sigma'_{\mathbf{k}}=-\sigma_{\mathbf{k}}$, находим

$$\big(\langle\sigma'\rangle-\langle\sigma\rangle\big)\sigma_{\mathbf{k}}=\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}\sigma_{\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\quad\mathbf{k}\neq 0. \tag{20}$$

Последнее соотношение можно переписать в другом виде

$$\big(\langle\sigma'\rangle-\langle\sigma\rangle\big)\sigma_{-\mathbf{k}_1}=\sum_{\mathbf{k}\neq\mathbf{k}_1\neq 0}\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\quad\mathbf{k}_1\neq 0. \tag{21}$$

Вычислим интеграл

$$\frac{1}{V}\int_V\sigma\sigma' dV=\frac{1}{V}\int_V\sum_{\mathbf{k}_1}\sum_{\mathbf{k}_2}\sigma_{\mathbf{k}_1}\sigma'_{\mathbf{k}_2}e^{i(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)\mathbf{r}}dV=\sigma_1\sigma_2.$$

Отсюда имеем

$$\sum_{\mathbf{k}}\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma'_{\mathbf{k}}=\sigma_1\sigma_2. \tag{22}$$

Выделив члены с $\mathbf{k}=0$ и учитывая, что $\sigma'_{\mathbf{k}}=-\sigma_{\mathbf{k}}$, находим

$$\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}}=\langle\sigma\rangle\langle\sigma'\rangle-\sigma_1\sigma_2=\langle\sigma^2\rangle-\langle\sigma\rangle^2$$

$$=\Big\langle\big(\sigma-\langle\sigma\rangle\big)^2\Big\rangle. \tag{23}$$

Покажем, как можно представить суммы, фигурирующие в (15). Применяя последовательно формулы (20), (21) и (23), получим

$$\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}\dots\sum_{\mathbf{k}_n\neq\mathbf{k}_{n-1}\neq 0}\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\dots\sigma_{\mathbf{k}_{n-1}-\mathbf{k}_n}\sigma_{\mathbf{k}_n}$$

$$=\big(\langle\sigma'\rangle-\langle\sigma\rangle\big)^n\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}}=\big(\langle\sigma'\rangle-\langle\sigma\rangle\big)^n\Big\langle\big(\sigma-\langle\sigma\rangle\big)^2\Big\rangle$$

$$=\theta(1-\theta)(1-2\theta)^n\big(\sigma_1-\sigma_2\big)^{n+2}.$$

Здесь θ — концентрация фазы с проводимостью σ_1. В [2] ошибочно полагается, что все такие суммы сводятся к моментальным выражениям вида $\big\langle(\sigma-\langle\sigma\rangle)^k\big\rangle$.

Некоторые результаты для двумерного случая

Инвариантные выражения (11) и (12) в двумерном случае принимают вид

$$\frac{1}{2}\big(\sigma_{\mathrm{eff}}^{(\mathbf{a})}+\sigma_{\mathrm{eff}}^{(\mathbf{b})}\big)=\langle\sigma\rangle-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}}}{\langle\sigma\rangle}$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)^2\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1}}{\langle\sigma\rangle^2}-\dots, \tag{24}$$

$$\frac{1}{2}\big(\rho_{\mathrm{eff}}^{(\mathbf{a})}+\rho_{\mathrm{eff}}^{(\mathbf{b})}\big)=\langle\rho\rangle-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{\rho_{-\mathbf{k}}\rho_{\mathbf{k}}}{\langle\rho\rangle}K_2$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}\frac{\rho_{-\mathbf{k}}\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\rho_{\mathbf{k}_1}}{\langle\rho\rangle^2}K_3-\dots, \tag{25}$$

где

$$K_2=1,\qquad K_3=(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)^2,$$

$$K_4=-1+(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)^2+(\mathbf{f}\mathbf{f}_2)^2+(\mathbf{f}_1\mathbf{f}_2)^2-(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)(\mathbf{f}_1\mathbf{f}_2)(\mathbf{f}\mathbf{f}_2),$$

$$\dots\,. \tag{26}$$

Единичные векторы $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$ соответствуют направлениям вдоль главных осей системы. Используя элементарные тригонометрические преобразования, легко проверить, что все коэффициенты K_n в выражении для эффективного сопротивления сводятся к соответствующим коэффициентам в выражении для эффективной проводимости.

Подставив в (25) выражения (17) и (18), находим соотношение, связывающее проводимость и сопротивление произвольных анизотропных взаимных систем

$$\rho_{\text{eff}}^{(\mathbf{a})}+\rho_{\text{eff}}^{(\mathbf{b})}=\frac{1}{\sigma_{\text{eff}}^{(\mathbf{a})}}+\frac{1}{\sigma_{\text{eff}}^{(\mathbf{b})}}=\frac{\sigma_{\text{eff}}^{(\mathbf{a})}+\sigma_{\text{eff}}^{(\mathbf{b})}}{\sigma_{\text{eff}}^{(\mathbf{a})}\sigma_{\text{eff}}^{(\mathbf{b})}}=\frac{\sigma_{\text{eff}}^{\prime(\mathbf{a})}+\sigma_{\text{eff}}^{\prime(\mathbf{b})}}{\sigma_1\sigma_2}, \tag{27}$$

аналогичное точным соотношениям, полученным в [7,8]. Подчеркнем, что соотношение (27) справедливо для произвольного геометрического распределения фаз в системе.

К сожалению, в трехмерном случае не удается так просто связать два ряда (11) и (12) для эффективной проводимости и сопротивления, поскольку коэффициенты в этих выражениях существенно различны. Однако слеует заметить, что инварианта, аналогичного (27), связывающего две взаимные системы (без каких-либо дополнительных ограничений на геометрическое распределение фаз) в трехмерном случае, и не должно существовать. Любые соотношения типа (27) предполагают, что усредняющая функция для изотропной двухкомпонентной смеси с концентрацией $1/2$ и геометрически эквивалентным распределением фаз определена однозначно. Однако можно указать изотропные трехмерные системы с геометрически эквивалентным распределением фаз, которые заведомо отличаются по своим свойствам. Для получения однозначного результата нужны какие-то дополнительные геометрические ограничения.

Для изотропных систем соотношение (27) можно переписать в виде

$$\sigma_{\text{eff}}(\theta,\sigma_1,\sigma_2)\sigma_{\text{eff}}'(\theta,\sigma_1,\sigma_2)$$
$$=\sigma_{\text{eff}}(\theta,\sigma_1,\sigma_2)\sigma_{\text{eff}}(\theta,\sigma_2,\sigma_1)=\sigma_1\sigma_2, \tag{28}$$

где θ — концентрация фазы с проводимостью σ_1. Рассмотрим симметричные системы, для которых перестановка местами σ_1 и σ_2 в формуле (28) эквивалентна замене θ на $1-\theta$. Вообще говоря, это дополнительное ограничение на геометрическое распределение фаз в системе, связанное со способом изменения концентрации. Оно означает, что если мы, меняя концентрацию фаз, переходим от системы с концентрацией θ к системе с концентрацией $1-\theta$ и далее поменяем фазы местами (уже без изменения геометрии), то получим систему, которая по своим свойствам будет эквивалентна исходной. Примерами таких систем может служить смесь двух порошков с различными проводимостями σ_1 и σ_2 либо „шахматная доска", на которой, скажем, белые квадратики меняют свой линейный размер так, что их концентрация изменяется от 0 до 1 без смены ориентации. Для таких систем (28) можно переписать в виде

$$\sigma_{\text{eff}}(\theta,\sigma_1,\sigma_2)\sigma_{\text{eff}}(1-\theta,\sigma_1,\sigma_2)=\sigma_1\sigma_2$$

или, опуская явную зависимость от σ_1 и σ_2,

$$\sigma_{\text{eff}}(\theta)\sigma_{\text{eff}}(1-\theta)=\sigma_1\sigma_2. \tag{29}$$

Из всех возможных изотропных распределений фаз в системе выделим теперь такие, для которых коэффициенты Фурье $\sigma_{\mathbf{k}}$ зависят только от модуля $\mathbf{k}$ и не зависят от его ориентации. Рассмотрим общее выражение для проводимости изотропной системы

$$\sigma_{\text{eff}}=\langle\sigma\rangle-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq0}\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}}}{\langle\sigma\rangle}$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq0}(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)^2\,\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1}}{\langle\sigma\rangle^2}-\ldots\,. \tag{30}$$

Очевидно, сделанного предположения еще не достаточно, чтобы провести независимое усреднение скалярных произведений под знаками сумм в (30), поскольку часть коэффициентов Фурье зависит от разности векторов $\mathbf{k}_i-\mathbf{k}_j$ и, следовательно, от их взаимной ориентации. Для модуля разности векторов можно записать

$$|\mathbf{k}_i-\mathbf{k}_j|^2=|\mathbf{k}_i|^2+|\mathbf{k}_j|^2-|\mathbf{k}_i|\,|\mathbf{k}_j|\cos\varphi, \tag{31}$$

где φ — угол между векторами. Рассмотрим комбинации скалярных произведений $(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)(\mathbf{f}_1\mathbf{f}_2)\ldots(\mathbf{f}\mathbf{f}_n)$. Для определенности будем считать, что векторы располагаются на плоскости в той же последовательности так, что $\mathbf{k}_1$ лежит между $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}_2$ и т. д. Другое распределение векторов не повлияет на дальнейшие рассуждения. Обозначим через α, β, γ углы между соответствующими векторами. Тогда можно записать

$$(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)(\mathbf{f}_1\mathbf{f}_2)(\mathbf{f}\mathbf{f}_2)=\cos\alpha\,\cos\beta\,\cos(\alpha+\beta)$$
$$=\cos^2\alpha\,\cos^2\beta-\cos\alpha\,\cos\beta\,\sin\alpha\,\sin\beta,$$
$$(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)(\mathbf{f}_1\mathbf{f}_2)(\mathbf{f}_2\mathbf{f}_3)(\mathbf{f}\mathbf{f}_3)=\cos\alpha\,\cos\beta\,\cos\gamma\,\cos(\alpha+\beta+\gamma)$$
$$=\cos^2\alpha\,\cos^2\beta\,\cos^2\gamma-\ldots\,. \tag{32}$$

Заметим далее, что, поскольку коэффициенты Фурье зависят только от модулей соответствующих векторов, то $\sigma_{\mathbf{k}_i-\mathbf{k}_j}=f\left(\sqrt{|\mathbf{k}_i|^2+|\mathbf{k}_j|^2-|\mathbf{k}_i|\,|\mathbf{k}_j|\cos\varphi}\right)$ — есть четная функция угла φ. Для случайных систем при выборе достаточно большого представительного объема V вместо суммирования по векторам с фиксированными модулями можно провести интегрирование по углам между соответствующими векторами. При этом интегралы от произведений четных функций вида $\sigma_{\mathbf{k}_i-\mathbf{k}_j}=f\left(\sqrt{|\mathbf{k}_i|^2+|\mathbf{k}_j|^2-|\mathbf{k}_i|\,|\mathbf{k}_j|\cos\varphi}\right)$ и нечетных функций, фигурирующих в (32), исчезают, и (30) приводится к виду

$$\sigma_{\text{eff}}=\langle\sigma\rangle-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq0}\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}}}{\langle\sigma\rangle}$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq0}(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)^2\,\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1}}{\langle\sigma\rangle^2}$$
$$-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq0}\sum_{\mathbf{k}_2\neq\mathbf{k}_1\neq0}(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)^2(\mathbf{f}_1\mathbf{f}_2)^2\,\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}\sigma_{\mathbf{k}_2}}{\langle\sigma\rangle^3}+\ldots\,. \tag{33}$$

Заменим теперь во всех суммах $(\mathbf{f}_i\,\mathbf{f}_j)^2 = \cos^2\varphi$ на $1 - \sin^2\varphi = 1 - [\mathbf{f}_i \times \mathbf{f}_j]^2$

$$\sigma_{\text{eff}} = \langle\sigma\rangle - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}}}{\langle\sigma\rangle} + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}\Big(1 - [\mathbf{f}\times\mathbf{f}_1]^2\Big)\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1}}{\langle\sigma\rangle^2} - \ldots\,. \tag{34}$$

Выделим члены ряда, для которых множители перед комбинациями коэффициентов Фурье равны 1, и применим к ним соотношения (20), (21), получим

$$-\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}}}{\langle\sigma\rangle} + \sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1}}{\langle\sigma\rangle^2} - \sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_2\neq\mathbf{k}_1\neq 0}\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}\sigma_{\mathbf{k}_2}}{\langle\sigma\rangle^3} + \ldots$$
$$= \left(-1 + \frac{(\langle\sigma'\rangle - \langle\sigma\rangle)}{\langle\sigma\rangle} - \frac{(\langle\sigma'\rangle - \langle\sigma\rangle)^2}{\langle\sigma\rangle^2} + \ldots\right)\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}}}{\langle\sigma\rangle}.$$

Ряд в круглых скобках суммируется и приводит к соотношению

$$\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\,\frac{(\langle\sigma'\rangle - \langle\sigma\rangle)^{n-1}}{\langle\sigma\rangle^{n-1}} = -\frac{\langle\sigma\rangle}{\langle\sigma'\rangle}. \tag{35}$$

Выделяя последовательно члены ряда, содержащие $[\mathbf{f}_i \times \mathbf{f}_j]^2$, $[\mathbf{f}_i \times \mathbf{f}_j]^2\,[\mathbf{f}_k \times \mathbf{f}_n]^2, \ldots$, и учитывая, что в случае изотропных коэффициентов Фурье, по-видимому, не важно, для какого именно коэффициента Фурье присутствует соответствующий множитель в виде квадрата векторного произведения, можно провести перенормировку всех членов ряда. Коэффициент перед произвольным членом $(k+1)$-й степени можно представить в виде

$$-\sum_{n=k}^{\infty}(-1)^{n-k}\,\frac{n!}{(n-k)!\,k!}\,\frac{(\langle\sigma'\rangle - \langle\sigma\rangle)^{n-k}}{\langle\sigma\rangle^{n-k}} = -\frac{\langle\sigma\rangle^k}{\langle\sigma'\rangle^k}. \tag{36}$$

Таким образом, ряд (33) для эффективной проводимости преобразуется к виду

$$\sigma_{\text{eff}} = \langle\sigma\rangle - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}}}{\langle\sigma'\rangle} - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}[\mathbf{f}\times\mathbf{f}_1]^2\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1}}{\langle\sigma'\rangle^2} - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_2\neq\mathbf{k}_1\neq 0}[\mathbf{f}\times\mathbf{f}_1]^2[\mathbf{f}_1\times\mathbf{f}_2]^2\,\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}\sigma_{\mathbf{k}_2}}{\langle\sigma'\rangle^3} + \ldots\,. \tag{37}$$

Подставим в последнее выражение коэффициенты Фурье для системы с переставленными компонентами $\sigma_{\mathbf{k}} = -\sigma'_{\mathbf{k}}$, а также добавим к полученному ряду разность $-\langle\sigma'\rangle + \langle\sigma'\rangle$

$$\sigma_{\text{eff}} = \langle\sigma\rangle - \langle\sigma'\rangle + \Bigg(\langle\sigma'\rangle - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{\sigma'_{-\mathbf{k}}\sigma'_{\mathbf{k}}}{\langle\sigma'\rangle} + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}[\mathbf{f}\times\mathbf{f}_1]^2\,\frac{\sigma'_{-\mathbf{k}}\sigma'_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma'_{\mathbf{k}_1}}{\langle\sigma'\rangle^2} - \ldots\Bigg). \tag{38}$$

Ряд в круглых скобках можно идентифицировать как ряд для эффективной проводимости системы, которая отличается от исходной перестановкой компонент местами при дополнительном условии, что значения сумм в (38) не изменятся, если векторные произведения заменить на соответствующие скалярные произведения.

Заметим, что если такое условие выполняется для члена третьей степени, то выражение для него можно получить в явном виде

$$\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}[\mathbf{f}\times\mathbf{f}_1]^2\,\frac{\sigma'_{-\mathbf{k}}\sigma'_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma'_{\mathbf{k}_1}}{\langle\sigma'\rangle^2} = \frac{1}{2}\,\frac{\theta(1-2\theta)(1-\theta)(\sigma_2-\sigma_1)^3}{\langle\sigma'\rangle^2}, \tag{39}$$

где θ — концентрация фазы с проводимостью σ_1. Легко проверить, что из (39) автоматически следует выполнение аналогичного условия для члена четвертой степени. Однако получить в явном виде выражение для этого члена не удается.

Из (38) окончательно имеем

$$\sigma_{\text{eff}}(\theta,\sigma_1,\sigma_2) - \sigma_{\text{eff}}(\theta,\sigma_2,\sigma_1) = \langle\sigma\rangle - \langle\sigma'\rangle. \tag{40}$$

Соотношение (40) выполняется, таким образом, для случайных изотропных систем при выполнении двух условий: 1) коэффициенты Фурье $\sigma_{\mathbf{k}}$ зависят только от модуля $\mathbf{k}$ и не зависят от его ориентации, 2) значения сумм в (38) не изменятся, если векторные произведения в них заменить на скалярные.

Отметим, что первое условие выполняется далеко не для всех изотропных систем. В качестве примера изотропной системы, для которой это условие не выполняется, можно привести систему со структурой „случайной“ шахматной доски, с детерминированной формой ячеек (в виде квадратов), но случайным распределением фаз по этим ячейкам. Такая система будет, очевидно, симметричной в указанном выше смысле. Численные оценки приводят к следующим выражениям для члена третьей степени для такой структуры:

$$\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}(\mathbf{f}\mathbf{f}_1)^2\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1}}{\langle\sigma\rangle^2} = g\,\frac{\theta(1-2\theta)(1-\theta)(\sigma_1-\sigma_2)^3}{\langle\sigma\rangle^2},$$

$$\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\sum_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}[\mathbf{f}\times\mathbf{f}_1]^2\,\frac{\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1}}{\langle\sigma\rangle^2} = (1-g)\,\frac{\theta(1-2\theta)(1-\theta)(\sigma_1-\sigma_2)^3}{\langle\sigma\rangle^2}. \tag{41}$$

Вычисления проводились для представительного объема V, содержащего 100×100 ячеек, которые случайным образом с вероятностью θ заполнялись фазой 1 либо с вероятностью $1-\theta$ фазой 2. Суммирование по дискретному набору компонент векторов $\mathbf{k}_i$ проводилось в пределах 400 значений для каждой компоненты. Для контроля точности вычислений одновременно проводилось вычисление суммы $\sum\limits_{\mathbf{k}\neq 0}\sum\limits_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1}$, значение которой известно точно. Полученные зависимости идеально описываются соотношениями (41). Однако значения суммы $\sum\limits_{\mathbf{k}\neq 0}\sum\limits_{\mathbf{k}_1\neq\mathbf{k}\neq 0}\sigma_{-\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\sigma_{\mathbf{k}_1}$ (при максимальных пределах суммирования) составляют около 83% от точных значений, даваемых функцией $\theta(1-2\theta)(1-\theta)(\sigma_1-\sigma_2)^3$. При этом $g \approx 0.55$ и возрастает с увеличением пределов суммирования. По-видимому, эта величина стремится к значению критической концентрации для случайной шахматной доски, которая, как известно [9], составляет ~ 0.59. Для более точного вывода пределы суммирования необходимо увеличить в 3–4 раза, что приводит к существенному возрастанию машинного времени.

С другой стороны, соотношение (40) имеет симметричный характер и, следовательно, применимо только к симметричным системам. Это позволяет записать уравнение (40) в виде

$$\sigma_{\text{eff}}(\theta) - \sigma_{\text{rff}}(1-\theta) = \langle\sigma\rangle - \langle\sigma'\rangle \tag{42}$$

и решать его совместно с (29), что приводит к выражению для $\sigma_{\text{eff}}(\theta)$, которое дает метод эффективной среды [10].

Можно предположить, что условия, при которых получено соотношение (40), будут одновременно выполняться для так называемой пуассоновской случайной среды [11], для которой случайный характер имеют как форма ячеек, так и распределение фаз по ячейкам.

Список литературы

[1] *Herring C.* // J. Appl. Phys. 1960. Vol. 31. N 11. P. 1939–1953.
[2] *Кудинов В.А., Мойжес Б.Я.* // ЖТФ. 1972. Вып. 3. С. 591–598.
[3] *Beran M.J.* // Phys. Stat. Sol. (a). 1971. Vol. 6. N 2. P. 365–384.
[4] *Corson P.B.* // J. Appl. Phys. 1974. Vol. 45. N 7. P. 3159–3182.
[5] *Hori M.* // J. Math. Phys. 1973. Vol. 14. N 4. P. 514–523.
[6] *Фокин А.Г.* // УФН. 1996. Т. 166. № 10. С. 1069–1093.
[7] *Дыхне А.М.* // ЖЭТФ. 1970. Т. 59. № 1. С. 110–115.
[8] *Балагуров Б.Я.* // ЖЭТФ. 1981. № 2. С. 665–671.
[9] *Berlyand L., Golden K.* // Phys. Rev. (B). 1994. Vol. 50. N 4. P. 2114–2117.
[10] *Bruggeman D.A.G.* // Ann. Phys. 1935. Vol. 25. N 5. P. 636–644.
[11] *Займан Дж.* Модели беспорядка. М.: Мир, 1982. 591 с.